



HAL
open science

Caractérisation expérimentale et modélisation micromécanique de la perméabilité et de la résistance de roches argileuses

François Bignonnet

► To cite this version:

François Bignonnet. Caractérisation expérimentale et modélisation micromécanique de la perméabilité et de la résistance de roches argileuses. Matériaux et structures en mécanique [physics.class-ph]. Université Paris Est, 2014. Français. NNT: . tel-01127305v1

HAL Id: tel-01127305

<https://enpc.hal.science/tel-01127305v1>

Submitted on 9 Dec 2014 (v1), last revised 7 Mar 2015 (v2)

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.

UNIVERSITÉ —
— PARIS-EST

École doctorale SIE

THÈSE

présentée pour l'obtention du diplôme de

DOCTEUR

de l'Université Paris Est

Spécialité : Structures et Matériaux

par

François BIGNONNET

intitulée

**Caractérisation expérimentale et modélisation
micromécanique de la perméabilité et de la résistance
de roches argileuses**

soutenue à Champs sur Marne le 12 novembre 2014
devant le jury composé de

<i>Rapporteurs :</i>	Djimédo KONDO	Université Pierre et Marie Curie
	Jian-Fu SHAO	Université de Lille 1
<i>Examineurs :</i>	Jean-Dominique BARNICHON	IRSN
	Laurent JEANNIN	GDF SUEZ E&P
<i>Invité :</i>	Patrick EGERMANN	Storengy
<i>Co-directeur :</i>	Frédéric SKOCZYLAS	École Centrale de Lille
<i>Directeur :</i>	Luc DORMIEUX	École des Ponts ParisTech

Remerciements

Je souhaite remercier en premier lieu Pierre Bérest qui, alors que je lui partageais mon envie de me lancer dans une thèse, m'a proposé de contacter Luc Dormieux. Dès ma première entrevue avec Luc Dormieux, j'ai été interpellé par son dynamisme et sa réactivité.

Je voudrais remercier Jian-Fu Shao qui m'a fait l'honneur de présider mon jury de thèse ainsi que de rapporter mon mémoire. Je tiens à remercier chaleureusement Djimédo Kondo d'avoir accepté de rapporter mon mémoire et pour ses remarques constructives. Un grand merci à Jean-Dominique Barnichon pour l'intérêt qu'il a présenté pour l'évaluation de ce travail.

Je ne pourrais jamais assez remercier Luc Dormieux d'avoir dirigé mon travail. Que ce soit pendant ses cours de micromécanique, de mécanique des milieux continus ou lors de nos discussions, je n'ai pu qu'apprécier sa grande pédagogie. Je le remercie de la confiance qu'il m'a accordé en m'intégrant dans l'équipe enseignante du cours de mécanique des milieux continus. Tout au long de mon travail, j'ai eu la chance d'admirer et de bénéficier de sa vivacité, son intuition et sa rigueur qui m'ont rendu passionnante l'étude de la mécanique.

J'ai également eu le plaisir de travailler sous la direction de Frédéric Skoczylas. Si l'opportunité d'un travail en co-tutelle a ouvert l'éventail des moyens scientifiques, il a aussi impliqué de nombreux aller-retours qui m'ont été facilités par l'accueil chaleureux dont Frédéric Skoczylas a fait une marque de fabrique de son équipe. J'ai été marqué par la créativité et la qualité des moyens expérimentaux mis en place dans son laboratoire.

Mes deux directeurs m'ont montré que qualité du travail et qualités humaines peuvent aller de concert.

Laurent Jeannin m'a continuellement guidé tout au long de mes recherches. Aussi bien à l'aise dans le détail des calculs que soucieux des finalités industrielles, il a tiré ce travail vers le haut par ses fréquentes interrogations et ses nombreux conseils. J'ai apprécié les échanges fructueux avec Patrick Egermann, qui a sûrement me conseiller grâce à sa maîtrise des techniques expérimentales notamment.

Mon séjour à l'École des Ponts aura été marqué par les échanges stimulants que j'ai pu avoir avec les membres de l'équipe Multi-échelles du laboratoire Navier et leur accueil chaleureux. Je remercie particulièrement Patrick De Buhan (pour le cours de plasticité à calcul à la rupture), Karam Sab (pour les conseils sur les méthodes de filtrage), Denis Garnier (pour les conseils d'enseignement ou informatiques), Eric Lemarchand, Ghazi Hassen (pour les critères et les révisions des TD), Sébastien Brisard (qui m'a tout appris sur les méthodes FFT) et Camille Chateau. J'ai aussi eu la chance de partager les repas, les pauses, les sorties sportives mais aussi les conseils et discussions techniques avec Maged, Maxime, Jérémy, Grégory, Minh-Tuan, Zheng, Viet-Tuan, Dac-Loi, Yassine, Linlin, Antoine et Thomas. Je tiens à adresser un remerciement particulier à Marie-Françoise et Rachida dont l'efficacité en matière de questions administratives est redoutable.

À l'École Centrale de Lille, j'ai eu le plaisir de collaborer et partager les repas avec l'équipe du Génie Civil : merci à Catherine Davy (pour les images MEB et les mesures ATG), Franck Agostini (pour les conseils sur tous les capteurs et LabView), Zhibo Duan (pour son expérience et le relais sur les manip en mon absence), Thierry, Marie-Claude et Ludovic (qui sont toujours là pour régler les problèmes techniques) ainsi que Sofia, Wei, Jian-Feng, Yang et Yao.

Enfin, un grand merci à mes parents, à mon frère et à Eliška, toujours à mes côtés dans les hauts et les bas.

Résumé

Ce mémoire s'intéresse aux propriétés de transfert, de résistance et de plasticité de roches argileuses. Deux enjeux industriels directs sont la détermination du potentiel de production de gaz naturel des roches mères et de la capacité de rétention des roches de couvertures utilisées pour les stockages de gaz ou de déchets en milieu souterrain. Dans un premier temps, la perméabilité est décrite comme résultant de l'homogénéisation de l'écoulement d'un fluide visqueux dans le réseau poreux. Un cadre variationnel analogue à celui de Hashin et Shtrikman en élasticité est établi et mis à profit pour proposer une méthode numérique basée sur la Transformée de Fourier Rapide (FFT) pour le calcul efficace de bornes sur la perméabilité à partir de représentations tridimensionnelles voxelisées de milieux poreux. Par ailleurs, des techniques d'homogénéisation analytiques basées sur la définition de cellules perméables équivalentes sont proposées pour fournir des briques élémentaires pour la modélisation micro-mécanique de la perméabilité. Le phénomène de glissement du gaz aux parois est considéré pour rendre compte quantitativement d'effets du type Klinkenberg sur la perméabilité au gaz. L'effet d'une saturation partielle du réseau poreux sur la perméabilité et la pression de percée sont étudiés dans le cas de morphologies particulières des pores. En parallèle, une campagne expérimentale est conduite sur différentes roches argileuses issues de forages pour caractériser leur porosité et leur perméabilité sous diverses conditions de confinement mécanique et de saturation partielle en eau. Dans un second temps, les capacités de résistance sont étudiées sous hypothèse de rupture ductile. Une méthode numérique efficace basée sur la FFT est proposée pour encadrer par l'extérieur le domaine de résistance de milieux hétérogènes à géométrie complexe. D'autre part, une modélisation analytique à trois échelles de la résistance d'un matériau granulaire renforcé par inclusions rigides avec interfaces imparfaites est présentée. Enfin, une relecture élasto-plastique de ce modèle de résistance a abouti à un modèle purement micromécanique, dont l'interprétation macroscopique est analogue au modèle Cam-clay, avec écrouissage par changement de porosité et ligne d'états critiques.

Abstract

This thesis is focused on the strength, plasticity and transport properties of mudrocks. Two industrial applications are the shale gas production and the underground gas or waste storage. In a first part, the permeability is described as resulting from the homogenisation of the flow of a Newtonian fluid within the pore space. A Hashin-Shtrikman like framework is derived for the permeability upscaling and used to propose a FFT-based numerical method for the efficient computation of bounds on the permeability, directly compatible with a voxelised representation of the pore space. As an alternative, analytic homogenisation techniques based on the definition of equivalent permeable cells are developed to provide building blocks for the micro-mechanical modelling of permeability. The gas slip at pore walls is accounted for to model Klinkenberg effects for gas permeability. Partial water saturation is also considered to model relative gas permeability and gas breakthrough pressure. In the mean time, a thorough experimental investigation of the evolution of porosity and permeability with confining pressure and partial water saturation has been carried out on several types of mudrocks. In a second part, the ductile strength properties is studied. An efficient FFT-based numerical method is proposed to compute the homogenised strength domain of heterogeneous media with complex micro-structures. Next, a three-scale analytic model of the strength of a granular media reinforced by rigid inclusions with imperfect interfaces is presented. In a third part, this strength model is re-interpreted in plasticity to propose a purely micro-mechanical model, whose macroscopic interpretation is similar to the Cam-clay model, including hardening or softening due to an evolving porosity and a critical state line.

Table des matières

Introduction	v
I Perméabilité	1
1 Approche micromécanique de la perméabilité	3
1.1 Développement asymptotique des équations de Stokes	4
1.1.1 Équations de Stokes	4
1.1.2 Équations adimensionnées	5
1.1.3 Développement asymptotique à deux échelles d'espace	6
1.1.4 Deux échelles de systèmes d'équations aux dérivées partielles	6
1.2 Définition du problème d'homogénéisation pour la perméabilité	9
1.2.1 Équations de champs	9
1.2.2 Conditions aux limites	9
1.2.3 Solution du problème d'homogénéisation	11
1.3 Cadres variationnels classiques	12
1.3.1 Dualisation de l'équation d'équilibre : un lemme de Hill pour la perméabilité	12
1.3.2 Minimum de l'énergie potentielle	12
1.3.3 Minimum de l'énergie complémentaire	13
1.3.4 Fluctuation microscopique des contraintes	14
1.4 Bornes sur la perméabilité d'un milieu poreux	14
1.4.1 Préliminaire : fonctions de corrélation	14
1.4.2 Bornes "à deux points"	15
1.4.3 Bornes "à trois points"	18
1.5 Glissement aux parois	20
1.5.1 Théorie cinétique des gaz	20
1.5.2 Modification des principes variationnels	21
2 Cadre variationnel type Hashin-Shtrikman pour la perméabilité	23
2.1 Nouveau cadre variationnel type Hashin-Shtrikman	24
2.1.1 Extension du problème d'écoulement	24
2.1.2 Transformation de Legendre	27
2.1.3 Fonctionnelle de Hashin et Shtrikman	28
2.1.4 Cadre variationnel simplifié	29
2.2 Bornes sur la perméabilité par une méthode FFT	30
2.2.1 Discrétisation	30
2.2.2 Optimisation	32
2.2.3 Implémentation pratique	33
2.2.4 Validation	34
2.2.5 Application : sphéroïdes inter-pénétrables aléatoirement dispersés	39

3	Estimations micromécaniques de la perméabilité	45
3.1	Schémas basés sur une inclusion dans un milieu infini	48
3.1.1	Schémas basés sur le problème d'Eshelby	48
3.1.2	Schémas basés sur l'écoulement de Stokes autour d'une particule	51
3.2	Cellules perméables équivalentes sphériques	53
3.2.1	Problème(s) auxiliaire(s)	53
3.2.2	Perméabilité équivalente du motif morphologique sphérique	54
3.3	Cellules équivalentes cylindriques de section elliptique	57
3.3.1	Description géométrique de la cellule équivalente	57
3.3.2	Représentation par les potentiels complexes	58
3.3.3	Exemple : écoulement entre deux cercles concentriques	59
3.3.4	Transformation conforme de Joukowski	60
3.3.5	Perméabilité de la cellule équivalente elliptique	61
3.4	Cellules équivalentes sphéroïdales	62
3.4.1	Description géométrique de la cellule équivalente	62
3.4.2	Écoulement axisymétrique	65
3.4.3	Écoulement tridimensionnel	68
3.4.4	Encadrements de la perméabilité équivalente	70
3.4.5	Discussion : effet des conditions aux limites	71
3.4.6	Perméabilité d'assemblages de grains anisotropes inter-pénétrables	76
3.5	Estimations basées sur l'écoulement de Poiseuille	78
3.5.1	Écoulement de Poiseuille avec glissement aux parois	78
3.5.2	Définition d'une cellule perméable équivalente	79
3.6	Modélisation de l'effet Klinkenberg	80
3.6.1	Modèle basé sur l'écoulement de Poiseuille	80
3.6.2	Modèle basé sur les cellules perméables équivalentes sphériques	82
3.7	Perméabilité relative et pression de percée	83
3.7.1	Modèle basé sur l'écoulement de Poiseuille	84
3.7.2	Modèle basé sur les cellules perméables équivalentes sphéroïdales?	87
4	Caractérisation expérimentale de roches argileuses	89
4.1	Matériaux et dispositifs expérimentaux	90
4.1.1	Origines, aspect et préparation des matériaux	90
4.1.2	État sec, saturé et partiellement saturé	93
4.1.3	Confinement en cellule et dispositifs d'injection de gaz	95
4.1.4	Presse d'essais mécaniques et jauges de déformation	96
4.2	Méthodes expérimentales	96
4.2.1	Caractérisation du réseau poreux	96
4.2.2	Perméabilités intrinsèque et relative au gaz	98
4.2.3	Pression de percée	102
4.2.4	Élasticité : effet de la saturation	102
4.2.5	Poro-mécanique	102
4.3	Résultats	103
4.3.1	Caractérisation du réseau poreux	103
4.3.2	Perméabilités effective, intrinsèque et relative au gaz	105
4.3.3	Propriétés poro-mécaniques	112

II	Résistance	115
5	Critère de résistance : homogénéisation numérique	117
5.1	Résistance d'un milieu hétérogène	118
5.1.1	Description des capacités de résistance	118
5.1.2	Homogénéisation des capacités de résistance	119
5.1.3	Détermination de la frontière du domaine de résistance macroscopique	121
5.2	Approche cinématique par une méthode FFT non linéaire	123
5.2.1	Fonctionnelle Lagrangien augmenté	123
5.2.2	Discrétisation	124
5.2.3	Algorithme de résolution	125
5.2.4	Résolution l'équation non-linéaire	126
5.3	Résultats numériques	129
5.3.1	Critère de Von Mises	129
5.3.2	Critère elliptique	132
5.3.3	Critère de Drucker Prager	134
6	Critère de résistance avec effets d'interfaces	137
6.1	Modèle micromécanique de la résistance d'une roche argileuse	138
6.1.1	Morphologie retenue	138
6.1.2	Propriétés des constituants	138
6.2	Équations d'état limite	142
6.2.1	Méthodologie	142
6.2.2	Lois de comportement visqueux non linéaire fictives	143
6.3	Homogénéisation linéaire et non linéaire	145
6.3.1	Homogénéisation linéaire	146
6.3.2	Homogénéisation non linéaire	150
6.4	Critères de résistance macroscopiques	151
6.4.1	Interfaces parfaites	151
6.4.2	Interfaces de Tresca	152
6.4.3	Interfaces de Mohr-Coulomb	154
6.5	Effet d'une pression de fluide dans les pores de la matrice	163
6.5.1	Existence d'une contrainte effective pour la résistance de la matrice	163
6.5.2	Résistance du matériau argileux renforcé en présence d'un fluide	165
III	Plasticité	171
7	Plasticité	173
7.1	Présentation du matériau à trois échelles	175
7.1.1	Morphologie	175
7.1.2	Constituants	175
7.2	Elasto-plasticité de la matrice argileuse	176
7.2.1	Élasticité de la matrice	176
7.2.2	Plasticité de la matrice	176
7.2.3	Bilan de variation de volume micro	178
7.2.4	État critique et écoulement plastique libre de la matrice	178
7.2.5	Simulations élasto-plastiques	180
7.3	Élasto-plasticité du matériau renforcé	183
7.3.1	Élasticité du matériau renforcé	183
7.3.2	Plasticité du matériau renforcé	183

7.3.3	Écrouissage par dégradation des propriétés d'interfaces	186
7.3.4	Bilan de variation de volume méso	186
7.3.5	État critique et écoulement plastique libre du matériau renforcé	187
7.3.6	Simulations élasto-plastiques	189
Annexes		197
A Fonctions de corrélations pour sphères pénétrables aléatoires		199
B Opérateurs de Green		201
B.1	Propriétés des opérateurs de Green	201
B.1.1	Opérateur d'ordre 2	201
B.1.2	Opérateurs d'ordre 3	201
B.1.3	Opérateur d'ordre 4	202
B.2	Opérateurs de Green du milieu infini isotrope	203
B.3	Opérateurs de Green du milieu isotrope périodique	203
B.3.1	Conventions utilisées pour les transformées de Fourier	203
B.3.2	Opérateurs continus	204
B.3.3	Opérateurs discrétisés	205
C Polynômes et fonctions associées de Legendre, fonctions de Gegenbauer		209
C.1	Polynômes et fonctions associées de Legendre	209
C.2	Fonctions de Gegenbauer	210
D Résultats expérimentaux		211
D.1	Porosité	211
D.2	Perméabilité	212
D.2.1	Effet du confinement à l'état sec	212
D.2.2	Effet du glissement aux parois à l'état sec	213
D.2.3	Effet de la saturation en eau	214
D.2.4	Endommagement par un cycle hydrique	216
E Convergence de l'algorithme d'Uzawa appliqué au lagrangien augmenté		219
F Résistance d'une sphère composite		223
F.1	Encadrement de la contrainte isotrope maximale supportable	223
F.1.1	Approche statique	223
F.1.2	Approche cinématique : majorants	224
F.2	Majorant de la contrainte déviatorique maximale supportable	227
G Simulations élasto-plastiques		231
G.1	Algorithme d'évolution élasto-plastique	231
G.2	Quelques résultats de simulations élasto-plastiques	232
Conclusion et perspectives		235
Bibliographie		239

Introduction

Les roches argileuses focalisent l'attention depuis au moins deux décades pour deux types d'enjeux industriels. D'une part, leur très faible perméabilité en font des candidats naturels pour les stockages en milieu géologique. Elles sont choisies pour jouer le rôle de roche de couverture en scellement des stockages de gaz naturel ou de dioxyde de carbone, ou encore de roche hôte des sites de stockages de déchets radioactifs. D'autre part, les roches argileuses les plus riches en matières organiques sont des roches mères potentiellement sources d'hydrocarbures, sous réserve d'une maturation appropriée des composés organiques. Traditionnellement, seuls les hydrocarbures ayant migré de ces roches mères vers des roches réservoirs plus perméables (elles même scellées par une roche de couverture) étaient d'intérêt pour l'extraction de gaz ou de pétrole. Au cours des dernières décennies, les cours croissants des hydrocarbures et de nouvelles techniques ont rendu envisageables la production non conventionnelle de gaz et de pétrole, comme par exemple l'extraction directe des hydrocarbures emprisonnés dans les roches mères.

La très faible perméabilité est indéniablement un point commun partagé par les roches argileuses, du fait de la finesse de leurs constituants. Cependant, le terme "roches argileuses" masque une multitude de matériaux : les constituants initiaux, l'environnement de dépôt, l'historique de compaction, les évolutions diagénétiques sont autant de facteurs de diversité, à toutes les échelles d'espace. Il est donc illusoire de prétendre modéliser le comportement des roches argileuses en général.

L'objectif de cette étude est de gagner en compréhension sur le lien entre la microstructure des roches argileuses et quelques propriétés d'intérêt pour leurs applications industrielles comme la perméabilité, la résistance et la plasticité. Par exemple, on souhaite dans l'idéal fournir à un ingénieur réservoir des outils de modélisation et de caractérisation expérimentale qui lui permettent de valoriser la connaissance d'un réservoir tirée de quelques forages. L'information provient de logs pétro-physiques enregistrés par des sondes sur toute la hauteur d'un puits et est complétée par quelques carottages. Les logs fournissent des données telles que l'évolution de la porosité, de la minéralogie, de la saturation en eau avec la profondeur. Ces informations sont généralement imprécises et il faut les recalibrer ponctuellement par des mesures pétro-physiques en laboratoire sur des carottes.

Les moyens utilisés pour parvenir à cet objectif sont la modélisation multi-échelles (ou micromécanique) et les expériences macroscopiques sur des échantillons issus de carottages.

La micromécanique part d'une description partielle ou complète des propriétés des constituants et de leur organisation spatiale à l'échelle microscopique pour proposer une modélisation du comportement macroscopique d'un matériau. L'intérêt primordial de cette approche réside dans le fait que les modèles proposés reposent sur des mécanismes physiques clairement identifiés à l'échelle microscopique. Par conséquent, tous les paramètres ont un sens physique bien précis. Si ces paramètres concernent la morphologie, on peut espérer les quantifier objectivement par des mesures et des méthodes d'imagerie en microscopie. Si ces paramètres décrivent les propriétés des constituants, ils peuvent soit être connus (exemple : propriétés élastiques de la pyrite) soit non mesurables. Un paramètre décrivant une propriété microscopique non mesurable peut être déduit d'essais macroscopiques sur un nombre très restreint d'échantillons. Le modèle devra bien

entendu reproduire la réponse macroscopique sur ces échantillons, mais n'aura pas besoin d'être recalé pour prévoir la réponse d'autres échantillons, dont par exemple les fractions volumiques de constituants sont différentes. En ce sens, la micromécanique fournit des modèles robustes.

Les expériences macroscopiques sont primordiales à plusieurs égards. Dans un premier temps, une série d'expérimentations fines permet d'identifier les manifestations macroscopiques du comportement du matériau. Une bonne interprétation des phénomènes observés expérimentalement est alors source d'hypothèses sur les mécanismes prépondérants à prendre en compte à l'échelle microscopique dans un modèle micromécanique. Dans un second temps, l'expérimentation permet de statuer sur la validité d'un modèle. Enfin, si nécessaire, les paramètres physiques non mesurables de l'échelle microscopique peuvent être identifiés par approche inverse.

Il s'agit donc d'un véritable dialogue entre modélisation et expérimentation. Lorsqu'un modèle satisfaisant est établi, l'ingénieur réservoir pris en exemple auparavant pourra améliorer sa connaissance du réservoir par la stratégie suivante :

1. caler les mesures pétro-physiques des logs ainsi que les paramètres non mesurables des modèles micromécaniques par des expérimentations en laboratoire sur quelques carottes,
2. extrapoler sur tout le puits les propriétés mécaniques d'intérêt à l'aide des modèles micromécaniques validés expérimentalement en quelques points et des évolutions des propriétés physiques recalées issues des logs.

La **partie I** est principalement consacrée à l'étude de la perméabilité, qui gouverne aussi bien le taux de production d'un puits que la capacité de scellement d'une roche couverture d'un stockage. Un cadre et des outils micromécaniques sont mis en place pour déterminer la perméabilité d'un matériau à partir de la connaissance de la morphologie de son espace poreux. En parallèle, une caractérisation expérimentale des propriétés pétro-physiques et de la perméabilité est menée sur un ensemble de roches argileuses d'origines variées.

Le chapitre 1 revisite le cadre micromécanique qui permet la transition entre la description de l'écoulement d'un fluide dans le réseau poreux par les équations de Stokes à l'échelle microscopique à sa description par les équations de Darcy à l'échelle macroscopique. Une tentative de s'affranchir du cadre des conditions de périodicité est proposée, puis l'établissement de bornes supérieures sur la perméabilité basées sur des descripteurs géométriques statistiques est présenté dans un cadre unifié et simplifié sur la base de principes variationnels classiques. L'annexe A fournit un complément sur les valeurs prises par les descripteurs géométriques statistiques utilisés dans le cas particulier d'un assemblage mono-disperse de sphères inter-pénétrables.

Le chapitre 2 établit un nouveau cadre variationnel pour l'homogénéisation de la perméabilité qui présente une certaine analogie avec le cadre variationnel de Hashin et Shtrikman en élasticité. Ce nouveau cadre variationnel est mis à profit pour proposer une méthode numérique efficace "type FFT" pour le calcul de bornes sur la perméabilité de matériaux poreux à partir d'une représentation voxelisée de la géométrie de l'espace poreux. L'annexe B rappelle quelques propriétés des opérateurs de Green ainsi que leur discrétisation qui est nécessaire pour l'implémentation pratique de la méthode numérique.

Le chapitre 3 propose une réflexion sur la stratégie à adopter pour construire des estimations de la perméabilité à partir de motifs morphologiques simplifiés. Sur la base de la définition de "cellules perméables équivalentes", une bibliothèque de briques élémentaires pour l'élaboration de modèles micromécaniques de la perméabilité est mise en place, en s'efforçant de prendre en compte l'effet du glissement aux parois pour les gaz ainsi que la forme des constituants de la microstructure. Ces outils sont appliqués à la modélisation d'effets de type Klinkenberg et à une tentative de modélisation de la perméabilité relative. L'annexe C détaille les expressions des fonctions associées de Legendre et des fonctions de Gegenbauer qui ont été utilisées pour le calcul des estimations de la perméabilité en géométrie sphéroïdale.

Le chapitre 4 relate la campagne de caractérisation expérimentale des propriétés pétrophysiques et de transfert conduite sur diverses roches argileuses. L'accent est porté sur la caractérisation de l'espace poreux et des propriétés de transfert. La porosité, dont la valeur joue un rôle déterminant sur la quantité de gaz en place dans un réservoir, est délicate à quantifier lorsque les pores sont de taille nano-métrique. Les perméabilités très faibles constituent par ailleurs une gageure pour les mesures en raison des longues durées de mise à l'équilibre. Les effets de la pression de confinement, de la saturation partielle en eau et du glissement aux parois sont étudiés en détail. Enfin, la pression de percée du gaz à travers une roche saturée en eau est mesurée sur plusieurs roches de couverture. L'annexe D synthétise un ensemble de résultats expérimentaux auxquels se réfère ce chapitre.

La **partie II** est dédiée à l'homogénéisation des propriétés de résistance de matériaux ductiles hétérogènes.

Le chapitre 5 rappelle le cadre de l'homogénéisation des propriétés de résistance et la possibilité de définir un problème visqueux fictif dont la solution caractérise les états de contrainte sur la frontière du domaine de résistance macroscopique. Une méthode numérique efficace pour résoudre ce problème visqueux fictif non linéaire est proposée pour l'homogénéisation des propriétés de résistance en conditions aux limites périodiques. La méthode est basée sur l'introduction d'une grille de discrétisation régulière et le recours aux transformées de Fourier rapides (FFT). L'annexe E présente de nouveaux résultats concernant la convergence de l'algorithme numérique utilisé pour la résolution du système discret auquel la méthode conduit.

Le chapitre 6 introduit la prise en compte d'imperfections des interfaces entre les différents constituants. L'homogénéisation des propriétés de résistance est alors conduite par résolution d'un problème visqueux non linéaire fictif au moyen de la méthode sécante modifiée. Cette méthode permet l'estimation analytique des propriétés non linéaires par des schémas basés sur la solution d'un problème de type Eshelby, ici généralisé avec interfaces imparfaites. Ce chapitre présente un modèle micromécanique à trois échelles de description de matériaux constitués d'une matrice argileuse renforcée par des inclusions dont l'interface avec la matrice peut être imparfaite. La matrice est elle-même supposée être un assemblage de grains en contact au travers d'interfaces imparfaites à l'échelle inférieure. L'annexe F propose une autre méthode d'estimation des propriétés de résistance d'un composite à matrice renforcé par inclusions, sur la base de la résolution d'un problème de calcul à la rupture sur une sphère composite.

La **partie III** présente une relecture en élasto-plasticité des critères de résistances établis au chapitre 6.

Le chapitre 7 propose d'utiliser les mécanismes de ruine déterminés au chapitre 6 comme mécanismes d'écoulement plastique de la microstructure. La grande sensibilité à la porosité des critères de résistance précédemment introduits est mise à profit pour proposer un écrouissage de la matrice argileuse par changement de porosité. À l'échelle du matériau argileux renforcé par inclusions rigides, une hypothèse de dégradation des interfaces entre matrice et inclusions est de plus introduite et entraîne la compétition entre deux mécanismes d'écrouissage de signes opposés lors d'une charge plastique du matériau. L'annexe G présente l'algorithme utilisé pour les simulations élasto-plastiques ainsi que quelques résultats de simulations sur des trajets de chargement en cellule triaxiale.

* *

*

Première partie

Perméabilité

Chapitre 1

Approche micromécanique de la perméabilité

Résumé : *L'objet de ce chapitre est la modélisation micromécanique de la perméabilité. La perméabilité est présentée comme le résultat de l'homogénéisation micro-méso des équations de Stokes pour un matériau poreux (Stokes→Darcy). Le problème de micromécanique est soigneusement défini à l'aide d'un développement asymptotique à deux échelles. Les cadres variationnels classiques associés à ce problème sont établis. À l'aide de ce formalisme, une présentation cohérente et originale de bornes existantes comme nouvelles sur la perméabilité d'un matériau granulaire est proposée. Ces bornes reposent sur des descriptions statistiques de la géométrie de l'espace poreux par l'intermédiaire de fonctions de corrélation. Enfin, le phénomène de glissement aux parois dans le cas de l'écoulement d'un gaz est exposé et intégré au problème d'homogénéisation.*

Sommaire

1.1	Développement asymptotique des équations de Stokes	4
1.1.1	Équations de Stokes	4
1.1.2	Équations adimensionnées	5
1.1.3	Développement asymptotique à deux échelles d'espace	6
1.1.4	Deux échelles de systèmes d'équations aux dérivées partielles	6
1.2	Définition du problème d'homogénéisation pour la perméabilité	9
1.2.1	Équations de champs	9
1.2.2	Conditions aux limites	9
1.2.3	Solution du problème d'homogénéisation	11
1.3	Cadres variationnels classiques	12
1.3.1	Dualisation de l'équation d'équilibre : un lemme de Hill pour la perméabilité	12
1.3.2	Minimum de l'énergie potentielle	12
1.3.3	Minimum de l'énergie complémentaire	13
1.3.4	Fluctuation microscopique des contraintes	14
1.4	Bornes sur la perméabilité d'un milieu poreux	14
1.4.1	Préliminaire : fonctions de corrélation	14
1.4.2	Bornes "à deux points"	15
1.4.3	Bornes "à trois points"	18
1.5	Glissement aux parois	20
1.5.1	Théorie cinétique des gaz	20
1.5.2	Modification des principes variationnels	21

Notations :

- $\mathbf{1}$ et \mathbb{I} désignent respectivement le tenseur identité d'ordre deux et d'ordre quatre. $\mathbb{J} = \frac{1}{3}\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$ et $\mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J}$ désignent respectivement les tenseurs d'ordre quatre de projection sphérique et déviatorique.
- Le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ est décomposé en contraintes moyenne σ_m et déviatorique $\boldsymbol{\sigma}_d$ définis par :

$$\sigma_m = \frac{1}{3}\text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \quad ; \quad \boldsymbol{\sigma}_d = \boldsymbol{\sigma} - \sigma_m \mathbf{1} \quad ; \quad \sigma_d = \sqrt{\boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\sigma}_d}.$$
- Le taux de déformation \mathbf{d} est décomposé en parties volumique d_v et déviatorique \mathbf{d}_d définies par :

$$d_v = \text{tr}(\mathbf{d}) \quad ; \quad \mathbf{d}_d = \mathbf{d} - \frac{1}{3}d_v \mathbf{1} \quad ; \quad d_d = \sqrt{\mathbf{d}_d : \mathbf{d}_d}.$$
- Le vecteur contrainte $\mathbf{T} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ agissant sur une surface de normale unitaire \mathbf{n} est décomposé en contraintes normale T_n et tangentielle T_t :

$$\mathbf{T}_t = (\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cdot \mathbf{T} \quad ; \quad T_t = \sqrt{\mathbf{T}_t \cdot \mathbf{T}_t} \quad ; \quad T_n = \mathbf{T} \cdot \mathbf{n}.$$
- Le saut de vitesse $[[\mathbf{v}]]$ à travers une surface est décomposé en saut de vitesse normal $[[v_n]]$ et tangential $[[v_t]]$:

$$[[\mathbf{v}_t]] = (\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cdot [[\mathbf{v}]] \quad ; \quad [[v_t]] = \sqrt{[[\mathbf{v}_t]] \cdot [[\mathbf{v}_t]]} \quad ; \quad [[v_n]] = [[\mathbf{v}]] \cdot \mathbf{n}.$$
- Les moyennes volumiques d'une fonction a sur un VER Ω , une phase Ω_m et une interface Γ_i sont notées respectivement $\bar{a}^\Omega = \bar{a}$, \bar{a}^m et \bar{a}^{Γ_i} .

1.1 Développement asymptotique des équations de Stokes

La présentation s'appuie les travaux fondateurs de Auriault et Sanchez-Palencia [3] et sur la présentation de Boutin [18].

1.1.1 Équations de Stokes

Afin de rendre compte des concepts de perméabilité et de loi de Darcy à l'échelle macroscopique, on considère à l'échelle microscopique l'écoulement d'un fluide Newtonien incompressible dans un milieu poreux. Le milieu poreux occupe le domaine Ω et est composé d'une phase poreuse Ω_f saturée en fluide et d'une phase solide Ω_s (voir Fig. 1.1). L'interface entre les phases fluide et solide est notée Γ . Dans tout l'exposé, le solide est supposé indéformable. La fonction caractéristique de la phase fluide est définie par

$$\chi_f(\mathbf{z}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{z} \in \Omega_f \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.1)$$

et celle de la phase solide par $\chi_s(\mathbf{z}) = 1 - \chi_f(\mathbf{z})$.

L'écoulement d'un fluide Newtonien incompressible de viscosité μ dans le réseau poreux est décrit par les équations de Stokes :

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \mathbf{0} && (\Gamma) \\ \text{div } \mathbf{v} &= 0 && (\Omega) \\ \mathbf{d} &= \text{grad}^s \mathbf{v} && (\Omega) \\ \boldsymbol{\sigma} &= -p\mathbf{1} + 2\mu\mathbf{d} && (\Omega_f) \\ \text{div } \boldsymbol{\sigma} &= -\text{grad } p + \mu\Delta\mathbf{v} = \mathbf{0} && (\Omega_f) \\ \text{div } \boldsymbol{\sigma} &= \mathbf{0} && (\Omega_s) \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} &\text{ continu} && (\Gamma) \end{aligned} \quad (1.2)$$

où le champ de vitesse \mathbf{v} doit être continu et vérifie la condition d'adhérence à l'interface solide-fluide. La vitesse est prolongée par continuité dans la phase solide par $\mathbf{v} = \mathbf{0}$. La conservation

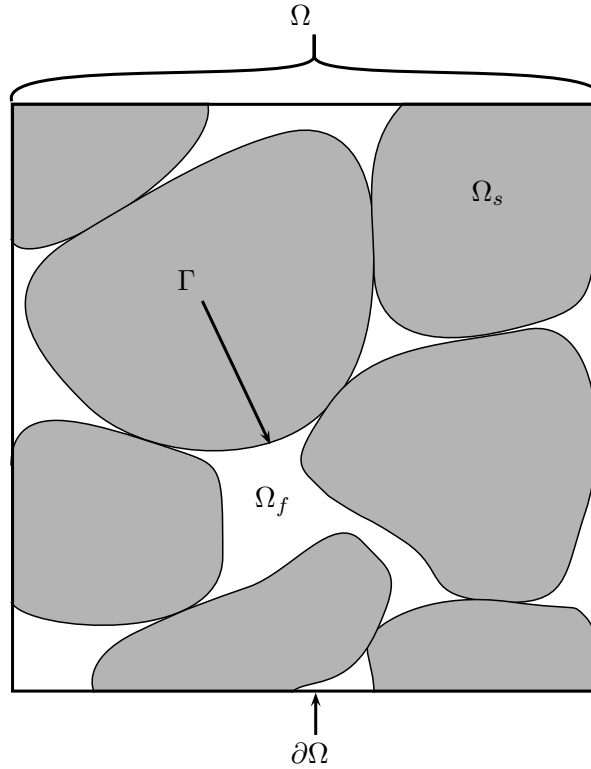


FIG. 1.1: Description d'un milieu poreux

de la masse est exprimée par la condition d'incompressibilité du champ de vitesse. Le champ de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ comporte une partie volumique qui est la pression p et une partie déviatorique qui dépend linéairement du taux de déformation \boldsymbol{d} par l'intermédiaire de la viscosité μ . Dans l'équation d'équilibre, les effets d'inertie sont négligés, de sorte que le champ de contrainte est à divergence nulle. Enfin, le vecteur contrainte doit être continu à l'interface solide-fluide. Pour finir de définir un problème d'écoulement, il faudrait par ailleurs préciser les conditions aux limites appliquées sur la frontière du domaine Ω .

Pour faire apparaître la loi de Darcy, procédons tout d'abord à une écriture adimensionnée des équations de Stokes puis à un développement asymptotique à deux échelles d'espace.

1.1.2 Équations adimensionnées

L'écoulement implique deux échelles d'espaces séparées : la vitesse varie à l'échelle d de la taille des pores et la pression à l'échelle L de la structure macroscopique avec $\varepsilon = d/L \ll 1$. Ainsi, dans l'équation d'équilibre, le gradient de pression calculé à l'échelle L est de l'ordre de grandeur des forces visqueuses calculées à l'échelle d :

$$\text{grad } p = O\left(\frac{P}{L}\right) \quad ; \quad \mu \Delta \boldsymbol{v} = O\left(\frac{\mu V}{d^2}\right). \quad (1.3)$$

Par conséquent, la jauge P de l'ordre de grandeur de la pression (et des contraintes) est reliée à la jauge V de l'ordre de grandeur de la vitesse par

$$P = \frac{\mu V L}{d^2}. \quad (1.4)$$

Introduisons dans les équations de Stokes les variables adimensionnées $\tilde{\boldsymbol{v}}$ et \tilde{p} définies par

$$\boldsymbol{v} = V \tilde{\boldsymbol{v}} \quad ; \quad p = P \tilde{p} = \frac{\mu V L}{d^2} \tilde{p} \quad (1.5)$$

et les opérateurs différentiels adimensionnés par la longueur L . Après simplification, les équations d'équilibre et de conservation de la masse adimensionnées s'écrivent

$$\begin{aligned} -\operatorname{grad} \tilde{p} + \varepsilon^2 \tilde{\Delta} \tilde{\mathbf{v}} &= \mathbf{0} \\ \operatorname{div} \tilde{\mathbf{v}} &= 0 \end{aligned} \quad (1.6)$$

1.1.3 Développement asymptotique à deux échelles d'espace

Afin de capturer les deux échelles impliquées dans les fluctuations des champs, deux variables d'espaces adimensionnées sont introduites : la variable lente $\mathbf{y} = \mathbf{x}/L$ et la variable rapide $\mathbf{z} = \mathbf{x}/d = \mathbf{y}/\varepsilon$. Du fait de la différence d'ordre de grandeur entre d et L , chaque champ $u = \tilde{p}, \tilde{\mathbf{v}}, \dots$ est supposé explicitement dépendant des deux variables d'espaces adimensionnées : $u(\mathbf{x}) = U(\mathbf{y}, \mathbf{z})$. Dès lors, les dérivées par rapport aux variables d'espaces sont

$$\begin{aligned} L \operatorname{grad} &= \operatorname{grad}_y + \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{grad}_z \\ L \operatorname{div} &= \operatorname{div}_y + \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{div}_z \\ L^2 \tilde{\Delta} &= \Delta_y + \frac{1}{\varepsilon^2} \Delta_z \end{aligned} \quad (1.7)$$

Pour gérer les différences d'ordre de grandeur introduites par ε , chaque champ adimensionné u est exprimé sous la forme d'un développement asymptotique en puissances entières de ε

$$u(\mathbf{y}, \mathbf{z}) = \sum_{i \in \mathbb{N}} \varepsilon^i u_i(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \text{ avec } u_i = O(1) \quad (1.8)$$

La technique du développement asymptotique consiste à injecter les développements (1.8) dans les équations adimensionnées (1.6), puis à identifier les termes en facteur de chaque puissance de ε :

Équation d'équilibre dans la phase fluide :

$$\begin{aligned} \text{terme } \varepsilon^{-1} &: -\operatorname{grad}_z \tilde{p}_0 = \operatorname{div}_z \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_0 = \mathbf{0} \\ \text{terme } \varepsilon^0 &: -\operatorname{grad}_y \tilde{p}_0 - \operatorname{grad}_z \tilde{p}_1 + \Delta_z \tilde{\mathbf{v}}_0 = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (1.9)$$

Équation d'équilibre dans la phase solide :

$$\begin{aligned} \text{terme } \varepsilon^{-1} &: \operatorname{div}_z \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_0 = \mathbf{0} \\ \text{terme } \varepsilon^0 &: \operatorname{div}_y \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_0 + \operatorname{div}_z \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_1 = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (1.10)$$

Équation de conservation de la masse :

$$\begin{aligned} \text{terme } \varepsilon^{-1} &: \operatorname{div}_z \tilde{\mathbf{v}}_0 = 0 \\ \text{terme } \varepsilon^0 &: \operatorname{div}_y \tilde{\mathbf{v}}_0 + \operatorname{div}_z \tilde{\mathbf{v}}_1 = 0 \end{aligned} \quad (1.11)$$

La condition d'adhérence sur Γ est vérifiée par tous les termes $\tilde{\mathbf{v}}_i$ du développement de la vitesse. De même, la continuité du vecteur contrainte à travers Γ est vérifiée par tous les termes $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_i \cdot \mathbf{n}$ du développement des contraintes.

1.1.4 Deux échelles de systèmes d'équations aux dérivées partielles

Le terme de pression d'ordre 0 \tilde{p}_0 vérifie (1.9- ε^{-1}) donc ne dépend que de la variable lente d'espace : c'est la pression macroscopique

$$\tilde{p}_0(\mathbf{y}, \mathbf{z}) = \tilde{p}_0(\mathbf{y}) \quad (1.12)$$

Le gradient de pression de macroscopique est alors fonction de la variable d'espace lente seule

$$\operatorname{grad}_y \tilde{p}_0(\mathbf{y}) = \tilde{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{y}) \quad (1.13)$$

Échelle micro

La combinaison de (1.9- ε^0), (1.11- ε^{-1}), (1.13) et de la condition d'adhérence montre que le couple d'inconnues microscopiques $(\tilde{\mathbf{v}}_0, \tilde{p}_1)$ vérifie le système d'équations aux dérivées partielles par rapport à la variable d'espace rapide \mathbf{z} suivant :

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{v}}_0 &= \mathbf{0} & (\mathbf{z} \in \Gamma) \\
\operatorname{div}_z \tilde{\mathbf{v}}_0 &= 0 & (\mathbf{z} \in \Omega_f) \\
\operatorname{div}_z \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_1 &= -\operatorname{grad}_z \tilde{p}_1 + \Delta_z \tilde{\mathbf{v}}_0 = \tilde{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{y}) & (\mathbf{z} \in \Omega_f) \\
\operatorname{div}_z \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_1 &= -\operatorname{div}_y \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_0 & (\mathbf{z} \in \Omega_s) \\
\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \mathbf{n} &\text{ continu} & (\mathbf{z} \in \Gamma)
\end{aligned} \tag{1.14}$$

Dans (1.14), le gradient de pression macroscopique $\tilde{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{y})$ est donné et joue le rôle de chargement. Le terme $\operatorname{div}_y \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_0$ permet d'écrire l'équilibre de la phase solide, est en moyenne proportionnel à $\tilde{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{y})$ au sens qui sera établi (1.25). Le système correspond aux équations de Stokes, où \tilde{p}_1 est la fluctuation microscopique de la pression et $\tilde{\mathbf{v}}_0$ le champ de vitesse macroscopique. Le taux de déformation est $\tilde{\mathbf{d}}_0 = \operatorname{grad}_z^s \tilde{\mathbf{v}}_0$ et $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_1 = -\tilde{p}_1 + 2\tilde{\mathbf{d}}_0$ est la fluctuation microscopique des contraintes. Pour fermer le problème, les conditions aux limites doivent être précisées et ce point est particulièrement délicat. Usuellement, un argument de périodicité de la microstructure est invoqué. Dans le cas d'une microstructure aléatoire, on ne sait pas définir rigoureusement les conditions aux limites. Procédons pour l'instant en supposant que les conditions aux limites soient telles que le problème aux dérivées partielles par rapport à \mathbf{z} défini sur la phase fluide soit linéaire par rapport à $\tilde{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{y})$. Dès lors, il existe un champ de tenseur $\tilde{\mathbf{k}}$ d'ordre 2 tel que

$$\tilde{\mathbf{v}}_0(\mathbf{y}, \mathbf{z}) = -\tilde{\mathbf{k}}(\mathbf{z}) \cdot \tilde{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{y}) \tag{1.15}$$

Dans la suite, on prolonge par continuité $\tilde{\mathbf{v}}_0$ par une vitesse nulle dans la phase solide.

Échelle macro

La pression macroscopique a été identifiée dans (1.12). Soit $\Omega(\mathbf{y})$ un volume élémentaire représentatif choisi suffisamment grand pour rendre compte de l'écoulement dans le milieu poreux au voisinage du point \mathbf{y} , mais de taille D faible devant la longueur L de fluctuation du champ de pression macroscopique : $\varepsilon \ll D/L \ll 1$. Soulignons que nous sortons du cadre classique des développements asymptotiques qui est usuellement conduit sous hypothèse de périodicité de la microstructure et pour lequel le raisonnement qui suit est conduit sur la cellule de périodicité. La vitesse macroscopique $\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{y})$ est définie par intégration par rapport à la variable d'espace rapide \mathbf{z} de la vitesse microscopique sur le domaine $\Omega(\mathbf{y})$:

$$\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{y}) = \frac{1}{|\Omega(\mathbf{y})|} \int_{\Omega(\mathbf{y})} \tilde{\mathbf{v}}_0(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \, dV_z \tag{1.16}$$

D'après (1.15), on vérifie aisément que la vitesse et le gradient de pression macroscopiques sont reliés par la loi de comportement

$$\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{y}) = -\tilde{\mathbf{K}}(\mathbf{y}) \cdot \tilde{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{y}) \text{ avec } \tilde{\mathbf{K}}(\mathbf{y}) = \frac{1}{|\Omega(\mathbf{y})|} \int_{\Omega(\mathbf{y})} \tilde{\mathbf{k}}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \, dV_z \tag{1.17}$$

Il reste à établir l'équation de conservation de la masse pour $\tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{y})$. À cet effet, intégrons (1.11- ε^0) par rapport à la variable d'espace rapide \mathbf{z} sur le domaine $\Omega(\mathbf{y})$:

$$\int_{\Omega(\mathbf{y})} \operatorname{div}_y \tilde{\mathbf{v}}_0 + \operatorname{div}_z \tilde{\mathbf{v}}_1 \, dV_z = 0 \quad \Rightarrow \quad \operatorname{div}_y \tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{y}) = -\frac{1}{|\Omega(\mathbf{y})|} \int_{\Omega(\mathbf{y})} \operatorname{div}_z \tilde{\mathbf{v}}_1 \, dV_z \tag{1.18}$$

Appliquons le théorème de la divergence au dernier terme, en se rappelant que l'opérateur adimensionné div_z s'obtient par multiplication de l'opérateur divergence dimensionné par un facteur εL :

$$\text{div}_y \tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{y}) = -\frac{\varepsilon L}{|\Omega(\mathbf{y})|} \int_{\partial\Omega(\mathbf{y})} \tilde{\mathbf{v}}_1 \cdot \mathbf{n} \, dS_z = O\left(\frac{\varepsilon L D^2}{D^3}\right) = O\left(\frac{\varepsilon L}{D}\right) \ll 1 \quad (1.19)$$

Un résultat similaire a été établi [82] dans un contexte de champs aléatoires. L'écoulement macroscopique a donc été montré incompressible. Ainsi, le couple d'inconnues macroscopiques $(\tilde{\mathbf{V}}, \tilde{p}_0)$ vérifie le système d'équations aux dérivées partielles par rapport à la variable d'espace lente \mathbf{y} suivant :

$$\begin{aligned} \text{div}_y \tilde{\mathbf{V}} &= 0 & (\mathbf{y} \in \Omega) \\ \tilde{\mathbf{V}} &= -\tilde{\mathbf{K}} \cdot \tilde{\boldsymbol{\alpha}} = -\tilde{\mathbf{K}} \cdot \text{grad}_y \tilde{p}_0 & (\mathbf{y} \in \Omega) \end{aligned} \quad (1.20)$$

Le système (1.20) correspond effectivement aux équations de Darcy. Le retour aux variables dimensionnées dans (1.20) indique que

$$\mathbf{V} = -\frac{\mathbf{K}^{\text{int}}}{\mu} \cdot \text{grad } p_0 \text{ avec } \mathbf{K}^{\text{int}} = d^2 \tilde{\mathbf{K}} = \mu \mathbf{K} \quad (1.21)$$

Ainsi, la perméabilité intrinsèque \mathbf{K}^{int} est homogène à une surface et son ordre de grandeur varie comme le carré de la taille des pores d .

Contraintes dans la phase solide

La représentation macroscopique (1.20) de l'écoulement ne fait pas apparaître d'équation d'équilibre [18]. Une information importante peut toutefois être extraite de (1.9- ε^0), (1.10- ε^0) et de la continuité du vecteur contrainte à travers Γ à tout ordre du développement.

Le VER $\Omega(y)$ présenté plus haut, de frontière $\partial\Omega(y)$, est scindé en une phase solide $\Omega_s(y)$ et une phase fluide $\Omega_f(y)$. De même, l'intersection de l'interface solide fluide Γ avec $\Omega(y)$ est notée $\Gamma(y)$. L'intégration des équations d'équilibre d'ordre ε^0 sur leurs phases respectives conduit à

$$\int_{\Omega_f(y)} -\tilde{\boldsymbol{\alpha}} + \text{div}_z \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_1 \, dV_z = \mathbf{0} \quad ; \quad \int_{\Omega_s(y)} \text{div}_y \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_0 + \text{div}_z \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_1 \, dV_z = \mathbf{0}. \quad (1.22)$$

La somme de ces deux identités est

$$\int_{\Omega_f(y)} \tilde{\boldsymbol{\alpha}} \, dV_z - \int_{\Omega_s(y)} \text{div}_y \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_0 \, dV_z = \int_{\Omega(y)} \text{div}_z \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_1 \, dV_z. \quad (1.23)$$

La continuité vecteur contrainte $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \mathbf{n}$ à travers $\Gamma(y)$ permet d'appliquer le théorème de la divergence, en redimensionnant l'opérateur divergence comme pour (1.19) :

$$\frac{1}{|\Omega(y)|} \int_{\Omega_f(y)} \tilde{\boldsymbol{\alpha}} \, dV_z - \frac{1}{|\Omega(y)|} \int_{\Omega_s(y)} \text{div}_y \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_0 \, dV_z = \frac{\varepsilon L}{|\Omega(y)|} \int_{\partial\Omega(y)} \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \mathbf{n} \, dS_z \quad (1.24)$$

Dans la limite où le VER $\Omega(y)$ est pris suffisamment grand, (1.24) implique

$$\phi \tilde{\boldsymbol{\alpha}} = (1 - \phi) \overline{\text{div}_y \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_0}^s \quad (1.25)$$

où $\phi = |\Omega_f(y)|/|\Omega(y)|$ est la porosité. La condition (1.25) est primordiale puisqu'elle implique que les contraintes microscopiques $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_1$ sont auto-équilibrées en moyenne sur un VER.

Remarquons que dans le cas où la microstructure est périodique et $\Omega(y)$ est la cellule de périodicité, (1.24) et (1.19) s'annulent directement par périodicité.

1.2 Définition du problème d'homogénéisation pour la perméabilité

L'analyse asymptotique de la section précédente permet maintenant de définir sur un VER Ω un problème d'homogénéisation pour le calcul de la perméabilité \mathbf{K} à partir de la géométrie du milieu poreux. Dans la suite, toutes les expressions sont de nouveau dimensionnées. Les grandeurs macroscopiques sont la vitesse moyenne \mathbf{V} et le gradient de pression macroscopique $\boldsymbol{\alpha}$.

1.2.1 Équations de champs

Le problème d'homogénéisation doit reposer sur le système d'équations aux dérivées partielles (1.14), dans lequel le gradient de pression macroscopique $\boldsymbol{\alpha}$ est constant. Dans la suite, les champs microscopiques dimensionnés sont la vitesse et les contraintes qui correspondent à

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= V \tilde{\mathbf{v}}_0 \\ \boldsymbol{\sigma} &= \frac{\mu V L}{d^2} \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_1 - \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{z} \mathbf{1} \end{aligned} \quad (1.26)$$

Dans $\boldsymbol{\sigma}$, le décalage $-\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{z} \mathbf{1}$ par rapport à la fluctuation microscopique de la contrainte $\boldsymbol{\sigma}_1$ est choisi afin que $\boldsymbol{\sigma}$ soit à divergence nulle dans la phase fluide. Par ailleurs, au regard de la condition d'équilibre en moyenne (1.25) pour les contraintes macroscopiques dans le solide, l'équation d'équilibre s'écrit

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}) = \begin{cases} 0 & \text{si } \mathbf{z} \in \Omega_f \\ \boldsymbol{\alpha}_s(\mathbf{z}) & \text{si } \mathbf{z} \in \Omega_s \end{cases} \quad \text{avec} \quad \overline{\boldsymbol{\alpha}_s(\mathbf{z})}^s = \frac{-\boldsymbol{\alpha}}{1-\phi} \quad (1.27)$$

Le champ $\boldsymbol{\alpha}_s(\mathbf{z})$, indéterminé localement, provient des contraintes macroscopiques dans le solide. Plus précisément, c'est le champ dimensionné qui correspond à $-\operatorname{div}_y \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_0 - \tilde{\boldsymbol{\alpha}}$. Il reste à préciser les conditions aux limites sur la frontière $\partial\Omega$ du VER pour définir complètement les espaces de champs cinématiquement (resp. statiquement) admissibles \mathcal{C} (resp. \mathcal{S}).

1.2.2 Conditions aux limites

Le choix des conditions aux limites est guidé par l'équation de conservation de la masse à l'échelle macroscopique $\operatorname{div} \mathbf{V} = 0$, qui est nécessairement vérifiée d'après (1.19) si le flux de vitesse microscopique à travers la frontière $\partial\Omega$ du VER est nul. Les conditions aux limites dans \mathcal{C} sont donc choisies pour être compatible avec :

$$\forall \mathbf{u} \in \mathcal{C}, \int_{\partial\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, dS = 0 \quad (1.28)$$

Remarquons que (1.28) est aussi une conséquence de $\operatorname{div} \mathbf{v} = 0$ car une seule variable d'espace est maintenant utilisée. Par ailleurs, il s'avèrera utile à l'établissement de théorèmes énergétiques de choisir les espaces des champs cinématiquement et statiquement admissibles tels que la puissance suivante vérifie :

$$\forall \mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{V}), \forall \boldsymbol{\sigma}' \in \mathcal{S}(\boldsymbol{\alpha}), \quad \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{n} \, dS = -\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\alpha} \quad (1.29)$$

Présentons trois types de conditions aux limites utilisés dans la littérature qui vérifient les deux conditions (1.28) et (1.29).

Conditions aux limites périodiques

Les conditions aux limites périodiques ont été utilisées pour une présentation naturelle des développements asymptotiques précédents notamment par Boutin [18], Ene et Sanchez-Palencia [38]. Les conditions aux limites sont

$$\begin{aligned} \mathbf{v} \text{ périodique} & \quad (\partial\Omega) \\ (\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{z}\mathbf{1}) \cdot \mathbf{n} \text{ anti-périodique} & \quad (\partial\Omega) \end{aligned} \quad (1.30)$$

Pour les conditions aux limites périodiques, les ensembles des champs cinématiquement (resp. statiquement) admissibles avec la vitesse macroscopique \mathbf{V} (resp. gradient de pression macroscopique $\boldsymbol{\alpha}$) sont :

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_p(\mathbf{V}) &= \{ \mathbf{u} \mid \operatorname{div} \mathbf{u} = \mathbf{0}(\Omega), \mathbf{u} = \mathbf{0}(\Gamma \cup \Omega_s), \mathbf{u} \text{ périodique}(\partial\Omega), \bar{\mathbf{u}} = \mathbf{V} \} \\ \mathcal{S}_p(\boldsymbol{\alpha}) &= \left\{ \boldsymbol{\sigma} \mid (\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{z}) \cdot \mathbf{n} \text{ anti-pér.}(\partial\Omega), \llbracket \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \rrbracket = \mathbf{0}(\Gamma), \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}(\Omega_f), \overline{\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}^s} = \frac{-\boldsymbol{\alpha}}{1-\phi} \right\} \end{aligned} \quad (1.31)$$

Conditions de vitesse uniforme

Elles sont aussi appelées conditions aux limites de Kuwabara par certains auteurs en référence aux travaux de Kuwabara [59]. Elles supposent que la frontière $\partial\Omega$ n'est en contact qu'avec la phase fluide.

$$\mathbf{u} = \mathbf{V} \quad (\partial\Omega) \quad (1.32)$$

Pour les conditions aux limites de vitesse uniforme, les ensembles des champs cinématiquement (resp. statiquement) admissibles avec la vitesse macroscopique \mathbf{V} (resp. gradient de pression macroscopique $\boldsymbol{\alpha}$) sont :

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_v(\mathbf{V}) &= \{ \mathbf{u} \mid \operatorname{div} \mathbf{u} = \mathbf{0}(\Omega), \mathbf{u} = \mathbf{0}(\Gamma \cup \Omega_s), \mathbf{u} = \mathbf{V}(\partial\Omega) \} \\ \mathcal{S}_v(\boldsymbol{\alpha}) &= \left\{ \boldsymbol{\sigma} \mid \llbracket \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \rrbracket = \mathbf{0}(\Gamma), \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}(\Omega_f), \overline{\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}^s} = \frac{-\boldsymbol{\alpha}}{1-\phi} \right\} \end{aligned} \quad (1.33)$$

Conditions mixtes : vitesse normale uniforme, vecteur contrainte tangentiel nul

Aussi appelée conditions aux limites de Happel par certains auteurs en référence à Happel [47]. L'utilisation de ces conditions aux limites suppose que seules les portions de la frontière $\partial\Omega$ dont la normale est orthogonale à la vitesse macroscopique peuvent être en contact avec la phase solide.

$$\begin{aligned} u_n &= \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} & (\partial\Omega) \\ \mathbf{T}_t &= (\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = \mathbf{0} & (\partial\Omega) \end{aligned} \quad (1.34)$$

Pour les conditions aux limites mixtes de vitesse normale uniforme et vecteur contrainte tangentiel nul, les ensembles des champs cinématiquement (resp. statiquement) admissibles avec la vitesse macroscopique \mathbf{V} (resp. gradient de pression macroscopique $\boldsymbol{\alpha}$) sont :

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_m(\mathbf{V}) &= \{ \mathbf{u} \mid \operatorname{div} \mathbf{u} = \mathbf{0}(\Omega), \mathbf{u} = \mathbf{0}(\Gamma \cup \Omega_s), \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{n}(\partial\Omega) \} \\ \mathcal{S}_m(\boldsymbol{\alpha}) &= \left\{ \boldsymbol{\sigma} \mid \llbracket \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \rrbracket = \mathbf{0}(\Gamma), \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \sigma_{nn} \mathbf{n}(\partial\Omega), \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}(\Omega_f), \overline{\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}^s} = \frac{-\boldsymbol{\alpha}}{1-\phi} \right\} \end{aligned} \quad (1.35)$$

Les ensembles suivants sont par ailleurs introduits pour les trois types de conditions aux limites périodiques, de vitesse uniforme ou mixtes (p , v et m) :

$$\mathcal{C} = \cup_{\mathbf{V}} \mathcal{C}(\mathbf{V}) \quad ; \quad \mathcal{S} = \cup_{\boldsymbol{\alpha}} \mathcal{S}(\boldsymbol{\alpha}) \quad (1.36)$$

où les indices p , v et m se réfèrent aux conditions aux limites périodiques, de vitesse uniforme et mixtes. Pour les conditions aux limites de vitesse uniforme ou mixtes, la condition d'incompressibilité implique que l'on a bien $\mathbf{V} = \bar{\mathbf{v}}$. Notons que les ensembles statiques incluent un type de condition aux limites "en moyenne", non classique, qui porte sur $\overline{\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}^s}$.

1.2.3 Solution du problème d'homogénéisation

Si le gradient de pression macroscopique est imposé et la vitesse macroscopique indéterminée, le problème d'homogénéisation est

$$\text{trouver } \mathbf{v} \in \mathcal{C} \text{ et } \boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}(\boldsymbol{\alpha}) \text{ tels que } \forall \mathbf{z} \in \Omega_f, \boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{1} + 2\mu\mathbf{d} \text{ avec } \mathbf{d} = \operatorname{grad}^s \mathbf{v} \quad (1.37)$$

La vitesse macroscopique se déduit de la solution de (1.37) par

$$\mathbf{V} = \bar{\mathbf{v}} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \mathbf{v} \, dV = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega_f} \mathbf{v} \, dV \quad (1.38)$$

Réciproquement, si la vitesse macroscopique est imposée, le gradient de pression macroscopique est indéterminé et le problème d'homogénéisation est alors, pour chaque type de conditions aux limites :

$$\text{trouver } \mathbf{v} \in \mathcal{C}(\mathbf{V}) \text{ et } \boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S} \text{ tels que } \forall \mathbf{z} \in \Omega_f, \boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{1} + 2\mu\mathbf{d} \text{ avec } \mathbf{d} = \operatorname{grad}^s \mathbf{v} \quad (1.39)$$

Le gradient de pression macroscopique se déduit de la solution de (1.39) par

$$\boldsymbol{\alpha} = -(1 - \phi) \overline{\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}^s} \quad (1.40)$$

L'expression (1.40) n'est généralement pas directement utilisable en pratique. À l'aide du théorème de la divergence, on montre

$$\boldsymbol{\alpha} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_{f \rightarrow s} \, dS \quad \text{si } \partial\Omega_s = \Gamma \quad (1.41)$$

c'est à dire lorsque la frontière du VER n'est en contact qu'avec la phase fluide, ce qui est une condition nécessaire à l'utilisation des conditions de vitesse uniforme. Dans le cas des conditions aux limites mixtes, pour lesquelles seules les parties de la frontière $\partial\Omega$ dont la normale est orthogonale à \mathbf{V} peuvent être en contact avec la phase solide, on montre par ailleurs

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{V} = \frac{\mathbf{V}}{|\Omega|} \cdot \int_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_{f \rightarrow s} \, dS \quad \text{si C.L. mixtes} \quad (1.42)$$

Dans le cas des conditions aux limites périodiques, lorsque (1) le VER est un pavé de longueur L_i dans chaque direction \mathbf{e}_i et (2) S_i est l'aire de la portion de la face de normale \mathbf{e}_i qui n'est pas en contact avec le fluide (en tenant compte d'une reproduction périodique du VER), on montre :

$$(\mathbf{I} - \boldsymbol{\eta}) \cdot \boldsymbol{\alpha} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_{f \rightarrow s} \, dS \quad \text{si C.L. périodiques} \quad (1.43)$$

où $\boldsymbol{\eta}$ est le tenseur d'ordre 2 diagonal de valeurs propres dans $[0; 1]$ suivant :

$$\boldsymbol{\eta} = \sum_{i=1}^3 \frac{L_i S_i}{|\Omega|} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \quad (1.44)$$

construit tel que

$$\frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega \cap \partial\Omega_s} (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{z}) \mathbf{n} \, dS = \boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{\alpha} \quad (1.45)$$

1.3 Cadres variationnels classiques

1.3.1 Dualisation de l'équation d'équilibre : un lemme de Hill pour la perméabilité

L'équation d'équilibre est dualisée par considération du produit scalaire suivant et simplification :

$$\forall \mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{V}), \forall \boldsymbol{\sigma}' \in \mathcal{S}(\boldsymbol{\alpha}) \quad \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}' \, dV = \mathbf{0} \quad (1.46)$$

Par ailleurs, le théorème de la divergence permet d'écrire

$$\forall \mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{V}), \forall \boldsymbol{\sigma}' \in \mathcal{S}(\boldsymbol{\alpha}) \quad \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}' \, dV = - \int_{\Omega} \mathbf{d}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma}' \, dV + \int_{\partial\Omega} \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{n} \, dS \quad (1.47)$$

Dans la suite, $\mathcal{C}(\mathbf{V})$ et $\mathcal{S}(\boldsymbol{\alpha})$ se réfèrent au même type de conditions aux limites (périodique, vitesse uniforme ou mixte). Ces ensembles ont été spécifiquement choisis afin de vérifier la propriété (1.29). Ainsi le théorème suivant, analogue du lemme de Hill en élasticité, est établi :

$$\forall \mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{V}), \forall \boldsymbol{\sigma}' \in \mathcal{S}(\boldsymbol{\alpha}) \quad \overline{\mathbf{d}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma}'} = -\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\alpha} \quad (1.48)$$

Cette propriété va maintenant être invoquée pour présenter plusieurs cadres variationnels classiques. Par analogie avec un problème d'élasticité linéaire, nous référerons aux principes variationnels par "minimum de l'énergie potentielle" et "minimum de l'énergie complémentaire" mais rigoureusement cette appellation est galvaudée car il s'agit ici de puissance et non d'énergie. Une présentation détaillée de ces principes est proposée et illustrée dans des contextes linéaires et non linéaires dans [34].

1.3.2 Minimum de l'énergie potentielle

Vitesse macroscopique imposée

Soit $(\mathbf{v}, \boldsymbol{\sigma})$ le couple solution de (1.39). Alors, d'après la loi de comportement macroscopique, $\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}(-\mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V})$. Ainsi, pour le couple $(\mathbf{v}, \boldsymbol{\sigma})$ solution de (1.39), le lemme de Hill (1.48) implique :

$$\forall \mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{V}') \quad \mathbf{V}' \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V} = \overline{2\mu \mathbf{d}(\mathbf{u}) : \mathbf{d}(\mathbf{v})} \quad (1.49)$$

Pour tout champ $\mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{V})$, le champ $\delta \mathbf{u} = \mathbf{u} - \mathbf{v} \in \mathcal{C}(\mathbf{0})$. Par conséquent,

$$\begin{aligned} \forall \mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{V}) \quad \overline{\mu \mathbf{d}(\mathbf{u}) : \mathbf{d}(\mathbf{u})} &= \overline{\mu \mathbf{d}(\mathbf{v}) : \mathbf{d}(\mathbf{v})} + \overline{\mu \mathbf{d}(\delta \mathbf{u}) : \mathbf{d}(\delta \mathbf{u})} + \overline{2\mu \mathbf{d}(\delta \mathbf{u}) : \mathbf{d}(\mathbf{v})} \\ &= \overline{\mu \mathbf{d}(\mathbf{v}) : \mathbf{d}(\mathbf{v})} + \overline{\mu \mathbf{d}(\delta \mathbf{u}) : \mathbf{d}(\delta \mathbf{u})} \\ &\geq \overline{\mu \mathbf{d}(\mathbf{v}) : \mathbf{d}(\mathbf{v})} = \frac{1}{2} \mathbf{V} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V} \end{aligned} \quad (1.50)$$

L'égalité est atteinte uniquement pour $\mathbf{u} = \mathbf{v}$ car la forme quadratique $\mathbf{u} \rightarrow \overline{\mu \mathbf{d}(\mathbf{u}) : \mathbf{d}(\mathbf{u})}$ est définie positive. En conclusion, \mathbf{v} solution de (1.39) peut être caractérisé comme le champ de $\mathcal{C}(\mathbf{V})$ qui réalise le minimum de l'énergie potentielle :

$$\frac{1}{2} \mathbf{V} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V} = \inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{V})} \overline{\mu \mathbf{d}(\mathbf{u}) : \mathbf{d}(\mathbf{u})} \quad (1.51)$$

Gradient de pression macroscopique imposé

Soit $(\mathbf{v}, \boldsymbol{\sigma})$ le couple solution de (1.37). Alors, d'après la loi de comportement macroscopique, $\mathbf{v} \in \mathcal{C}(-\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha})$. Pour tout champ $\mathbf{u} \in \mathcal{C}$, le champ $\delta \mathbf{u} = \mathbf{u} - \mathbf{v} \in \mathcal{C}(\bar{\mathbf{u}} + \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha})$. Procédant comme pour (1.50), il vient :

$$\forall \mathbf{u} \in \mathcal{C} \quad \overline{\mu \mathbf{d}(\mathbf{u}) : \mathbf{d}(\mathbf{u})} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} + \overline{\mu \mathbf{d}(\delta \mathbf{u}) : \mathbf{d}(\delta \mathbf{u})} - \boldsymbol{\alpha} \cdot (\bar{\mathbf{u}} + \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha}) \quad (1.52)$$

Comme précédemment, il s'en suit que \mathbf{v} solution de (1.37) peut être caractérisé comme l'unique champ de \mathcal{C} qui réalise le minimum de l'énergie potentielle :

$$-\frac{1}{2} \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} = \inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{C}} \overline{\mu \mathbf{d}(\mathbf{u}) : \mathbf{d}(\mathbf{u})} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \bar{\mathbf{u}} \quad (1.53)$$

1.3.3 Minimum de l'énergie complémentaire

Gradient de pression macroscopique imposé

Soit $(\mathbf{v}, \boldsymbol{\sigma})$ le couple solution de (1.37). Alors $\mathbf{v} \in \mathcal{C}(-\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha})$ d'après la loi de comportement macroscopique et le lemme de Hill (1.48) implique :

$$\forall \boldsymbol{\sigma}' \in \mathcal{S}(\boldsymbol{\alpha}') \quad \boldsymbol{\alpha}' \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} = \overline{\boldsymbol{\sigma}' : \mathbb{K} : \boldsymbol{\sigma}' \chi_f / 2\mu} \quad (1.54)$$

où χ_f est la fonction indicatrice de la phase fluide. Pour tout champ $\boldsymbol{\sigma}' \in \mathcal{S}(\boldsymbol{\alpha})$, le champ $\delta \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}' - \boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}(\mathbf{0})$, de sorte que par analogie avec (1.50) :

$$\forall \boldsymbol{\sigma}' \in \mathcal{S}(\boldsymbol{\alpha}) \quad \overline{\boldsymbol{\sigma}' : \mathbb{K} : \boldsymbol{\sigma}' \chi_f / 2\mu} = \overline{\boldsymbol{\sigma} : \mathbb{K} : \boldsymbol{\sigma} \chi_f / 2\mu} + \overline{\delta \boldsymbol{\sigma} : \mathbb{K} : \delta \boldsymbol{\sigma} \chi_f / 2\mu} \geq \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} \quad (1.55)$$

Finalement, le champ $\boldsymbol{\sigma}$ solution de (1.37) peut être caractérisé comme l'unique champ de $\mathcal{S}(\boldsymbol{\alpha})$ réalisant le minimum de l'énergie complémentaire :

$$\frac{1}{2} \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} = \inf_{\boldsymbol{\sigma}' \in \mathcal{S}(\boldsymbol{\alpha})} \frac{1}{2} \overline{\boldsymbol{\sigma}' : \mathbb{K} : \boldsymbol{\sigma}' \chi_f / 2\mu} \quad (1.56)$$

Vitesse macroscopique imposée

Soit $(\mathbf{v}, \boldsymbol{\sigma})$ le couple solution de (1.39). Alors, d'après la loi de comportement macroscopique, $\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}(-\mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V})$. Pour tout champ $\boldsymbol{\sigma}' \in \mathcal{S}$, le champ $\delta \boldsymbol{\sigma}' = \boldsymbol{\sigma}' - \boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}(-(1-\phi)\overline{\text{div}} \boldsymbol{\sigma}'^s + \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V})$. Procédant comme pour (1.55), il vient :

$$\forall \boldsymbol{\sigma}' \in \mathcal{S} \quad \overline{\boldsymbol{\sigma}' : \mathbb{K} : \boldsymbol{\sigma}' \chi_f / 4\mu} = \frac{1}{2} \mathbf{V} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V} + \overline{\delta \boldsymbol{\sigma}' : \mathbb{K} : \delta \boldsymbol{\sigma}' \chi_f / 4\mu} - \mathbf{V} \cdot \left(-(1-\phi)\overline{\text{div}} \boldsymbol{\sigma}'^s + \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V} \right) \quad (1.57)$$

Comme précédemment, il s'en suit que $\boldsymbol{\sigma}$ solution de (1.39) peut être caractérisé comme l'unique champ de \mathcal{S} qui réalise le minimum de l'énergie complémentaire :

$$-\frac{1}{2} \mathbf{V} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V} = \inf_{\boldsymbol{\sigma}' \in \mathcal{S}} \overline{\boldsymbol{\sigma}' : \mathbb{K} : \boldsymbol{\sigma}' \chi_f / 4\mu} - \mathbf{V} \cdot (1-\phi)\overline{\text{div}} \boldsymbol{\sigma}'^s \quad (1.58)$$

Le terme $(1-\phi)\overline{\text{div}} \boldsymbol{\sigma}'^s$ dans (1.58) peut se simplifier en utilisant (1.41), (1.42) ou (1.43) suivant le type de conditions aux limites et la configuration du VER. Lorsque la frontière $\partial\Omega$ n'est en contact qu'avec la phase fluide, il correspond à la force de traînée appliquée par le fluide sur le solide, normalisée par le volume du VER.

1.3.4 Fluctuation microscopique des contraintes

Il s'avère parfois plus aisé de travailler avec la fluctuation microscopique des contraintes σ_1 qu'avec $\sigma = \sigma_1 - \alpha \cdot \mathbf{z}\mathbf{1}$ comme choisi précédemment (voir (1.26)). L'ensemble $\mathcal{S}^1(\alpha)$ des champs σ_1 statiquement admissible est obtenu à partir de $\mathcal{S}(\alpha)$ en effectuant le remplacement $\sigma = \sigma_1 - \alpha \cdot \mathbf{z}$.

L'intérêt de cette convention est que la fluctuation des contraintes est auto-équilibrée car $\text{div } \sigma = \mathbf{0}$ ($\mathbf{z} \in \Omega_f$) devient $\overline{\text{div } \sigma_1} = \alpha$ ($\mathbf{z} \in \Omega_f$) et $\overline{\text{div } \sigma^s} = -\alpha/(1 - \phi)$ devient $\overline{\text{div } \sigma_1^s} = -\phi\alpha/(1 - \phi)$, de sorte que $\overline{\text{div } \sigma_1} = \mathbf{0}$. Le lemme de Hill (1.48) et les résultats variationnels (1.51), (1.53), (1.56) sont préservés en remplaçant simplement σ' par σ_1' et \mathcal{S} par \mathcal{S}^1 . Le résultat (1.58) est aussi préservé à la condition supplémentaire de remplacer le terme de travail virtuel des déplacements donnés $\mathbf{V} \cdot (1 - \phi)\overline{\text{div } \sigma'^s}$ par $\mathbf{V} \cdot (1 - \phi)/\phi\overline{\text{div } \sigma_1'^s}$ ou par $-\mathbf{V} \cdot \overline{\text{div } \sigma_1'^f}$.

1.4 Bornes sur la perméabilité d'un milieu poreux

La première utilisation des cadres variationnels exposés ci-dessus est due à Prager [78]. Des améliorations successives ont notamment été proposées par Weissberg et Prager [104], Berryman et Milton [11]. Une contribution majeure a par ailleurs été apportée par Doi [31] puis déclinée dans des cas polydispersés simultanément par Given et Stell [43] et Torquato et Lu [101]. La plupart de ces idées sont présentées dans un cadre unifié dans Rubinstein et Torquato [82].

Présentons deux contributions majeures basées sur le minimum de l'énergie complémentaire avec gradient de pression imposé (1.56) et les ensembles de champs admissibles avec les conditions de vitesse uniforme (1.33). L'originalité de cette présentation est d'utiliser le même formalisme pour l'obtention de toutes ces bornes supérieures.

Pour cette présentation, la fluctuation microscopique des contraintes $\sigma_1 = \sigma + \alpha \cdot \mathbf{z}\mathbf{1}$ est adoptée comme grandeur statique pour respecter les conventions utilisées par les auteurs mentionnés ci-dessus.

Signalons la possibilité de construire des bornes inférieures à l'aide du minimum de l'énergie potentielle [34]. Dans le cas d'une représentation aléatoire de la microstructure, ce principe est difficile à utiliser puisqu'il faut construire des champs cinématiques continus qui vérifient la condition d'adhérence à l'interface solide-fluide.

1.4.1 Préliminaire : fonctions de corrélation

Les bornes qui suivent vont faire apparaître des descripteurs statistiques de la microstructure appelés fonctions de corrélations à n -points. Leur définition est basée sur les fonctions indicatrices (ou caractéristiques) de chaque phase. La fonction caractéristique de la phase fluide $\chi_f(\mathbf{z})$ est définie par (1.1). L'interface solide-fluide Γ peut être décrite au moyen de la distribution $\delta_\Gamma(\mathbf{z})$ qui correspond à une distribution de Dirac sur Γ . Dans la suite, on se place dans la situation d'un milieu statistiquement homogène et stationnaire.

Les fonctions de corrélation à un point d'une phase volumique sont la probabilité de trouver un point dans une phase donnée. Par exemple, la fonction de corrélation à un point de la phase fluide est la moyenne $\langle \chi_f \rangle = \phi$. En revanche, la probabilité de trouver un point sur l'interface solide-fluide est nulle. La fonction de corrélation à un point de l'interface solide-fluide est donc définie par un passage à la limite. Soit Γ_ε la somme de Minkowski de Γ et d'une boule de centre $\mathbf{0}$ et de rayon $\varepsilon/2$. Le domaine Γ_ε peut être vu comme l'interface Γ à laquelle est conférée une épaisseur ε . Notons $\chi_{\Gamma_\varepsilon}$ la fonction caractéristique qui prend la valeur 1 sur Γ_ε et qui s'annule ailleurs. La fonction de corrélation à un point de l'interface est définie comme la limite quand ε tend vers 0 de la moyenne $\langle \chi_{\Gamma_\varepsilon} \rangle / \varepsilon$. Elle correspond à la surface spécifique $\gamma = |\Gamma|/|\Omega|$. Sous hypothèse d'ergodicité, la fonction de corrélation à un point de l'interface correspond donc à la moyenne volumique de la distribution δ_Γ .

Les fonctions de corrélations à deux points entre deux phases volumiques sont définies comme la probabilité de trouver dans une phase l'extrémité d'un segment \mathbf{r} jeté aléatoirement et l'autre extrémité dans la deuxième phase. Dans le cas où au moins une des phases n'est pas volumique mais est une surface, il faut procéder par passage à la limite. Par exemple, les fonctions de corrélation à deux points fluide-fluide, fluide-surface et surface-surface sont définies comme

$$\begin{aligned} F_{vv}(\mathbf{r}) &= \langle \chi_f(\mathbf{x})\chi_f(\mathbf{x} + \mathbf{r}) \rangle \\ F_{vs}(\mathbf{r}) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \langle \chi_f(\mathbf{x})\chi_{\Gamma_\varepsilon}(\mathbf{x} + \mathbf{r}) \rangle \\ F_{ss}(\mathbf{r}) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon^2} \langle \chi_{\Gamma_\varepsilon}(\mathbf{x})\chi_{\Gamma_\varepsilon}(\mathbf{x} + \mathbf{r}) \rangle \end{aligned} \quad (1.59)$$

où l'indice v se réfère à "volume" et s à "surface". Lorsque les deux points sont très éloignés devant la taille caractéristique de la microstructure, les variables sont décorrélatées de sorte que les fonctions de corrélation à deux points vérifient

$$\lim_{r \rightarrow \infty} F_{vv}(\mathbf{r}) = \phi^2 \quad ; \quad \lim_{r \rightarrow \infty} F_{vs}(\mathbf{r}) = \phi\gamma \quad ; \quad \lim_{r \rightarrow \infty} F_{ss}(\mathbf{r}) = \gamma^2 \quad (1.60)$$

avec une convergence exponentielle.

Une description statistique de la microstructure plus complète est donnée par les fonctions de corrélation à trois points définies par

$$\begin{aligned} F_{vvv}(\mathbf{r}, \mathbf{s}) &= \langle \chi_f(\mathbf{z})\chi_f(\mathbf{z} + \mathbf{r})\chi_f(\mathbf{z} + \mathbf{s}) \rangle \\ F_{vvs}(\mathbf{r}, \mathbf{s}) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \langle \chi_f(\mathbf{z})\chi_f(\mathbf{z} + \mathbf{r})\chi_{\Gamma_\varepsilon}(\mathbf{z} + \mathbf{s}) \rangle \\ F_{vss}(\mathbf{r}, \mathbf{s}) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon^2} \langle \chi_f(\mathbf{z})\chi_{\Gamma_\varepsilon}(\mathbf{z} + \mathbf{r})\chi_{\Gamma_\varepsilon}(\mathbf{z} + \mathbf{s}) \rangle \end{aligned} \quad (1.61)$$

Dans la littérature, les précautions de passage à la limite ne sont pas toujours prises. Dans ce cas, les termes en $\chi_{\Gamma_\varepsilon}/\varepsilon$ sont abusivement remplacés par la distribution δ_Γ . Les fonctions de corrélation à deux et trois points pour une distribution aléatoire de grains solides sphériques inter-pénétrables de rayon R sont données dans l'Annexe A.

1.4.2 Bornes "à deux points"

Borne de Prager [78]

Le champ de test de fluctuation microscopique des contraintes $\boldsymbol{\sigma}'_1 \in \mathcal{S}_v^1(\boldsymbol{\alpha})$ est recherché comme le champ solution des équations de Stokes dans un milieu uniforme constitué uniquement de fluide sur Ω . Cette stratégie entretient un lien avec les techniques de polarisation en élasticité, à ceci près qu'à la place de considérer un chargement fictif par précontrainte on considère un chargement fictif par un champ de force. Dans ce problème, la vitesse est constante sur $\partial\Omega$. Une force volumique uniforme $-\boldsymbol{\alpha}$ est appliquée sur Ω_f et une force volumique uniforme $\phi/(1-\phi)\boldsymbol{\alpha}$ est appliquée sur Ω_s (qui ici contient du fluide). Le chargement est donc assuré par la force volumique \mathbf{f} qui vérifie $\bar{\mathbf{f}} = \mathbf{0}$ et définie sur tout le VER par

$$\mathbf{f}(\mathbf{z}) = \frac{\phi}{1-\phi}\boldsymbol{\alpha}\chi_s(\mathbf{z}) - \boldsymbol{\alpha}\chi_f(\mathbf{z}) = \frac{\phi - \chi_f(\mathbf{z})}{1-\phi}\boldsymbol{\alpha} \quad (1.62)$$

Par construction, $\boldsymbol{\sigma}'_1$ appartient bien à $\mathcal{S}_v^1(\boldsymbol{\alpha})$. Le champ de vitesse \mathbf{u}' associé s'exprime à l'aide de l'opérateur de Green \mathbf{G} du milieu visqueux uniforme :

$$\mathbf{u}'(\mathbf{z}) = \int \mathbf{G}(\mathbf{z}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \, dV_x \quad (1.63)$$

L'énergie de contrainte $W^*(\boldsymbol{\sigma}'_1)$ qui intervient dans (1.53) peut alors directement s'exprimer à partir de \mathbf{u}' par

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} \leq 2W^*(\boldsymbol{\sigma}'_1) = \overline{\boldsymbol{\sigma}'_1 : \mathbb{K} : \boldsymbol{\sigma}'_1 \chi_f / 2\mu} = \overline{\mathbf{d}(\mathbf{u}') : \boldsymbol{\sigma}'_1 \chi_f} \quad (1.64)$$

Lorsque $\boldsymbol{\sigma}_1$ et \mathbf{d} sont exprimés directement à partir du champ de force dans (1.64), la borne fait apparaître des fonctions de corrélation à trois points. Dans un premier temps, cette complexité peut être contournée pour ne faire apparaître que des fonctions de corrélation à deux points suivant Prager [78]. En effet, la densité d'énergie de contrainte étant positive, enlever le terme χ_f dans l'expression précédente fournit le majorant :

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} \leq \overline{\mathbf{d}(\mathbf{u}') : \boldsymbol{\sigma}'_1} = \frac{1}{|\Omega|} \left(\int_{\partial\Omega} \mathbf{u}' \cdot \boldsymbol{\sigma}'_1 \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_{\Omega} \mathbf{u}' \cdot \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}'_1 \, dV \right) \quad (1.65)$$

Le terme de surface disparaît car la vitesse est constante sur $\partial\Omega$ et la fluctuation des contraintes est auto-équilibrée. Dans le terme de volume, $\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}'_1 = -\mathbf{f}$ de sorte que

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} \leq \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \mathbf{f}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{z}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \, dV_z \, dV_x \quad (1.66)$$

Ensuite, effectuons l'approximation classique qui consiste à remplacer l'opérateur de Green $\mathbf{G}(\mathbf{z}, \mathbf{x})$ du domaine Ω par celui du milieu infini $\mathbf{G}^\infty(\mathbf{z} - \mathbf{x})$ qui vaut, dans le cas incompressible :

$$\mathbf{G}^\infty(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{1} + \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r}{8\pi\mu r} \quad (1.67)$$

Pour que cette approximation soit bonne, il faut appliquer \mathbf{G}^∞ à un champ de force de moyenne nulle $\mathbf{f} - \overline{\mathbf{f}}$, ce qui est déjà vérifié ici. Avec le changement de variable $\mathbf{r} = \mathbf{z} - \mathbf{x}$ le majorant (1.66) devient :

$$\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \mathbf{f}(\mathbf{r} + \mathbf{x}) \cdot \mathbf{G}^\infty(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \, dV_r \, dV_x \quad (1.68)$$

En particulier, pour le choix de champ de force volumique (1.62), l'expression (1.68) devient

$$\frac{1}{(1-\phi)^2} \int \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{G}^\infty(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\alpha} \left(\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (\phi - \chi_f(\mathbf{r} + \mathbf{x})) (\phi - \chi_f(\mathbf{x})) \, dV_x \right) \, dV_r \quad (1.69)$$

Sous hypothèses de stationnarité et d'ergodicité, cette expression fait apparaître la fonction de corrélation à deux points $F_{vv}(\mathbf{r})$ de la phase fluide (1.59) :

$$\int \frac{1}{(1-\phi)^2} \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{G}^\infty(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\alpha} (F_{vv}(\mathbf{r}) - \phi^2) \, dV_r \quad (1.70)$$

Si de plus le milieu est isotrope, alors $F_{vv}(\mathbf{r}) = F_{vv}(r)$ et $\mathbf{K} = K^{\text{int}}/\mu\mathbf{I}$. La fin du calcul fait intervenir la moyenne angulaire de $\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r$ qui vaut :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{\text{sphère unité}} \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r \, dS = \frac{1}{3}\mathbf{1} \quad (1.71)$$

La perméabilité intrinsèque est majorée par la borne "à deux points" suivante¹ :

$$K^{\text{int}} \leq \frac{2}{3(1-\phi)^2} \int_{r=0}^{\infty} r (F_{vv}(r) - \phi^2) \, dr \quad (1.72)$$

L'intégrale est convergente puisque les convergences mentionnées (1.60) sont exponentielles. Remarquons que les conditions d'équilibre ont permis de fixer *a priori* l'intensité de la force dans le solide à partir de celle dans le fluide. Au contraire, dans les présentations classiques, les conditions d'équilibre ne sont pas invoquées et l'intensité de la force dans le solide est choisie *a posteriori* pour assurer la convergence de l'intégrale (1.72).

¹Dans le travail original de Prager [78], le coefficient 9/10 a été obtenu au lieu de 2/3, comme remarqué et corrigé par Berryman et Milton [11].

Borne de Doi [31]

La borne de Doi [31] suit la même stratégie mais avec une distribution surfacique constante de force à l'interface solide-fluide à la place de la force volumique constante dans le solide. Le seul choix qui permet d'être statiquement admissible est

$$\mathbf{f}(\mathbf{z}) = \frac{\phi}{\gamma} \boldsymbol{\alpha} \delta_{\Gamma}(\mathbf{z}) - \boldsymbol{\alpha} \chi_f(\mathbf{z}) \quad (1.73)$$

où $\gamma = |\Gamma|/|\Omega|$ est la surface spécifique de l'interface solide-fluide. L'expression (1.68) devient

$$\int \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{G}^{\infty}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\alpha} \left(\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \left(\frac{\phi}{\gamma} \delta_{\Gamma}(\mathbf{r} + \mathbf{x}) - \chi_f(\mathbf{r} + \mathbf{x}) \right) \left(\frac{\phi}{\gamma} \delta_{\Gamma}(\mathbf{x}) - \chi_f(\mathbf{x}) \right) dV_x \right) dV_r \quad (1.74)$$

et nécessite l'introduction des fonctions de corrélation volume-surface F_{vs} et surface-surface F_{ss} (1.59). La borne de Doi [31] est finalement

$$K^{\text{int}} \leq \frac{2}{3} \int_{r=0}^{\infty} r \left(F_{vv}(r) - \frac{2\phi}{\gamma} F_{vs}(r) + \frac{\phi^2}{\gamma^2} F_{ss}(r) \right) dr \quad (1.75)$$

L'intégrale est convergente puisque les convergences mentionnées (1.60) sont exponentielles.

Borne composée

Proposons maintenant une nouvelle contribution. Le cadre mis en place invite à composer les deux champs de force précédents avec λ quelconque :

$$\mathbf{f}(\mathbf{z}) = \boldsymbol{\alpha} \left(\lambda \frac{\phi}{\gamma} \delta_{\Gamma}(\mathbf{z}) + (1 - \lambda) \frac{\phi}{1 - \phi} \chi_s(\mathbf{z}) - \chi_f(\mathbf{z}) \right) \quad (1.76)$$

Cette classe de champs de force vérifie les conditions pour construire un champ statiquement admissible. De plus, comme elle contient celles proposées par Prager et Doi, la borne obtenue sera nécessairement meilleure. L'application du même raisonnement que précédemment conduit à

$$\forall \lambda \in \mathbb{R} \quad K^{\text{int}} \leq \left(\frac{1 - \lambda\phi}{1 - \phi} \right)^2 I_{vv} - \frac{2\lambda(1 - \lambda\phi)}{(1 - \phi)} I_{vs} + \lambda^2 I_{ss} \quad (1.77)$$

où les intégrales suivantes ont été introduites

$$\begin{aligned} I_{vv} &= \frac{2}{3} \int_{r=0}^{\infty} r (F_{vv}(r) - \phi^2) dr \\ I_{vs} &= \frac{2}{3} \int_{r=0}^{\infty} r \frac{\phi}{\gamma} (F_{vs}(r) - \phi\gamma) dr \\ I_{ss} &= \frac{2}{3} \int_{r=0}^{\infty} r \frac{\phi^2}{\gamma^2} (F_{ss}(r) - \gamma^2) dr \end{aligned} \quad (1.78)$$

La borne de Prager (1.72) est retrouvée pour $\lambda = 0$ et celle de Doi (1.75) pour $\lambda = 1$. La valeur optimale de λ est donnée par

$$\lambda^{\text{opt}} = \frac{\phi I_{vv} + (1 - \phi) I_{vs}}{\phi^2 I_{vv} + 2\phi(1 - \phi) I_{vs} + (1 - \phi)^2 I_{ss}} \quad (1.79)$$

de sorte que la meilleure borne à deux points pour cette classe de champ de force est

$$K^{\text{int}} \leq \frac{I_{ss} I_{vv} - I_{vs}^2}{\phi^2 I_{vv} + 2\phi(1 - \phi) I_{vs} + (1 - \phi)^2 I_{ss}} \quad (1.80)$$

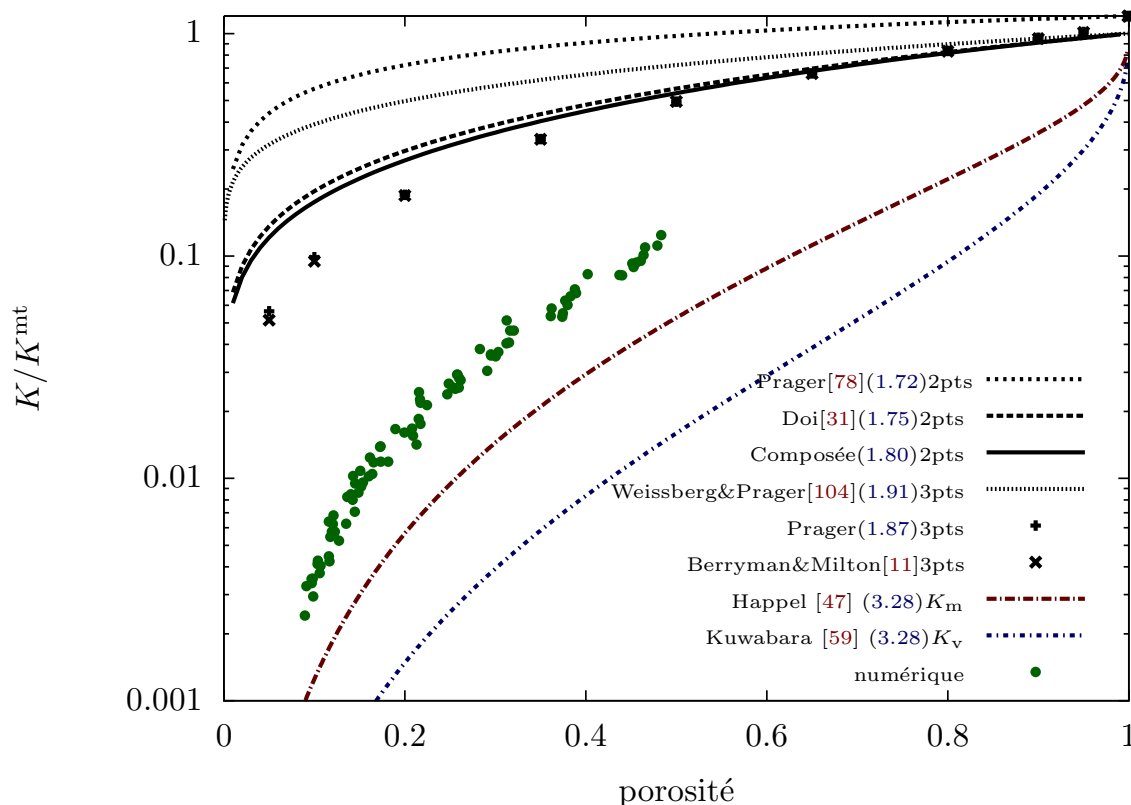


FIG. 1.2: Bornes, estimations et calculs numériques de la perméabilité pour des grains sphériques pénétrables monodisperses. Les perméabilités sont normalisées par (3.23) qui correspond à une estimation valable uniquement dans la limite diluée.

Les trois bornes à deux points ci-dessus peuvent être évaluées à l'aide des fonctions de corrélation en annexe A pour une microstructure dont la phase solide est composée de grains sphériques monodisperses parfaitement inter-pénétrables aléatoirement répartis. Les résultats sont présentés Fig. 1.2. La borne à deux points de Doi améliore significativement celle de Prager. La borne composée n'améliore celle de Doi que de 10% au mieux, aux faibles porosités. Il est intéressant de noter que la valeur optimale de λ^{opt} est toujours plus grande que 1 (au maximum 1,35 aux faibles porosités), ce qui montre que le champ de force surfacique est largement privilégié et explique pourquoi la borne de Doi est meilleure que celle de Prager.

Des résultats similaires pour des grains solides sphériques impénétrables ont été établis par [9, 82]. Pour cette morphologie, la perméabilité estimée est toujours plus faible que pour les sphères inter-pénétrables.

1.4.3 Bornes “à trois points”

La majoration $\chi_f \leq 1$ effectuée précédemment est particulièrement crue lorsque la porosité est faible. Dans ce cas, il faut réaliser un calcul direct. Pour calculer le taux de déformation, notons $\mathcal{G}(z, \mathbf{x}) = \text{grad}_z^{s(1,2)} \mathbf{G}(z, \mathbf{x})$ l'opérateur tensoriel d'ordre 3 tel que

$$d(z) = \int_{\Omega} \mathcal{G}(z, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) dV_x = (\mathcal{G} * \mathbf{f})(z) \quad (1.81)$$

Alors (1.64) devient

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} \leq \frac{2\mu}{|\Omega|} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \chi_f(\mathbf{z}) \mathcal{G}(\mathbf{z}, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) : \mathcal{G}(\mathbf{z}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{y}) \, dV_x \, dV_y \, dV_z \quad (1.82)$$

En utilisant l'opérateur de Green du milieu infini, le majorant est

$$\frac{2\mu}{|\Omega|} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \chi_f(\mathbf{z}) \mathcal{G}^{\infty}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{z} - \mathbf{r}) : \mathcal{G}^{\infty}(\mathbf{s}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{z} - \mathbf{s}) \, dV_r \, dV_s \, dV_z \quad (1.83)$$

où l'opérateur de Green d'ordre 3 du milieu infini incompressible est

$$\mathcal{G}^{\infty}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\mu r^2} \left(2\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{1} - \mathbf{1} \otimes \mathbf{e}_r - 3\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r \right) \quad (1.84)$$

Champ de force volumique

Reprenons le champ de force de Prager (1.62). Le majorant de la perméabilité prend alors la forme

$$\frac{2\mu}{(1-\phi)^2} \int \int \mathcal{G}^{\infty}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\alpha} : \mathcal{G}^{\infty}(\mathbf{s}) \cdot \boldsymbol{\alpha} \langle \chi_f(\mathbf{z}) (\chi_f(\mathbf{z} - \mathbf{r}) - \phi) (\chi_f(\mathbf{z} - \mathbf{s}) - \phi) \rangle \, dV_r \, dV_s \quad (1.85)$$

Le terme entre crochet fait apparaître les fonctions de corrélation à deux et trois points F_{vv} suivantes (voir (1.61)) :

$$\langle \chi_f(\mathbf{z}) (\chi_f(\mathbf{z} - \mathbf{r}) - \phi) (\chi_f(\mathbf{z} - \mathbf{s}) - \phi) \rangle = \phi^3 - \phi (F_{vv}(-\mathbf{r}) + F_{vv}(-\mathbf{s})) + F_{vvv}(-\mathbf{r}, -\mathbf{s}) \quad (1.86)$$

Lorsque le milieu est isotrope, le seul terme non nul est le terme de la fonction de corrélation à trois points. Par ailleurs, $F_{vvv}(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = F_{vvv}(r, s, t)$ ne dépend plus que de $r = |\mathbf{r}|$, $s = |\mathbf{s}|$ et $t = \mathbf{e}_r \cdot \mathbf{e}_s$. Tous calculs faits, la perméabilité intrinsèque est majorée par

$$K^{\text{int}} \leq \frac{1}{4(1-\phi)^2} \int_{r=0}^{\infty} \int_{s=0}^{\infty} \int_{t=-1}^1 t(3t^2 - 1) F_{vvv}(r, s, t) \, dr \, ds \, dt \quad (1.87)$$

Ce majorant peut être évalué pour une distribution aléatoire de sphères (qui peuvent se superposer) à l'aide des valeurs de l'intégrale triple données dans [11]. Il est amélioré (1.72), (1.75) et (1.80) pour $\phi \leq 70\%$ mais se comporte sans surprise comme (1.72) dans la limite diluée $\phi \rightarrow 1$. Notons que (1.87) est très légèrement supérieur à la borne à trois points proposée par Berryman et Milton [11]. Dans [11], les mêmes intégrales apparaissent bien que l'opérateur de Green ne soit jamais mentionné explicitement. Une hypothèse pour expliquer la différence observée dans les bornes est que le choix de champ de contrainte dans [11] équivaut à faire de plus une optimisation sur le coefficient de Poisson dans l'opérateur de Green.

Champ de force surfacique

Reprenons maintenant le champ de force de Doi (1.73). Le majorant de la perméabilité prend alors la forme

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} \leq 2\mu \int \int \mathcal{G}^{\infty}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\alpha} : \mathcal{G}^{\infty}(\mathbf{s}) \cdot \boldsymbol{\alpha} \left\langle \chi_f(\mathbf{z}) \left(\chi_f(\mathbf{z} - \mathbf{r}) - \frac{\phi}{\gamma} \delta_{\Gamma}(\mathbf{z} - \mathbf{r}) \right) \left(\chi_f(\mathbf{z} - \mathbf{s}) - \frac{\phi}{\gamma} \delta_{\Gamma}(\mathbf{z} - \mathbf{s}) \right) \right\rangle \, dV_r \, dV_s \quad (1.88)$$

Le terme entre crochet fait apparaître les fonctions de corrélation à deux et trois points suivantes (voir (1.61)) :

$$F_{vvv}(-\mathbf{r}, -\mathbf{s}) - \frac{\phi}{\gamma} (F_{vvs}(-\mathbf{s}, -\mathbf{r}) + F_{vvs}(-\mathbf{r}, -\mathbf{s})) + \frac{\phi^2}{\gamma^2} F_{vss}(-\mathbf{r}, -\mathbf{s}) \quad (1.89)$$

La perméabilité est finalement majorée par la borne “à trois points” pour le champ de type Doi :

$$K^{\text{int}} \leq \frac{1}{4} \int_{r=0}^{\infty} \int_{s=0}^{\infty} \int_{t=-1}^1 t(3t^2 - 1) \left(F_{vvv}(r, s, t) - \frac{2\phi}{\gamma} F_{vvs}(r, s, t) + \frac{\phi^2}{\gamma^2} F_{vss}(r, s, t) \right) d_r d_s d_t \quad (1.90)$$

Cette expression est nouvelle à notre connaissance. Les fonctions $F_{vvs}(r, s, t)$ et $F_{vss}(r, s, t)$ ont été étudiées dans [99] mais restent malheureusement difficiles à évaluer. Comme la borne à deux points de Doi améliore considérablement celle de Prager, on peut espérer qu’il en soit de même pour la borne à trois points (1.90). L’évaluation et l’intégration de ces fonctions de corrélations à trois points présentent un grand intérêt pratique.

Pour finir, la même démarche peut être adoptée sans difficulté supplémentaire avec le champ de force (1.76) suivie d’une optimisation de λ .

Écoulement de Stokes autour d’une sphère

Toutes les bornes précédentes sont basées sur le choix d’un champ de force et application de l’opérateur de Green. D’autres alternatives ont été étudiées, notamment la construction d’un champ statiquement admissible comme la somme du champ de contrainte solution de l’écoulement de Stokes autour d’une sphère dans un milieu infini, recentré sur chaque grain sphérique. La méthode conduit de même à des bornes qui font intervenir les fonctions de corrélation à deux, trois, voir n points. Le résultat le plus intéressant est peut être la borne analytique de Weissberg et Prager [104] pour un milieu constitué de grains sphériques de rayons R , dispersés aléatoirement et pouvant se recouvrir :

$$\frac{K_{\text{wp}}^{\text{int}}}{R^2} = \frac{2\phi}{-9 \ln(\phi)} \quad (1.91)$$

1.5 Glissement aux parois

1.5.1 Théorie cinétique des gaz

Pour l’écoulement d’un gaz, la condition d’adhérence d’un fluide visqueux à l’interface solide-fluide Γ est prise en défaut. D’après la théorie de la cinétique des gaz [54, 61, 104], la condition d’adhérence sur Γ doit être remplacée par la condition de glissement²

$$[[\mathbf{v}]] = \frac{\zeta}{\mu} (\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \quad (1.92)$$

où ζ est le coefficient de glissement, μ la viscosité, \mathbf{n} la normale unitaire à la paroi dirigée vers le fluide. Le glissement est donc tangentiel à l’interface solide-fluide et proportionnel au vecteur contrainte tangentiel. En suivant la distribution de Maxwell de vitesse des molécules, le coefficient de glissement est donné par [54, 61, 89, 104]

$$\zeta = \frac{\pi}{4} \frac{\mu \bar{v}_{\text{mol}}}{p_0} \frac{2 - \vartheta}{\vartheta} \quad \text{avec } \bar{v}_{\text{mol}} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}} \quad (1.93)$$

où R est la constante des gaz parfaits³, T la température, M la masse molaire et ϑ représente la fraction de molécules absorbées par la paroi puis réémises par diffusion dans toutes les directions et $(1 - \vartheta)$ la fraction de molécules réfléchies. \bar{v}_{mol} est la vitesse moléculaire moyenne pour la distribution de Maxwell (quelques centaines de mètres par secondes aux températures usuelles).

²En condition isotherme

³Il existe un conflit de notations entre le rayon des sphères et la constante des gaz parfaits, mais le contexte permet aisément de lever l’incertitude.

	λ (nm)	d (nm)	\bar{v}_{mol} (m.s ⁻¹)
Argon	62,6	0,342	380
Méthane	48,1	0,380	600

TAB. 1.1: Libre parcours moyen, diamètre moléculaire et vitesse moyenne à pression atmosphérique et 0°C. Source : National Physical Laboratory, Kaye and Laby : Tables of physical and chemical constants (http://www.kayelaby.npl.co.uk/general_physics/2_2/2_2_4.html)

Des valeurs expérimentales de ϑ , comprises entre 0,85 et 1 pour les gaz nobles et H_2 , N_2 , CO_2 sont présentées dans [77, 89]. Pour l'Argon, $\vartheta = 0,921$.

Par ailleurs, la théorie cinétique des gaz de Maxwell fait apparaître une longueur caractéristique λ appelée libre parcours moyen qui correspond à la distance moyenne parcourue par une molécule entre deux collisions :

$$\lambda = \frac{kT}{\sqrt{2}\pi d^2 p_0} \quad (1.94)$$

ou $k = R/\mathcal{N}_A = 1,38 \cdot 10^{-23} JK^{-1}$ est la constante de Boltzmann et d est le diamètre "de collision" d'une molécule. La constante des gaz parfaits vaut $R = 8,31 JK^{-1} \text{mol}^{-1}$ et le nombre d'Avogadro $\mathcal{N}_A = 6,02 \cdot 10^{23} \text{mol}^{-1}$.

En outre, la viscosité déduite de la théorie cinétique des gaz par Maxwell est [54, 61]

$$\mu = \frac{Mp_0\lambda\bar{v}_{\text{mol}}}{3RT} = \frac{2}{3\pi d^2} \sqrt{\frac{MkT}{\mathcal{N}_A\pi}} \quad (1.95)$$

Un développement ultérieur dû à Chapman et Enskog pour un gaz mono-atomique a conduit à l'expression suivante de la viscosité, en meilleur accord avec les valeurs expérimentales [52] :

$$\mu = \frac{5}{16d^2} \sqrt{\frac{MkT}{\mathcal{N}_A\pi}} \quad (1.96)$$

Remarquons que la viscosité ne dépend pas de la pression d'après ces expressions. Le coefficient de glissement peut alors être réexprimé en fonction du libre parcours moyen :

$$\zeta = \frac{5\pi\lambda}{16} \frac{2 - \vartheta}{\vartheta} \quad (1.97)$$

d'où l'ordre de grandeur $\zeta \approx \lambda$.

Dans un milieu gouverné par une distance caractéristique R , le nombre adimensionnel $K_n = \lambda/R$ appelé nombre de Knudsen est communément introduit. Si $K_n \ll 1$, le glissement peut être négligé ; sinon, il doit être pris en compte. Quelques ordres de grandeurs sont présentés dans la table 1.1 pour deux gaz d'intérêt dans ce mémoire.

1.5.2 Modification des principes variationnels

Les ensembles de champs cinématiquement admissibles \mathcal{C} (1.31),(1.33),(1.35) doivent être modifiés pour autoriser un saut de vitesse tangentiel à l'interface solide-fluide. Cependant, le saut de vitesse contribue à la puissance de déformation qui fait maintenant apparaître un nouveau terme surfacique :

$$\frac{1}{2} \int_{\Omega_f} 2\mu \mathbf{d} : \mathbf{d} \, dV + \frac{1}{2} \int_{\Gamma} \frac{\mu}{\zeta} \llbracket \mathbf{v}_t \rrbracket \cdot \llbracket \mathbf{v}_t \rrbracket \, dS \quad (1.98)$$

En revanche, les ensembles de champs statiquement admissibles restent inchangés. La puissance de contrainte fait apparaître un nouveau terme surfacique :

$$\frac{1}{2} \int_{\Omega_f} \frac{1}{2\mu} \boldsymbol{\sigma} : \mathbb{K} : \boldsymbol{\sigma} \, dV + \frac{1}{2} \int_{\Gamma} \frac{\zeta}{\mu} \mathbf{T} \cdot (\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cdot \mathbf{T} \, dS \quad (1.99)$$

À ces modifications près, les résultats variationnels (1.51), (1.53), (1.56), (1.58) restent valables.

Un exemple d'utilisation est a été proposé par Weissberg et Prager [104] pour borner la perméabilité d'un assemblage de sphères qui peuvent se recouvrir, avec prise en compte du glissement aux parois.

Ce chapitre a permis de poser le problème de micromécanique pour l'homogénéisation d'un écoulement de Stokes en un écoulement darcéen. Une particularité de ce problème est le chargement en moyenne de la phase solide, qui joue un rôle crucial pour assurer l'équilibre. Les cadres variationnels classiques ont été redéveloppés et appliqués pour rappeler et proposer des bornes sur la perméabilité de milieux granulaires. La qualité de ces bornes reste à estimer par une confrontation à des simulations numériques.

* *

*

Chapitre 2

Cadre variationnel type Hashin-Shtrikman pour la perméabilité

Résumé : *L'objet de ce chapitre est l'introduction d'un nouveau cadre variationnel pour l'homogénéisation micro-méso de la perméabilité. Le cadre variationnel met à profit l'analogie entre un problème d'écoulement de Stokes et un problème d'élasticité linéaire incompressible, tout en préservant la particularité des conditions aux limites. Un changement d'espace fonctionnel bénéfique en résulte : d'un espace de champs de vitesses cinématiquement admissibles à un espace de champs de polarisation sans restriction. Ce nouveau cadre variationnel est mis à profit pour développer une méthode numérique efficace basée sur une discrétisation régulière et l'utilisation de transformées de Fourier rapides (FFT), cousine de méthodes existantes en élasticité linéaire. Enfin, une ouverture vers de potentielles nouvelles bornes analytiques ou semi-analytiques est proposée.*

Sommaire

2.1	Nouveau cadre variationnel type Hashin-Shtrikman	24
2.1.1	Extension du problème d'écoulement	24
2.1.2	Transformation de Legendre	27
2.1.3	Fonctionnelle de Hashin et Shtrikman	28
2.1.4	Cadre variationnel simplifié	29
2.2	Bornes sur la perméabilité par une méthode FFT	30
2.2.1	Discrétisation	30
2.2.2	Optimisation	32
2.2.3	Implémentation pratique	33
2.2.4	Validation	34
2.2.5	Application : sphéroïdes inter-pénétrables aléatoirement dispersés	39

2.1 Nouveau cadre variationnel type Hashin-Shtrikman

L'objet de cette section est d'établir un cadre variationnel pour l'homogénéisation de la perméabilité permettant de s'affranchir des conditions d'admissibilité qui rendent difficile en pratique l'utilisation des théorèmes de minimum de l'énergie potentielle (1.51),(1.53) ou complémentaire (1.56),(1.58). L'idée est de reformuler le problème d'homogénéisation de la perméabilité (1.37) en un problème formellement proche de l'homogénéisation d'un matériau élastique linéaire hétérogène. Bien que certaines différences liées à la nature du chargement et de la loi de comportement macroscopique persistent, il est ici établi que le cadre variationnel de Hashin et Shtrikman [49] pour l'élasticité peut se transposer à l'homogénéisation de la perméabilité.

2.1.1 Extension du problème d'écoulement

Le point de départ est d'étendre à la phase solide le problème d'homogénéisation de la perméabilité (1.37), qui n'est défini que sur la phase fluide. Le problème étendu doit être défini de manière à avoir la même solution que le problème initial. Dans cette optique, il convient notamment de choisir une loi de comportement, des conditions aux limites et un chargement adéquats dans le solide.

Loi de comportement

Les développements du chapitre 1 ont été menés sous l'hypothèse que la phase solide ne se déforme pas et reste fixe. Pour rendre compte de l'absence de déformation dans le solide, la loi de comportement d'un fluide Newtonien incompressible avec viscosité infinie est adoptée :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}) = -p\mathbf{1} + 2\mu(\mathbf{z})\mathbf{d}(\mathbf{v}(\mathbf{z})) \text{ avec } \mu(\mathbf{z}) = \begin{cases} \mu & (\mathbf{z} \in \Omega_f) \\ \infty & (\mathbf{z} \in \Omega_s) \end{cases} \quad (2.1)$$

L'avantage de ce point de vue est d'une part que la loi de comportement dans le solide a alors la même forme que dans le fluide. D'autre part, la solution du problème étendu vérifiera automatiquement la condition d'adhérence à l'interface solide-fluide. Il conviendra cependant de bloquer les mouvements de corps rigide.

Conditions aux limites

À la frontière $\partial\Omega$ du VER, le vecteur contrainte et la vitesse sont astreints à suivre les mêmes conditions dans la phase solide que celles présentées pour la phase fluide à la section 1.2.2. Les conditions aux limites (périodiques, uniformes en vitesse, ou mixte) licites pour le VER considéré sont les mêmes que celles détaillées section 1.2.2. Notons que la condition de continuité du vecteur contrainte à la traversée de l'interface solide-fluide est implicitement adoptée.

La viscosité dans la phase solide étant infinie, la condition d'adhérence à l'interface solide-fluide peut maintenant être remplacée par des conditions moins contraignantes : il suffit de bloquer les mouvements de corps rigide dans la phase solide.

De manière générale, chaque mouvement de corps rigide (indexé par i) peut être bloqué par une liaison linéaire notée $\mathbf{L}_i(\mathbf{u})$. L'ensemble des champs de vitesse qui vérifient ces liaisons est noté \mathcal{L} :

$$\mathcal{L} = \{\mathbf{u} \mid \mathbf{L}_i(\mathbf{u}) = \mathbf{0}(\forall i)\} \quad (2.2)$$

Pour illustrer cette démarche, présentons deux exemples. Ces deux exemples seront suivis tout au long du chapitre. L'exemple 1 est le cas le plus simple mais aussi le plus utile en pratique. *L'exemple 2 est plus complexe et surtout plus lourd en terme de notations : il peut être ignoré en première lecture, car l'exemple 1 suffit pour introduire la démarche générale.*

Exemple 1 Supposons que les conditions aux limites périodiques sont adoptées et que la phase solide (en incluant ses reproductions périodiques) est connexe. C'est en fait la situation qui sera la plus couramment rencontrée en pratique par la suite. Alors, par périodicité de la vitesse, la rotation du solide est automatiquement bloquée. Il suffit de bloquer la translation \mathbf{V}_1 du solide. À cet effet, on peut par exemple choisir d'imposer que la vitesse soit nulle en moyenne sur un sous domaine quelconque $\Omega_1 \subset \Omega_s$ de la phase solide, c'est à dire d'imposer la liaison

$$\mathbf{L}_1(\mathbf{u}) = \overline{\mathbf{u}}^1 = \mathbf{0}. \quad (2.3)$$

Exemple 2 Supposons que la phase solide est constituée de n particules disjointes $\Omega_{s,p}$ avec $p = 1, \dots, n$. Dans cet exemple purement académique, la translation et la rotation de chaque particule doivent être bloquées [75]. Pour chaque particule p , on peut choisir un sous domaine quelconque $\Omega_p \subset \Omega_{s,p}$ et on note \mathbf{z}_p le barycentre de Ω_p . Le mouvement de corps rigide de la particule p peut s'écrire sous la forme

$$\mathbf{v}(\mathbf{z}) = \mathbf{V}_p + \mathbf{W}_p \wedge (\mathbf{z} - \mathbf{z}_p) \quad (\mathbf{z} \in \Omega_{s,p}) \quad (2.4)$$

Pour bloquer la translation \mathbf{V}_p et la rotation \mathbf{W}_p de chaque particule, on peut choisir d'imposer les liaisons

$$\mathbf{L}_p(\mathbf{u}) = \overline{\mathbf{v}}^p = \mathbf{0} \quad ; \quad \mathbf{L}_{n+p}(\mathbf{u}) = \overline{(\mathbf{z} - \mathbf{z}_p) \wedge \mathbf{v}}^p = \mathbf{0}. \quad (2.5)$$

Si \mathbf{u} suit le mouvement de corps rigide (2.4), alors $\mathbf{L}_p(\mathbf{u}) = \mathbf{V}_p$ et $\mathbf{L}_{n+p}(\mathbf{u}) = \mathbf{I}_p \cdot \mathbf{W}_p$, où \mathbf{I}_p est le tenseur d'inertie du sous domaine Ω_p inclus dans la particule p , normalisé par $|\Omega_p|$:

$$\mathbf{I}_p = \overline{|\mathbf{z} - \mathbf{z}_p|^2 \mathbf{1} - (\mathbf{z} - \mathbf{z}_p) \otimes (\mathbf{z} - \mathbf{z}_p)}^p. \quad (2.6)$$

Chargement

L'équation d'équilibre doit vérifier les conditions (1.27). Dans la phase fluide, les contraintes restent à divergence nulle. En revanche, dans la phase solide, les contraintes sont en équilibre avec un champ de force volumique dont la moyenne doit vérifier la condition (1.27). On cherche donc à définir un champ de force volumique \mathbf{f} qui vérifie les conditions $\mathbf{f}(\mathbf{z}) = \mathbf{0}$ dans Ω_f et $\overline{\mathbf{f}} = \boldsymbol{\alpha}$.

Par ailleurs, la forme de ce champ de force volumique doit être prise telle qu'il corresponde aux multiplicateurs de Lagrange associé à chaque condition de blocage des mouvements de corps rigide :

$$\overline{\mathbf{f} \cdot \mathbf{u}} = \sum_i \lambda_i \cdot \mathbf{L}_i(\mathbf{u}) \quad (2.7)$$

Reprenons les exemples précédents pour préciser :

Exemple 1 Le champ de force volumique $\mathbf{f}(\mathbf{z}) = \mathbf{F}_1 \chi_1(\mathbf{z})$ est choisi, avec \mathbf{F}_1 uniforme et χ_1 la fonction indicatrice du sous ensemble $\Omega_1 \in \Omega_s$ sur lequel une vitesse moyenne nulle est imposée. La puissance virtuelle du champ \mathbf{f} dans un champ de vitesse virtuel \mathbf{u} est $\overline{\mathbf{f} \cdot \mathbf{u}} = f_1 \mathbf{F}_1 \cdot \overline{\mathbf{u}}^1$ où f_1 est la fraction volumique de Ω_1 . Le multiplicateur de Lagrange de la liaison $\mathbf{L}_1 = \overline{\mathbf{u}}^1 = \mathbf{0}$ est donc la force

$$\lambda_1 = f_1 \mathbf{F}_1. \quad (2.8)$$

Si le gradient de pression macroscopique $\boldsymbol{\alpha}$ est imposé, alors la force \mathbf{F}_1 est directement connue et $\mathbf{f}(\mathbf{z}) = \boldsymbol{\alpha} \chi_1(\mathbf{z}) / f_1$.

Exemple 2 Le champ de force volumique est choisi de la forme :

$$\mathbf{f}(\mathbf{z}) = \sum_{p=1}^n (\mathbf{F}_p + \mathbf{C}_p \wedge (\mathbf{z} - \mathbf{z}_p)) \chi_p(\mathbf{z}) \quad (2.9)$$

où χ_p est la fonction indicatrice de Ω_p , la constante \mathbf{F}_p est la force volumique appliqué à la particule p pour empêcher sa translation et \mathbf{C}_p la constante telle que $\mathbf{I}_p \cdot \mathbf{C}_p$ soit le couple appliqué à la particule p pour bloquer sa rotation. La puissance virtuelle développée par \mathbf{f} dans un champ de vitesse virtuel \mathbf{u} qui suit le mouvement de corps rigide (2.4) dans chaque particule p est

$$\overline{\mathbf{f} \cdot \mathbf{u}} = \sum_{p=1}^n f_p \left(\mathbf{F}_p \cdot \overline{\mathbf{u}^p} + \mathbf{C}_p \cdot \overline{(\mathbf{z} - \mathbf{z}_p) \wedge \mathbf{u}^p} \right), \quad (2.10)$$

où f_p est la fraction volumique du sous domaine Ω_p . Les multiplicateurs de Lagrange des liaisons $\mathbf{L}_p = \overline{\mathbf{u}^p} = \mathbf{0}$ et $\mathbf{L}_{n+p}(\mathbf{u}) = \overline{(\mathbf{z} - \mathbf{z}_p) \wedge \mathbf{u}^p} = \mathbf{0}$ sont donc respectivement

$$\lambda_p = f_p \mathbf{F}_p \quad ; \quad \lambda_{p+n} = f_p \mathbf{C}_p \quad (2.11)$$

Si le gradient de pression macroscopique $\boldsymbol{\alpha}$ est imposé, alors les forces \mathbf{F}_p sont soumises à la condition $\sum f_p \mathbf{F}_p = \boldsymbol{\alpha}$.

Formulation directe du problème étendu

Les ensembles de champs cinématiquement admissibles $\mathcal{C}'(\mathbf{V})$ sont définis comme dans (1.31), (1.33) ou (1.35) à l'exception de la condition $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ sur $\Gamma \cap \Omega_s$ qui est levée.

De même, les ensembles de champs statiquement admissibles $\mathcal{S}'(\boldsymbol{\alpha})$ sont définis comme dans (1.31), (1.33) ou (1.35) à l'exception de l'équation d'équilibre qui est remplacée par $\text{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} = \mathbf{0}$ dans Ω entier, où le champ de force \mathbf{f} prend la forme précisée dans la sous-section "Chargement" ci-dessus.

Lorsque la vitesse macroscopique \mathbf{V} est imposée, le problème étendu s'écrit

$$\text{trouver } \mathbf{v} \in \mathcal{C}'(\mathbf{V}) \cap \mathcal{L} \text{ et } \boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}' \text{ vérifiant (2.1)} \quad (2.12)$$

Lorsque le gradient de pression macroscopique $\boldsymbol{\alpha}$ est imposé, le problème étendu s'écrit

$$\text{trouver } \mathbf{v} \in \mathcal{C}' \cap \mathcal{L} \text{ et } \boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}'(\boldsymbol{\alpha}) \text{ avec } \overline{\mathbf{f}} = \boldsymbol{\alpha} \text{ vérifiant (2.1)} \quad (2.13)$$

Cadres variationnels classiques

Dans la formulation faible du problème étendu, on choisit de relâcher les liaisons \mathbf{L}_i qui bloquent les mouvements de corps rigides pour les imposer à l'aide d'un lagrangien. Le lemme de Hill (1.48) devient

$$\forall \mathbf{u} \in \mathcal{C}'(\mathbf{V}), \forall \boldsymbol{\sigma}' \in \mathcal{S}'(\boldsymbol{\alpha}) \quad \overline{\mathbf{d}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma}'} - \overline{\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}) \cdot \mathbf{u}} = -\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\alpha} \quad (2.14)$$

On rappelle que la puissance virtuelle $\overline{\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}) \cdot \mathbf{u}}$ n'est autre que $\sum_i \lambda_i \mathbf{L}_i(\mathbf{u})$. Lorsque la vitesse macroscopique est imposée, le minimum de l'énergie potentielle devient le lagrangien

$$\frac{1}{2} \mathbf{V} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V} = \sup \left(\inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{C}'(\mathbf{V})} \overline{\mu \mathbf{d}(\mathbf{u}) : \mathbf{d}(\mathbf{u})} - \overline{\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}) \cdot \mathbf{u}} \right). \quad (2.15)$$

Lorsque le gradient de pression macroscopique est imposé :

$$-\frac{1}{2} \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} = \sup_{\lambda_i \text{ t.q. } \overline{\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda})} = \boldsymbol{\alpha}} \left(\inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{C}'} \overline{\mu \mathbf{d}(\mathbf{u}) : \mathbf{d}(\mathbf{u})} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \overline{\mathbf{u}} - \overline{\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}) \cdot \mathbf{u}} \right). \quad (2.16)$$

Remarquons tout de suite que dans le cas de l'exemple 1 ci-dessus avec gradient de pression macroscopique imposé, (2.16) se simplifie en

$$-\frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} = \inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{C}} \overline{\mu \mathbf{d}(\mathbf{u}) : \mathbf{d}(\mathbf{u})} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \bar{\mathbf{u}} - \boldsymbol{\alpha} \cdot \bar{\mathbf{u}}^1. \quad (2.17)$$

2.1.2 Transformation de Legendre

Le problème étendu (2.12) ou (2.13) présente maintenant suffisamment de similarités avec un problème d'homogénéisation en élasticité linéaire pour utiliser les mêmes outils.

En suivant un raisonnement similaire à Willis [106], proposons une transposition du principe variationnel de Hashin et Shtrikman [49] à l'homogénéisation de la perméabilité. L'idée est de transférer la difficulté associée à l'hétérogénéité de la viscosité (2.1) en un paramètre de chargement supplémentaire $\boldsymbol{\tau}$ appelé polarisation, qui a le sens physique d'une précontrainte.

Dans [106], le point de départ est la transformée de Legendre w_μ^* de la densité de puissance w_μ dissipée localement par un taux de déformation \mathbf{d} dans la viscosité μ :

$$w_\mu(\mathbf{d}) = \frac{1}{2} 2\mu \mathbf{d} : \mathbf{d}. \quad (2.18)$$

La transformée de Legendre de la puissance dissipée est définie sur l'espace des tenseurs d'ordre deux par

$$w_\mu^*(\boldsymbol{\tau}) = \sup_{\mathbf{d}} (\boldsymbol{\tau} : \mathbf{d}(\mathbf{u}) - w_\mu(\mathbf{d})). \quad (2.19)$$

En élasticité, la transformée de Legendre permet de définir l'énergie élastique de contraintes. Dans le cas d'un fluide newtonien incompressible, l'optimum dans (2.19) est obtenu pour

$$w_\mu^*(\boldsymbol{\tau}) = \frac{1}{2} \frac{1}{2\mu} \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\tau}, \quad (2.20)$$

sous réserve de la condition $\mu > 0$ qui bien est vérifiée pour un coefficient de viscosité.

Introduisons maintenant un milieu de référence, de viscosité uniforme μ_0 inférieure à toute valeur locale de la viscosité dans le milieu hétérogène considéré. Alors la viscosité $\delta\mu = \mu(\mathbf{z}) - \mu_0$ est positive en tout point. Une puissance dissipée $w_{\delta\mu}(\mathbf{d})$ peut y être associée, et par définition sa transformée de Legendre $w_{\delta\mu}^*$ satisfait l'inégalité :

$$\forall \boldsymbol{\tau}; \forall \mathbf{d}; w_\mu(\mathbf{d}) \geq w_{\mu_0}(\mathbf{d}) + \boldsymbol{\tau} : \mathbf{d} - w_{\delta\mu}^*(\boldsymbol{\tau}). \quad (2.21)$$

Ensuite, l'idée est d'ajouter de part et d'autre de l'inégalité (2.21) les termes qui interviennent dans les formulations variationnelles (2.15) ou (2.16) du problème étendu, puis d'intégrer sur le VER et d'écrire la stationnarité.

Par exemple, dans le cas d'un gradient de pression macroscopique imposé, on montre à l'aide de (2.16) et (2.21) :

$$\begin{aligned} \forall \boldsymbol{\tau}, \quad -\frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} &= \sup_{\boldsymbol{\lambda}_i \text{ t.q. } \bar{\mathbf{f}}(\boldsymbol{\lambda}) = \boldsymbol{\alpha}} \left(\inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{C}} \left(\overline{w(\mathbf{d}(\mathbf{u})) + \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}) \cdot \mathbf{u}} \right) \right) \geq \\ &\sup_{\boldsymbol{\lambda}_i \text{ t.q. } \bar{\mathbf{f}}(\boldsymbol{\lambda}) = \boldsymbol{\alpha}} \left(\inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{C}} \left(\overline{w_0(\mathbf{d}(\mathbf{u})) + \boldsymbol{\tau} : \mathbf{d}(\mathbf{u}) + \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}) \cdot \mathbf{u}} \right) \right) - \overline{w_{\delta\mu}^*(\boldsymbol{\tau})}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

De même, dans le cas d'une vitesse macroscopique imposée,

$$\forall \boldsymbol{\tau}, \quad \frac{1}{2}\mathbf{V} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V} \geq \sup_{\boldsymbol{\lambda}_i} \left(\inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{C}} \left(\overline{w_0(\mathbf{d}(\mathbf{u})) + \boldsymbol{\tau} : \mathbf{d}(\mathbf{u}) - \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}) \cdot \mathbf{u}} \right) \right) - \overline{w_{\delta\mu}^*(\boldsymbol{\tau})}. \quad (2.23)$$

Les résultats (2.22) et (2.23) constituent la transposition du principe variationnel de Hashin et Shtrikman [49]. La première partie du terme de droite est la formulation variationnelle d'un problème auxiliaire, similaire au problème étendu (2.12) ou (2.13), dans lequel la loi de comportement hétérogène (2.1) est remplacée par une loi précontrainte avec viscosité *homogène* μ_0 et précontrainte égale au champ de polarisation $\boldsymbol{\tau}$:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{1} + 2\mu_0\mathbf{d} + \boldsymbol{\tau}. \quad (2.24)$$

La deuxième partie du membre de droite se calcule aisément connaissant $\boldsymbol{\tau}$ d'après l'expression de la transformée de Legendre de la puissance dissipée pour la viscosité $\mu(\mathbf{z}) - \mu_0$.

Tout le membre de droite est une fonctionnelle de la variable $\boldsymbol{\tau}$, qui est un champ de tenseurs d'ordre deux. En référence à l'élasticité, cette fonctionnelle sera appelée fonctionnelle de Hashin et Shtrikman et notée $\mathcal{HS}(\boldsymbol{\tau})$. L'égalité est obtenue pour un unique champ de polarisation optimum qui est solution de l'équation de Lippman-Schwinger (ou Zeller et Dederichs) :

$$(2\mu(\mathbf{z}) - 2\mu_0)^{-1} \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\Gamma}_0 * \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mathcal{G}}_0 * \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}), \quad (2.25)$$

où les opérateurs de Green d'ordre quatre $\boldsymbol{\Gamma}_0$ et trois $\boldsymbol{\mathcal{G}}_0$ sont définis dans l'Annexe B.

Les inégalités (2.22) et (2.23) constituent un résultat très important car elles permettent d'obtenir une borne supérieure sur la perméabilité pour *n'importe quel choix* d'un champ de polarisation $\boldsymbol{\tau}$, *sans conditions* sur $\boldsymbol{\tau}$. Elles présentent donc une différence majeure avec les théorèmes de minimum de l'énergie potentielle (1.51),(1.53) ou complémentaire (1.56),(1.58), dont l'utilisation est restreinte à des conditions d'admissibilité des champs tests.

Enfin, les inégalités (2.22) et (2.23) restent valables dans le cas particulier $\mu_0 = \mu$, ce qui implique de choisir une polarisation nulle dans la phase fluide.

2.1.3 Fonctionnelle de Hashin et Shtrikman

Pour $(\mathbf{v}_0, \mathbf{d}_0, \boldsymbol{\sigma}_0)$ solution du problème de minimisation sur $\mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{V})$, le principe variationnel de Hashin et Shtrikman (2.23) se réécrit pour tout $\boldsymbol{\tau}$:

$$\frac{1}{2} \mathbf{V} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V} \geq \sup_{\boldsymbol{\lambda}_i} \left(\overline{\frac{1}{2} \mathbf{d}_0 : \boldsymbol{\sigma}_0 + \frac{1}{2} \boldsymbol{\tau} : \mathbf{d}_0 - \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}) \cdot \mathbf{v}_0} \right) - \frac{1}{2} \overline{(2\mu(\mathbf{z}) - 2\mu_0)^{-1} \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\tau}}. \quad (2.26)$$

Par ailleurs, on montre à l'aide du théorème de la divergence et des conditions aux limites que

$$\overline{\mathbf{d}_0 : \boldsymbol{\sigma}_0} = \overline{\mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda})} - \mathbf{V} \cdot \overline{\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda})} \quad (2.27)$$

Par définition des opérateurs de Green (voir Annexe B), le problème auxiliaire a pour solution

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_0 &= \mathbf{G}_0 * \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}) + \mathcal{H}_0 * \boldsymbol{\tau} + \mathbf{V} \\ \mathbf{d}_0 &= \boldsymbol{\mathcal{G}}_0 * \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}) - \boldsymbol{\Gamma}_0 * \boldsymbol{\tau} \end{aligned} \quad (2.28)$$

Finalement, la fonctionnelle de Hashin et Shtrikman s'exprime explicitement en fonction de la polarisation par

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \mathbf{V} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V} &= \sup_{\boldsymbol{\tau}} \left[\sup_{\boldsymbol{\lambda}_i} \left(-\mathbf{V} \cdot \overline{\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda})} - \frac{1}{2} \overline{\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}) \cdot \mathbf{G}_0 * \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda})} + \overline{\boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\mathcal{G}}_0 * \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda})} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \left(\overline{\boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\Gamma}_0 * \boldsymbol{\tau}} + \overline{(2\mu(\mathbf{z}) - 2\mu_0)^{-1} \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\tau}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.29)$$

où l'on a utilisé la propriété d'anti-symétrie $\overline{\mathbf{f} \cdot \mathcal{H}_0 * \boldsymbol{\tau}} = -\overline{\boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\mathcal{G}}_0 * \mathbf{f}}$ des opérateurs de Green d'ordre trois (voir Annexe B). L'optimisation sur les multiplicateurs de Lagrange $\boldsymbol{\lambda}_i$ permet bien d'imposer les liaisons puisque qu'elle revient à écrire

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}_i} \left(\mathbf{V} \cdot \overline{\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda})} + \frac{1}{2} \overline{\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}) \cdot \mathbf{G}_0 * \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda})} - \overline{\boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\mathcal{G}}_0 * \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda})} \right) = \mathbf{L}_i(\mathbf{V} + \mathbf{G}_0 * \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}^{\text{opt}}) + \mathcal{H}_0 * \boldsymbol{\tau}) = \mathbf{0} \quad (2.30)$$

Ensuite, l'optimisation sur le champ de polarisation permet de retrouver l'équation de Lippman-Schwinger puisque qu'elle revient à imposer

$$-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\tau}} \mathcal{H}\mathcal{S}(\boldsymbol{\tau}) = (2\mu(\mathbf{z}) - 2\mu_0)^{-1} \boldsymbol{\tau}^{\text{opt}} + \boldsymbol{\Gamma}_0 * \boldsymbol{\tau}^{\text{opt}} - \boldsymbol{\mathcal{G}}_0 * \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}^{\text{opt}}) = \mathbf{0}, \quad (2.31)$$

qui peut se réécrire

$$\boldsymbol{\tau}^{\text{opt}} = (2\mu(\mathbf{z}) - 2\mu_0) \mathbf{d}^{\text{opt}} \text{ avec } \mathbf{d}^{\text{opt}} = \boldsymbol{\mathcal{G}}_0 * \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}^{\text{opt}}) - \boldsymbol{\Gamma}_0 * \boldsymbol{\tau}^{\text{opt}}, \quad (2.32)$$

c'est à dire que la polarisation optimale $\boldsymbol{\tau}^{\text{opt}}$ est la précontrainte particulière qui permet de retrouver la loi de comportement hétérogène (2.1) à partir de la loi de comportement homogène précontrainte (2.24).

De même, lorsque le gradient de pression est imposé, la fonctionnelle de Hashin et Shtrikman (2.22) s'exprime explicitement en fonction de la polarisation par

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} = \inf_{\boldsymbol{\tau}} \left[\inf_{\boldsymbol{\lambda}_i \text{ t.q. } \overline{\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda})} = \boldsymbol{\alpha}} \left(\frac{1}{2} \overline{\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}) \cdot \mathbf{G}_0 * \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda})} - \overline{\boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\mathcal{G}}_0 * \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda})} \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left(\overline{\boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\Gamma}_0 * \boldsymbol{\tau}} + \overline{(2\mu(\mathbf{z}) - 2\mu_0)^{-1} \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\tau}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Cette dernière expression est particulièrement intéressante lorsque le seul mouvement de corps rigide à bloquer est la translation de l'ensemble de la phase solide car le multiplicateur de Lagrange est connu et $\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}) = \boldsymbol{\alpha} \chi_1(\mathbf{z}) / f_1$ (c.f. exemple 1 ci-dessus).

2.1.4 Cadre variationnel simplifié

Considérons le cas particulier où l'on impose en tout point \mathbf{z} du solide la liaison $\mathbf{u}(\mathbf{z}) = \mathbf{0}$. Alors, si le gradient de pression macroscopique $\boldsymbol{\alpha}$ est imposé, $\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda})$ est un champ de force volumique quelconque soumis aux seules conditions :

$$\mathbf{f} \in \mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha}) = \{ \mathbf{f} \mid \mathbf{f}(\mathbf{z}) = \mathbf{0} (\mathbf{z} \in \Omega_f), \overline{\mathbf{f}} = \boldsymbol{\alpha} \}. \quad (2.34)$$

Si la vitesse macroscopique est imposée, alors le champ de force est soumis aux seules conditions $\mathbf{f} \in \mathcal{F} = \cup_{\boldsymbol{\alpha}} \mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha})$, c'est à dire $\mathbf{f}(\mathbf{z}) = \mathbf{0}$ dans la phase fluide. Prenons de plus le cas particulier $\mu_0 = \mu$. Montrons que le principe variationnel (2.33) se simplifie en :

$$\frac{1}{2} \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} = \inf_{\mathbf{f} \in \mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha})} \left(\frac{1}{2} \overline{\mathbf{f} \cdot \mathbf{G} * \mathbf{f}} \right), \quad (2.35)$$

et le principe variationnel (2.29) en

$$\frac{1}{2} \mathbf{V} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V} = - \inf_{\mathbf{f} \in \mathcal{F}} \left(\mathbf{V} \cdot \overline{\mathbf{f}} + \frac{1}{2} \overline{\mathbf{f} \cdot \mathbf{G} * \mathbf{f}} \right). \quad (2.36)$$

En effet, d'une part le choix $\mu_0 = \mu$ implique de choisir une polarisation nulle dans la phase fluide. D'autre part, pour tout $\boldsymbol{\tau}$, le champ de force optimal dans (2.29) ou (2.33) assure par construction la nullité de la vitesse associée en tout point de la phase solide. Par conséquent, le taux de déformation associé est nul dans la phase solide, de sorte que dans ce cas particulier le champ de polarisation optimum dans (2.29) ou (2.33) vérifie le système :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\tau}^{\text{opt}} = \mathbf{0} & (\mathbf{z} \in \Omega_f) \\ \boldsymbol{\Gamma} * \boldsymbol{\tau}^{\text{opt}} = \mathbf{0} & (\mathbf{z} \in \Omega_s), \end{cases} \quad (2.37)$$

où la deuxième ligne correspond à l'équation de Lippman-Schwinger dans la phase solide. Ce système admet pour solution $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{0}$, d'où l'on déduit (2.35) de (2.33) (resp. (2.36) de (2.29)).

Enfin, (2.35) fournit une approche systématique du résultat (1.66) établi au chapitre 1 à partir du minimum de l'énergie complémentaire et de la majoration $\chi_f(\mathbf{z}) \leq 1$: sous réserve de choisir le bon champ de force test, l'égalité a lieu dans (1.66).

Pour conclure, le résultat majeur de cette section est l'adaptation du principe variationnel de Hashin et Shtrikman à la problématique de l'homogénéisation de la perméabilité. Pour tout choix d'un champ de *polarisation*, *sans condition*, la fonctionnelle de Hashin et Shtrikman (2.29) ou (2.33) fournit une borne supérieure sur la perméabilité. L'évaluation de la fonctionnelle implique les opérateurs de Green, qui sont présentés Annexe B.

À titre accessoire, les formulations variationnelles (2.35) et (2.36) constituent une version simplifiée du principe variationnel de Hashin et Shtrikman. Leur originalité est de formuler la perméabilité comme la solution d'un problème d'optimisation sur un champ de *force volumique*, avec des conditions très peu restrictives d'utilisation. Ces formulations variationnelles simplifiées permettent aussi de construire des bornes supérieures sur la perméabilité.

2.2 Bornes sur la perméabilité par une méthode FFT

L'objet de cette section est de mettre à profit le principe variationnel de Hashin et Shtrikman pour construire une méthode numérique d'homogénéisation de la perméabilité. La méthode présentée est contruite par analogie avec la méthode FFT proposée par Brisard et Dormieux [20] en élasticité linéaire.

2.2.1 Discrétisation

Grille de discrétisation du VER

Dans toute cette section, les conditions aux limites périodiques (1.30) sont adoptées. La cellule de périodicité est un domaine Ω parallélépipède rectangle dans l'espace de dimension $d = 2$ ou 3 . Ses longueurs sont notées L_1, \dots, L_d dans les d directions d'une base cartésienne orthonormée $(\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_d)$.

Le domaine Ω est divisé suivant une grille régulière en $N_1 \times \dots \times N_d = N$ sous domaines $\Omega_{\boldsymbol{\beta}}$ (pixels pour $d = 2$, voxels pour $d = 3$). La position de ces sous domaines dans les d directions de l'espace est indiquée par le multi-indice $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_d) \in \mathcal{I} = [0..N_1 - 1] \times \dots \times [0..N_d - 1]$. Chaque domaine $\Omega_{\boldsymbol{\beta}}$ est un parallélépipède rectangle de taille (ou résolution) identique r_1, \dots, r_d suivant les d axes du repère cartésien orthonormé, avec $r_i = L_i/N_i$. La fonction indicatrice $\chi^{\boldsymbol{\beta}}$ d'un voxel $\Omega_{\boldsymbol{\beta}}$ est définie par

$$\chi^{\boldsymbol{\beta}}(z_1 \mathbf{e}_1 + \dots + z_d \mathbf{e}_d) = \begin{cases} 1 & \text{si } \forall i, 2|z_i - r_i \beta_i| \leq r_i, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Avec cette convention, l'origine du repère est décalée d'un demi voxel par rapport à un des coins de la grille de discrétisation.

Champs de polarisation

L'idée de Brisard et Dormieux [20] est d'optimiser la fonctionnelle de Hashin et Shtrikman sur l'espace des champs de polarisation constants par voxel. Plus précisément, à toute suite de données $(\boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{\beta}})_{\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{I}}$ est associée le champ de polarisation suivant :

$$\boldsymbol{\tau}(\mathbf{z}) = \sum_{\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{I}} \boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{\beta}} \chi^{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{z}). \quad (2.38)$$

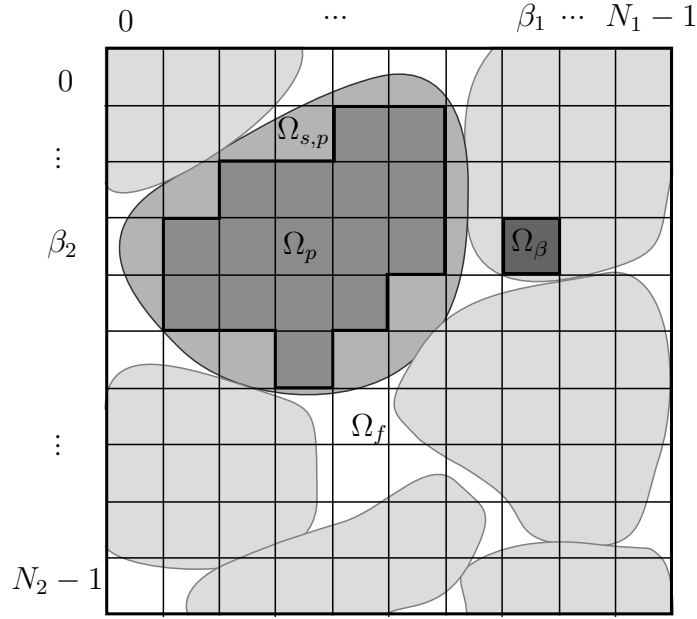


FIG. 2.1: Grille de discrétisation régulière, un voxel Ω_β , une particule solide $\Omega_{s,p}$ et son sous-domaine Ω_p .

Champs de force

Exemple 1 Lorsque la phase solide est connexe et possède une intersection non vide avec la frontière, il suffit de bloquer la translation de la phase solide. En pratique, on choisit d'imposer la condition de vitesse moyenne nulle sur un sous domaine $\Omega_1 \subset \Omega_s$. Il est commode de choisir Ω_1 comme une union de voxels Ω_β de la grille de discrétisation. Par exemple, Ω_1 peut être défini comme l'union de tous les voxels de la grille de discrétisation dont l'intersection avec la phase fluide est l'ensemble vide. Notons \mathcal{I}_1 l'ensemble des indices des voxels qui constituent le sous domaine Ω_1 . Alors le champ de force volumique est cherché sous la forme

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{z}) = \sum_{\beta \in \mathcal{I}} \mathbf{f}_\beta(\boldsymbol{\lambda}) \chi_\beta(\mathbf{z}) = \sum_{\beta \in \mathcal{I}_1} \frac{1}{f_1} \boldsymbol{\lambda}_1 \chi_\beta(\mathbf{z}). \quad (2.39)$$

Si le gradient de pression macroscopique $\boldsymbol{\alpha}$ est imposé, alors $\boldsymbol{\lambda}_1 = \boldsymbol{\alpha}$: le champ de force est déterminé à l'avance. Sinon, le multiplicateur de Lagrange $\boldsymbol{\lambda}_1$ doit être optimisé.

Exemple 2 Dans cet exemple, la translation et la rotation de n particules doivent être bloquées. Pour chaque particule p occupant le domaine $\Omega_{s,p}$, le sous domaine $\Omega_p \subset \Omega_{s,p}$ est défini comme l'union de tous les voxels de la grille de discrétisation strictement inclus dans la particule p (voir Fig. 2.1). Notons \mathcal{I}_p l'ensemble des indices des voxels qui constituent le sous domaine Ω_p , \mathbf{z}_p le centre d'inertie de Ω_p et f_p sa fraction volumique. Le champ de force est recherché sous la forme du champ constant par voxel :

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{z}) = \sum_{p=1}^n \frac{1}{f_p} \sum_{\beta \in \mathcal{I}_p} (\boldsymbol{\lambda}_p + \boldsymbol{\lambda}_{n+p} \wedge (\mathbf{z}_\beta - \mathbf{z}_p)) \chi_\beta(\mathbf{z}) = \sum_{\beta \in \mathcal{I}} \mathbf{f}_\beta(\boldsymbol{\lambda}) \chi_\beta(\mathbf{z}). \quad (2.40)$$

où les multiplicateurs de Lagrange $\boldsymbol{\lambda}_p, \boldsymbol{\lambda}_{n+p}$ doivent être optimisés. On rappelle que si le gradient de pression est imposé, ces multiplicateurs sont soumis à la condition $\sum_{p=1}^n \boldsymbol{\lambda}_p = \boldsymbol{\alpha}$. Rigoureusement, la liaison $\mathbf{L}_{n+p}(\mathbf{u})$ associée au multiplicateur $\boldsymbol{\lambda}_{n+p}$ n'est pas $\overline{(\mathbf{z} - \mathbf{z}_p) \wedge \mathbf{u}^p} = 0$ mais

$\frac{1}{N f_p} \sum_{\beta \in \mathcal{I}_p} (z_\beta - z_p) \wedge \bar{\mathbf{u}}^\beta$. Elle permet toutefois de bloquer efficacement une rotation de corps rigide.

Fonctionnelle de Hashin et Shtrikman discrétisée

Exemple 1 Lorsque le gradient de pression macroscopique est imposé et pour les choix de champs constants par pixels de force (2.39) avec $\lambda_1 = \alpha$ et de polarisation (2.38), la fonctionnelle de Hashin et Shtrikman (2.29) s'exprime à l'aide des opérateurs de Green discrets consistents présentés (B.37) et de la propriété (B.38) comme :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \alpha \cdot \mathbf{K} \cdot \alpha \leq \frac{1}{N} \sum_{\beta \in \mathcal{I}} \left[\frac{1}{2} \mathbf{f}_\beta(\lambda) \cdot (\mathbf{G}_0^c \otimes \mathbf{f}(\lambda))_\beta - \tau_\beta : (\mathcal{G}_0^c \otimes \mathbf{f}(\lambda))_\beta \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \tau_\beta : (\mathbf{\Gamma}_0^c \otimes \tau)_\beta + \frac{1}{2} (2\mu_\beta - 2\mu_0)^{-1} \tau_\beta : \tau_\beta \right], \end{aligned} \quad (2.41)$$

où la viscosité équivalente μ_β du pixel Ω_β est définie par la règle de moyenne :

$$(\mu_\beta - \mu_0)^{-1} = \overline{(\mu - \mu_0)^{-1}}^\beta. \quad (2.42)$$

Exemple 2 De même, lorsque la vitesse macroscopique est imposée et pour les choix de champs de force (2.40) et de polarisation (2.38), la fonctionnelle (2.29) s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \mathbf{V} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V} \leq -\mathbf{V} \cdot \sum_{p=1}^n \lambda_p - \frac{1}{N} \sum_{\beta \in \mathcal{I}} \left[\frac{1}{2} \mathbf{f}_\beta(\lambda) \cdot (\mathbf{G}_0^c \otimes \mathbf{f}(\lambda))_\beta - \tau_\beta : (\mathcal{G}_0^c \otimes \mathbf{f}(\lambda))_\beta \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \tau_\beta : (\mathbf{\Gamma}_0^c \otimes \tau)_\beta + \frac{1}{2} (2\mu_\beta - 2\mu_0)^{-1} \tau_\beta : \tau_\beta \right]. \end{aligned} \quad (2.43)$$

2.2.2 Optimisation

Exemple 1 Lorsque le gradient de pression imposé, l'étape d'optimisation par rapport aux multiplicateurs de Lagrange n'est pas nécessaire car ils sont connus à l'avance. Formellement, on note $[X]$ le vecteur des inconnues qui comporte les composantes de τ_β pour tous les voxels. L'optimisation de la fonctionnelle de Hashin et Shtrikman (2.43) (ou (2.41)) par rapport aux inconnues $[X] = (\tau_\beta)_{\beta \in \mathcal{I}}$ conduit à un système d'équations qui constituent une version discrétisée de l'équation de Lippman-Schwinger :

$$(\forall \beta \in \mathcal{I}), \quad (\mathbf{\Gamma}_0^c \otimes \tau)_\beta + (2\mu_\beta - 2\mu_0)^{-1} \tau_\beta = (\mathcal{G}_0^c \otimes \mathbf{f}(\lambda))_\beta. \quad (2.44)$$

Le membre de droite peut se mettre sous la forme d'un vecteur $[B]$ (organisé comme $[X]$) qui comprend toutes les composantes de $(\mathcal{G}_0^c * \mathbf{f}(\lambda))_\beta$ pour tous les voxels. Physiquement, ce membre de droite correspond à la moyenne sur chaque voxel du taux de déformation $\mathcal{G}_0^c * \mathbf{f}(\lambda)$ résultant de la force volumique $\mathbf{f}(\lambda)$ appliquée à la phase solide. La matrice $\{A\}$ associée au système linéaire (2.44) est symétrique et définie positive. L'idée proposée par Brisard et Dormieux [20] est de résoudre ce système $\{A\}[X] = [B]$ par un solveur itératif. Le gradient conjugué [4] est un solveur itératif particulièrement efficace pour inverser une matrice symétrique définie positive. L'avantage des solveurs itératifs est qu'ils ne nécessitent pas le stockage des coefficients de la matrice $\{A\}$, mais seulement une méthode pour calculer le produit matrice vecteur $\{A\}[X]$ pour n'importe quel vecteur $[X]$ donné.

Après optimisation du champ de polarisation, la valeur optimale de la borne (2.41) pour une discrétisation donnée est

$$\alpha \cdot \mathbf{K} \cdot \alpha \leq \frac{1}{N} \sum_{\beta \in \mathcal{I}} \mathbf{f}_\beta(\lambda) \cdot (\mathbf{G}_0^c \otimes \mathbf{f}(\lambda))_\beta - \tau_\beta^{\text{opt}} : (\mathcal{G}_0^c \otimes \mathbf{f}(\lambda))_\beta. \quad (2.45)$$

Par ailleurs, la moyenne sur un voxel Ω_β des champs de vitesse et de taux de déformation associés sont

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_\beta^{\text{opt}} &= (\mathcal{G}_0^c \otimes \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}))_\beta - (\boldsymbol{\Gamma}_0^c \otimes \boldsymbol{\tau}^{\text{opt}})_\beta, \\ \mathbf{v}_\beta^{\text{opt}} &= \bar{\mathbf{v}} + (\mathbf{G}_0^c \otimes \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}))_\beta + (\mathcal{H}_0^c \otimes \boldsymbol{\tau}^{\text{opt}})_\beta, \end{aligned} \quad (2.46)$$

où la valeur $\bar{\mathbf{v}}$ de la moyenne de la vitesse sur le VER est déterminée de sorte que la vitesse moyenne sur Ω_1 soit nulle. Dans la section 2.2.4, ces champs se révèlent de bonnes approximations des champs solutions du problème d'homogénéisation de la perméabilité. De plus, ils sont énergétiquement consistants au sens où, par utilisation de (2.46) et de la relation d'anti-symétrie entre \mathcal{G}_0 et \mathcal{H}_0 , la borne (2.45) se simplifie en :

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} \leq -\boldsymbol{\alpha} \cdot \frac{1}{N} \sum_{\beta \in \mathcal{I}} \mathbf{v}_\beta^{\text{opt}}. \quad (2.47)$$

Exemple 2 Dans le cas de l'exemple 2 avec vitesse imposée, la dérivation de la fonctionnelle de Hashin et Shtrikman (2.43) par rapport aux multiplicateurs $\boldsymbol{\lambda}_p$ ($p = 1, \dots, n$) des liaisons qui bloquent les translations conduit au système :

$$(\forall p \in \{1, \dots, n\}), \quad \frac{1}{f_p} \sum_{\beta \in \mathcal{I}_p} \mathbf{V} + (\mathbf{G}_0^c \otimes \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}))_\beta + (\mathcal{H}_0^c \otimes \boldsymbol{\tau})_\beta = \mathbf{0}, \quad (2.48)$$

c'est à dire que la moyenne de la vitesse sur chaque particule p est nulle. De même, la dérivation par rapport aux multiplicateurs $\boldsymbol{\lambda}_{p+n}$ ($p = 1, \dots, n$) des liaisons qui bloquent les rotations conduit au système :

$$(\forall p \in \{1, \dots, n\}), \quad \frac{1}{f_p} \sum_{\beta \in \mathcal{I}_p} (\mathbf{z}_\beta - \mathbf{z}_p) \wedge \left[(\mathbf{G}_0^c \otimes \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}))_\beta + (\mathcal{H}_0^c \otimes \boldsymbol{\tau})_\beta \right] = \mathbf{0}, \quad (2.49)$$

qui bloque effectivement les rotations de corps rigide. L'optimisation par rapport aux degrés de libertés du champ de polarisation conduit à l'équation de Lippman-Schwinger discrétisée (2.44). La différence principale avec l'exemple 1 est que le terme $(\mathcal{G}_0^c \otimes \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}))_\beta$ est transféré sur le membre de gauche, car les multiplicateurs de Lagrange ne sont pas connus a priori.

Ainsi, le vecteur des inconnues $[X]'$ est maintenant constitué de tous les degrés de libertés du champ de polarisation test, mais aussi des multiplicateurs de Lagrange $(\boldsymbol{\lambda}_p)_{p \in \{1, \dots, n\}}$ et $(\boldsymbol{\lambda}_{n+p})_{p \in \{1, \dots, n\}}$. Le vecteur du membre de droite $[B]'$ est nul partout, sauf pour les lignes en face des multiplicateurs $(\boldsymbol{\lambda}_p)_{p \in \{1, \dots, n\}}$ qui bloquent les translations, pour lequel le membre de droite prend la valeur $-N\mathbf{V}$.

La matrice $\{A\}'$ du système d'équations (2.44), (2.48) et (2.49) est une matrice par blocs qui reprend la matrice $\{A\}$ pour le bloc qui correspond au terme carré en polarisation. À l'aide des propriétés des opérateurs de Green, on peut montrer que la matrice $\{A\}'$, qui est pleine, est symétrique. Cependant, à la différence de $\{A\}$, la matrice $\{A\}'$ n'est pas définie positive. La résolution du système ne peut donc plus se faire par le gradient conjugué, mais par un solveur itératif capable de gérer les points selle. Le solveur SymmLQ [4] par exemple est adapté à cette situation. Le produit matrice vecteur est plus complexe dans l'exemple 1, mais suit la même logique. Son évaluation est décrite par le schéma Fig. 2.2.

2.2.3 Implémentation pratique

Exemple 1 Le système linéaire (2.44) peut se mettre sous la forme $\{A\}[X] = [B]$, où :

- Le vecteur $[X]$ contient toutes les degrés de libertés du champ de polarisation c'est-à-dire toutes les composantes du tenseur de polarisation pour l'ensemble des N voxels. En dimension 2, le vecteur $[X]$ contient $3N$ degrés de libertés et $6N$ en dimension 3. En dimension 2, il est organisé comme suit :

$$[X] = \{\tau_{0,11}, \tau_{0,22}, \sqrt{2}\tau_{0,12}, \dots, \tau_{\beta,11}, \tau_{\beta,22}, \sqrt{2}\tau_{\beta,12}, \dots, \tau_{N-1,11}, \tau_{N-1,22}, \sqrt{2}\tau_{N-1,12}\},$$

où la première partie de l'indice se réfère à la numérotation du voxel et la seconde partie aux composantes du tenseur dans la base cartésienne orthonormée.

- Le vecteur $[B]$ contient le taux de déformation $\mathcal{G}_0^c * \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda})$ discrétisé. En dimension 2, avec la notation simplifiée $\mathbf{d}_\beta^\lambda = (\mathcal{G}_0^c \otimes \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}))_\beta$:

$$[B] = \{d_{0,11}^\lambda, d_{0,22}^\lambda, \sqrt{2}d_{0,12}^\lambda, \dots, d_{\beta,11}^\lambda, d_{\beta,22}^\lambda, \sqrt{2}d_{\beta,12}^\lambda, \dots, d_{N-1,11}^\lambda, d_{N-1,22}^\lambda, \sqrt{2}d_{N-1,12}^\lambda\}.$$

Pour cet exemple 1, le taux de déformation discrétisé $\mathbf{d}_\beta^\lambda = (\mathcal{G}_0^c \otimes \mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda}))_\beta$ n'a besoin d'être calculé qu'une seule fois, à l'initiation du schéma itératif. Le calcul est effectué en suivant la procédure :

1. $\{\hat{\mathbf{f}}(\boldsymbol{\lambda})_{b\dots}\} = \text{FFT}(\{\mathbf{f}(\boldsymbol{\lambda})_{\beta\dots}\})$
2. $\forall \mathbf{b} \in \mathcal{I}, \hat{\mathbf{d}}_{\mathbf{b}}^\lambda = \left(\hat{\mathbf{G}}_0^c\right)_{\mathbf{b}} \cdot \hat{\mathbf{f}}(\boldsymbol{\lambda})_{\mathbf{b}}$
3. $\{\mathbf{d}_{\beta\dots}^\lambda\} = \text{FFT}^{-1}(\{\hat{\mathbf{d}}_{\mathbf{b}\dots}^\lambda\})$.

- La matrice $\{A\}$ qui correspond au système (2.44), dont les composantes ne sont pas stockées, opère sur le vecteur $[X]$ suivant :

1. $\{\hat{\boldsymbol{\tau}}_{\beta\dots}\} = \text{FFT}(\{\boldsymbol{\tau}_{\beta\dots}\})$
2. $\forall \mathbf{b} \in \mathcal{I}, \hat{\boldsymbol{\eta}}_{\mathbf{b}} = \left(\hat{\mathbf{\Gamma}}_0^c\right)_{\mathbf{b}} : \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\mathbf{b}}$
3. $\{\boldsymbol{\eta}_{\beta\dots}\} = \text{FFT}^{-1}(\{\hat{\boldsymbol{\eta}}_{\mathbf{b}\dots}\})$
4. $\forall \beta \in \mathcal{I}, (\{A\}[X])_\beta = \boldsymbol{\eta}_\beta + (2\mu_\beta - 2\mu_0)^{-1}\boldsymbol{\tau}_\beta$.

L'évaluation du produit $\{A\}[X]$ correspond à la colonne de gauche dans Fig. 2.2 (avec $\mathbf{f} = \mathbf{0}$).

En pratique, tous les calculs présentés dans ce mémoire ont été réalisés avec les opérateurs de Green discrétisés *filtrés, non consistants* (B.39) à la place des opérateurs *consistants* (B.37). Le biais ainsi introduit est minime [21], mais l'avantage est que les opérateurs de Green discrétisés filtrés non consistants peuvent être calculés au besoin plutôt que d'être stockés en mémoire. Un code de calcul a été implémenté en langage C¹, avec une parallélisation par la librairie OpenMP² et le calcul des FFT par l'efficace librairie FFTW³ [41] qui est elle aussi parallélisée.

2.2.4 Validation

La méthode FFT basée sur la discrétisation de la fonctionnelle de Hashin et Shtrikman a été implémentée en dimension 2 (déformations planes) et en dimension 3. Dans cette section, une validation de la méthode est proposée par comparaison avec des résultats issus de la littérature et de simulations réalisées avec le code de calcul par éléments finis Cast3M⁴. La partie validation est donc menée sur des géométries suffisamment simples pour être maillées sans difficultés.

¹Cette implémentation en C n'aurait pas pu voir le jour sans les premiers tests de la méthode sur la base d'un code en Java développé par Sébastien Brisard (IFSTTAR), initialement prévu pour l'homogénéisation en élasticité linéaire, mais suffisamment générique pour permettre les modifications nécessaires à sa transposition en perméabilité.

²<http://openmp.org/wp/>

³<http://www.fftw.org/>

⁴<http://www-cast3m.cea.fr/>

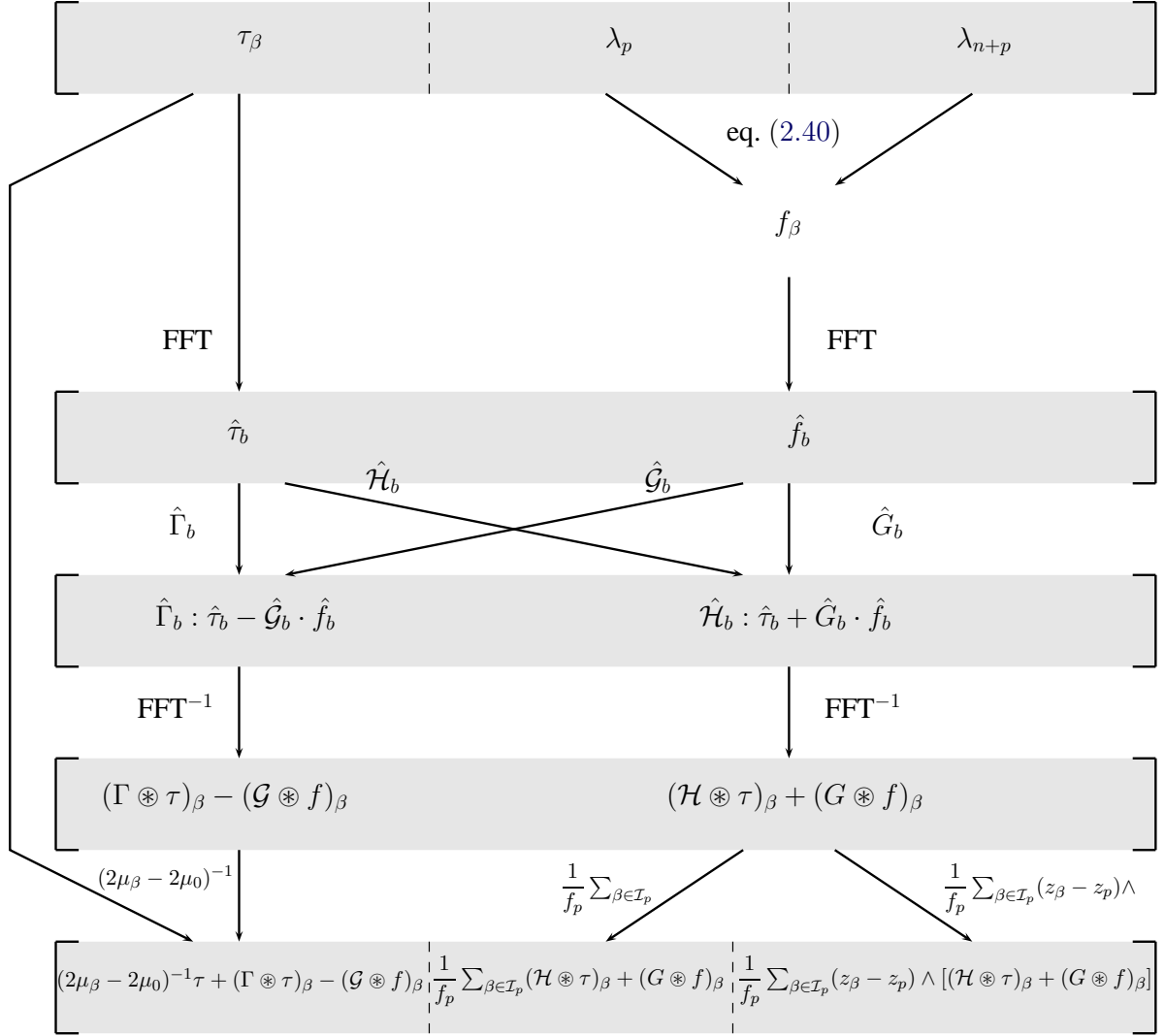


FIG. 2.2: Procédure de calcul du produit matrice vecteur dans l'exemple 2 avec multiplicateurs de Lagrange.

Écoulement plan autour d'une particule carrée ou circulaire

À titre de validation, les problèmes académiques d'un écoulement plan à travers un réseau périodique simple de carrés ou de disques est étudié numériquement. Les problèmes sont posés en déformations planes et les géométries des cellules de périodicité décrites Fig. 2.3.

Lorsque le gradient de pression ou la vitesse macroscopique sont colinéaires à l'un des côtés de la cellule de périodicité, la symétrie du problème implique l'absence de rotation de la particule solide. Ainsi, seule la translation du solide doit être bloquée : on se retrouve dans le cas de l'exemple 1. Il est donc judicieux de choisir d'imposer le gradient de pression macroscopique, de sorte que le multiplicateur de Lagrange est connu. Le problème d'optimisation se résume alors à l'inversion de la matrice symétrique définie positive $\{A\}$ qui correspond au système (2.44).

La viscosité du fluide est fixée à $\mu = 1$ et le gradient de pression macroscopique à $\alpha = e_1$, de sorte que les bornes obtenues correspondent à la composante K_{11} du tenseur de perméabilité intrinsèque.

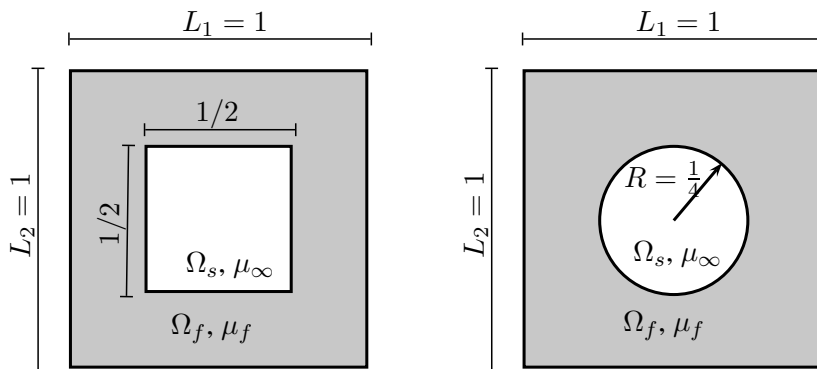


FIG. 2.3: Cellules de périodicité pour l'écoulement autour d'un réseau de carrés ou de disques.

Particule carrée Pour l'écoulement autour du carré, la viscosité du milieu de référence est choisie égale à la viscosité du fluide ($\mu_0 = \mu = 1$). En conséquence, seule la phase solide est polarisée. Numériquement, il est observé que ce choix fournit la meilleure borne pour une discrétisation donnée. Comme sera montré par la suite dans l'étude de l'écoulement autour d'un disque, ce résultat n'est valable que lorsque la phase solide est une union de voxels, de sorte que la valeur de μ_0 n'importe pas dans la règle de moyenne de la viscosité (2.42). Ce choix permet aussi de diminuer le nombre d'itérations du solveur gradient conjugué car l'espace de champ de polarisation exploré est réduit (le choix $\mu_0 = \mu$ implique $\tau_\beta = \mathbf{0}$ si $\Omega_\beta \subset \Omega_f$).

Les calculs de référence par éléments finis ont été réalisés avec un dallage régulier d'éléments quadrangulaires avec une interpolation quadratique Q8 de la vitesse⁵. Ainsi, la grille de discrétisation peut être comparée à celle utilisée pour la méthode FFT. De plus, le minimum de l'énergie potentielle (1.53) garantit le statut de borne inférieure sur K_{11} des résultats par éléments finis et une amélioration de la borne avec le raffinement du maillage.

Les résultats pour les bornes sur K_{11} dans le cas de la particule solide carrée sont présentés Fig. 2.4. Comme attendu d'après le cadre variationnel de Hashin et Shtrikman mis en place (2.33), la méthode FFT fournit des bornes supérieures sur la perméabilité, qui convergent vers la valeur exacte avec le raffinement de la grille de discrétisation. Remarquons que les erreurs sur la perméabilité pour la méthode FFT (3 d.d.l. par pixel en dimension 2) convergent aussi vite avec la discrétisation que pour la méthode des éléments finis avec des éléments Q8 (≈ 3 d.d.l. indépendants par élément en moyenne).

La Fig. 2.5 montre que les champs de vitesse locaux calculés par (2.46) fournissent de bonnes approximations des champs solutions, même lorsque la grille de discrétisation est grossière (16×16 pixels). Il en est de même pour les taux de déformations. Une observation attentive montre que pour la grille grossière, les vitesses locales calculées par la méthode FFT tendent à être surestimées dans la direction opposée du gradient de pression, ce qui est cohérent avec le statut de borne supérieure de la méthode. Par ailleurs, la vitesse dans la phase solide n'est pas exactement nulle localement, mais de plusieurs ordres de grandeur inférieure à la vitesse moyenne. Un raffinement de la grille de discrétisation permet d'abaisser encore cet ordre de grandeur de la vitesse dans la phase solide.

Particule circulaire L'écoulement autour de la particule circulaire est légèrement plus compliqué à traiter avec la méthode FFT. En effet, l'interface solide-fluide ne coïncide pas avec les frontières des pixels.

La première difficulté est donc qu'il faut invoquer la règle de moyenne de la viscosité (2.42).

⁵Dans ces calculs, la liaison d'incompressibilité n'est pas imposée rigoureusement par un lagrangien, mais en choisissant un module de compression élevé. Une étude de sensibilité montre que, pour cet exemple, un module de compression qui correspond à un coefficient de Poisson de 0,499 en élasticité linéaire est suffisant.

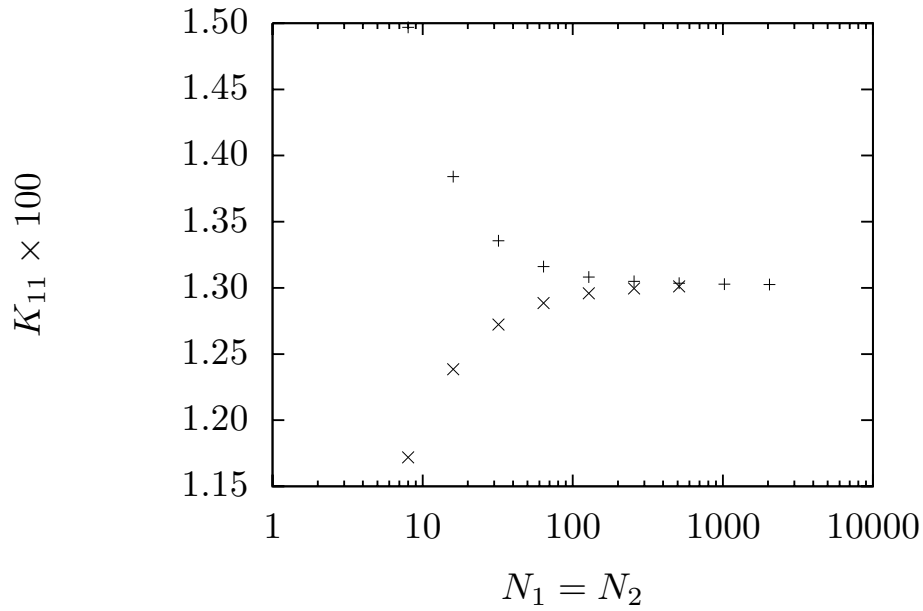


FIG. 2.4: Bornes sur la perméabilité pour la particule carrée : effet de la résolution. $N_1 = N_2$ est le nombre de pixels (méthode FFT, symbole +) ou d'éléments Q8 (éléments finis, symbole \times) dans chaque direction de la grille de discrétisation.

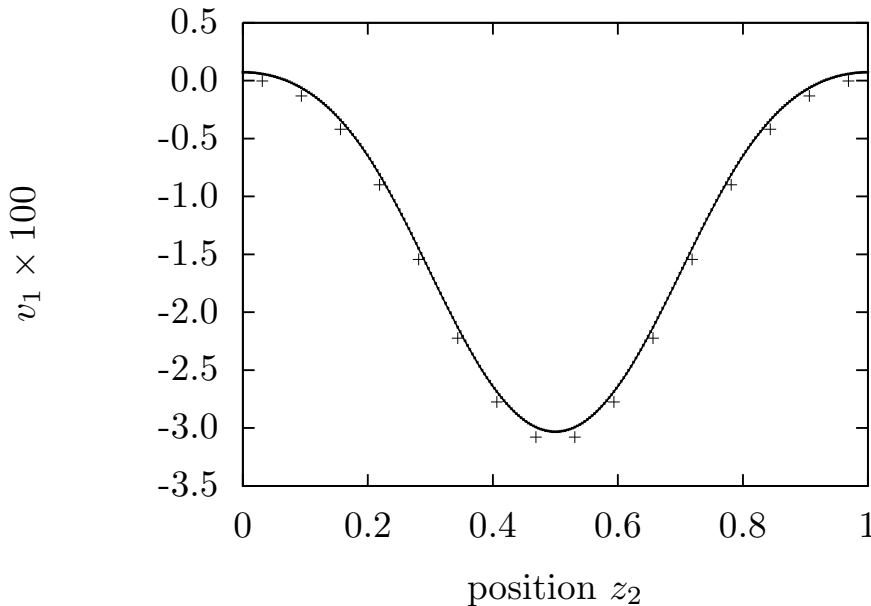


FIG. 2.5: Valeurs locales de la composante v_1 de la vitesse le long du côté droit de la cellule de périodicité Fig. 2.3 pour la particule carrée. La courbe de référence est constituée des déplacements nodaux obtenus par éléments finis sur une grille régulière 256×256 d'éléments Q8. Les vitesses moyennes par pixel obtenues par la méthode FFT sur une grille de 1024^2 pixels sont confondues avec les résultats par éléments finis. Celles obtenues pour une grille grossière de 16^2 pixels (symboles +) fournissent déjà une bonne approximation.

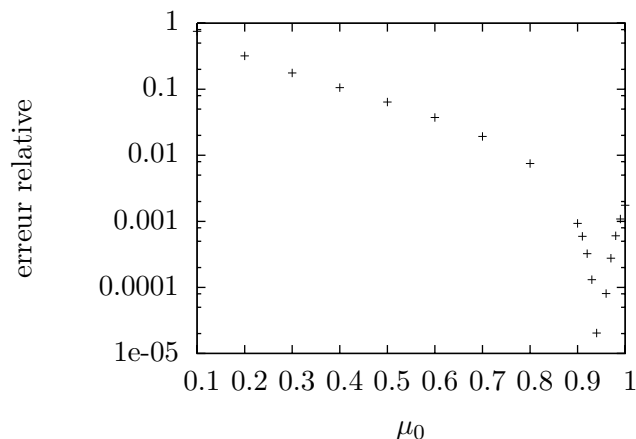


FIG. 2.6: Influence du choix de la viscosité de référence sur la borne sur K_{11} . La valeur de référence pour les erreurs relatives sur K_{11} est obtenue pour $\mu_0 = 0.95$.

Cette règle nécessite la connaissance de la fraction volumique de solide dans un pixel traversé par l'interface solide-fluide. Cette fraction volumique n'est pas facile à calculer directement pour la géométrie considérée ici. Pour simplifier, on propose de l'évaluer de manière approchée en pixélisant le disque sur une grille fine (ici 2048^2 pixels), puis d'effectuer les moyennes sur ce disque finement pixélisé pour calculer les fractions volumiques des pixels de la grille, plus grossière, qui sera utilisée pour le calcul de la perméabilité.

La deuxième difficulté est le choix de la viscosité du milieu de référence. En effet, si μ_0 est prise égale à la viscosité du fluide, alors la règle de moyenne dégénère : elle revient à affecter la viscosité du fluide à tout pixel composite traversé par l'interface solide-fluide. Autrement dit, la microstructure est pixélisée brutalement de façon restrictive, dans le sens d'une borne supérieure sur la perméabilité. D'un autre côté, choisir une viscosité de référence significativement trop faible par rapport à celle du fluide conduit à des bornes dégradées. Pour résumer, dans ce cas la viscosité de référence doit être choisie strictement inférieure à la viscosité du fluide pour tenter de capturer l'interface solide-fluide, mais pas trop loin pour ne pas dégrader la solution. Pour une discrétisation fixée de 128^2 pixels, l'influence de la viscosité de référence sur la perméabilité calculée est montrée Fig. 2.6. Dans cet exemple, la viscosité de référence la plus performante parmi celles testées est $\mu_0 = 0,95$. Remarquons qu'elle n'améliore pas significativement la borne par rapport au choix $\mu_0 = \mu_f = 1$, ce qui est peut être dû au faible pourcentage de pixels composites. Nous n'avons pas pu exhiber un argument théorique sur le choix optimal (en terme de borne sur la perméabilité) du milieu de référence. Enfin, un autre élément important dans le choix du milieu de référence est que la matrice $\{A\}$ à inverser est mal conditionnée lorsque la viscosité de référence est très proche des viscosités locales.

En définitive, il est observé numériquement que les bornes sur la perméabilité et les champs de vitesse locaux sont cohérents avec les calculs par éléments finis, comme pour la particule carrée.

Écoulement autour d'un réseau cubique de sphères

Pour valider la méthode pour un écoulement tridimensionnel, considérons la perméabilité d'un milieu composé d'un réseau cubique de particules sphériques. Dans un réseau cubique, la cellule de périodicité contient une seule sphère. La taille de la cellule de périodicité est prise égale à 1. Lorsque les sphères du réseau ont un diamètre inférieur à la cellule de périodicité, elles sont disjointes. Dans ce cas, la perméabilité a été établie dans le travail de référence de Sangani et Acrivos [87] et étudiée numériquement à l'aide de différentes méthodes par Jung et Torquato

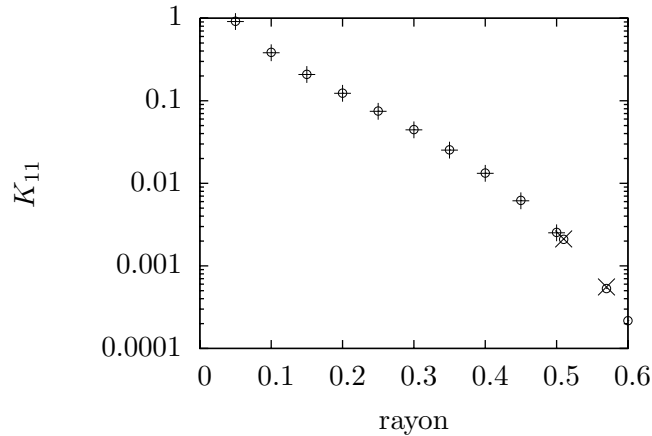


FIG. 2.7: Perméabilité du réseau cubique de sphères en fonction du rayon. Les calculs par la méthode FFT (\odot), menés sur une grille de 128^3 voxels, reproduisent bien les résultats de référence de Sangani et Acrivos [87] (+) et Tardif-d’Hamonville [95] (\times).

[53] et Wiegmann [105]. Lorsque les sphères ont un diamètre supérieur à la cellule de périodicité, elles s’interpénètrent et forment un squelette solide connecté. Cette situation a été étudiée par Tardif-d’Hamonville [95] à l’aide de la méthode des éléments finis, avec un traitement rigoureux de la liaison d’incompressibilité.

Pour la méthode FFT, lorsque l’écoulement macroscopique est aligné avec la cellule de périodicité, la symétrie du problème impose l’absence de rotation des particules même lorsque les sphères sont disjointes. Lorsqu’elles s’interpénètrent, les conditions de périodicité imposent l’absence de rotation de la phase solide quelque soit la direction de l’écoulement macroscopique. Dans les deux cas, comme pour les exemples en déformations planes, seule la translation de la phase solide doit être bloquée : on choisit donc d’imposer le gradient de pression, ce qui détermine les multiplicateurs de Lagrange.

Par ailleurs, afin d’estimer la fraction volumique de solide dans les pixels composites, la sphère est au préalable voxelisée sur une grille de 8192^3 voxels. La viscosité de référence est arbitrairement prise égale à trois quarts de la viscosité du fluide (la valeur optimale $\mu_0 = 95\% \mu_f$ établie dans le cas plan à la section précédente n’est a priori valable que pour cette microstructure particulière). Ensuite, les calculs sont menés sur des grilles de discrétisation de 64^3 et 128^3 voxels.

Les résultats sont comparés à ceux de la littérature Fig. 2.7. La méthode FFT produit des résultats précis sur toute la gamme de rayons de sphères testés. La précision des résultats par rapport aux travaux de référence de Sangani et Acrivos [87] est comparée Fig. 2.8 avec celles des méthodes numériques adoptées par Jung et Torquato [53] (différences finies) et Wiegmann [105] (méthode d’immersion des frontières). La méthode FFT semble produire une erreur inférieure aux autres méthodes pour une discrétisation faible. Cette vertu est attribuée à la prise en compte de l’hétérogénéité des voxels traversés par l’interface solide-fluide par l’intermédiaire de la règle de moyenne de la viscosité (2.42). Par ailleurs, la méthode FFT semble converger plus vite avec le raffinement de la discrétisation que la méthode proposée dans [105].

2.2.5 Application : sphéroïdes inter-pénétrables aléatoirement dispersés

La méthode FFT est maintenant appliquée à des matériaux poreux, simulés numériquement, supposés plus représentatifs d’un matériau granulaire que les exemples précédents. La phase solide est constituée de sphéroïdes (ellipsoïdes avec symétrie de révolution), disposés et orientés aléatoirement selon une loi isotrope. Les grains sphéroïdaux sont autorisés à s’inter-pénétrer afin de former un squelette solide. Au sein d’une réalisation, les sphéroïdes sont tous identiques pour

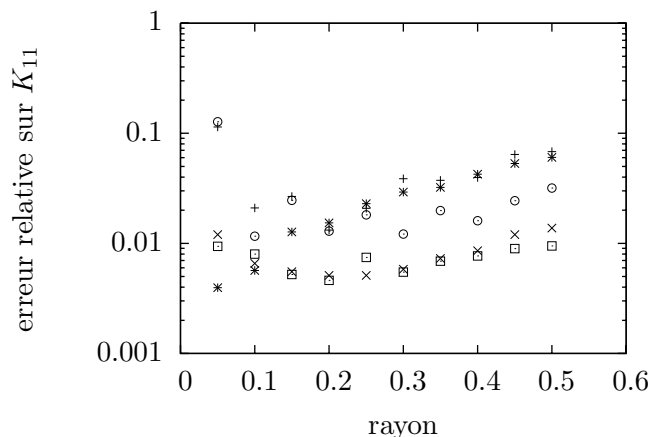


FIG. 2.8: Erreurs relatives sur la perméabilité d’un réseau cubique de sphères, par rapport aux résultats de référence de Sangani et Acrivos [87]. Comparaison des calculs par FFT sur une grille de 64^3 (\odot) ou 128^3 (\boxtimes), des résultats de Jung et Torquato [53] (*) et Wiegmann [105] sur une grille de 40^3 (+) ou 240^3 (\times).

simplifier l’étude paramétrique. Le matériau est périodique, c’est à dire qu’un grain qui intersecte la frontière du VER est continué par périodicité de l’autre côté du VER. Les réalisations de microstructures présentées dans cette section comprennent entre 100 et 600 grains. À la différence de la section de validation, les sphéroïdes sont “brutalement” voxelisés et la viscosité de référence est choisie égale à la viscosité du fluide. À l’aide du logiciel d’analyses d’images 3D ImageJ⁶, les connexités de la phase solide et de la phase fluide sont systématiquement vérifiées. De nouveau, seule la translation d’ensemble de la phase solide doit être bloquée, et on choisit donc d’imposer des gradients de pression pour ne pas devoir optimiser de multiplicateurs de Lagrange.

Un exemple de réalisation est illustré Fig. 2.9 pour des sphéroïdes prolates (allongés) avec un rapport d’aspect de 2. Cette réalisation, discrétisée sur une grille de 256^3 voxels, contient 200 sphéroïdes prolates de demi-grand axe 32 voxels et demi petit-axe 16 voxels. Au regard de la section de validation Fig. 2.8, la discrétisation est ainsi suffisamment fine pour obtenir une estimation de la perméabilité avec une erreur de l’ordre du pourcent. La porosité de la réalisation est de 44.1%. La composante v_1 du champ de vitesse optimal illustrée Fig. 2.9 correspond à un calcul avec une viscosité de fluide $\mu = 1$, un gradient de pression macroscopique imposé $\alpha = e_1$ et une taille physique de la cellule de périodicité égale à 1. Dans ce système d’unité, la borne sur K_{11} est 1.432×10^{-4} .

De tels calculs posent la question de la représentativité : les domaines simulés contiennent ils assez de grains ? En toute rigueur, pour répondre à cette question, une étude statistique sur de nombreuses réalisations devrait être menée pour une porosité fixée, avec des domaines de plusieurs tailles. À cause des limitations de mémoire vive des ordinateurs dont nous disposons (4Go), nous sommes restreints à des grilles de discrétisation de $\approx 300^3$ voxels. Si nous voulons garder la même finesse de discrétisation, ne pouvons malheureusement pas pousser l’étude sur des domaines de tailles beaucoup plus grandes que dans l’exemple ci-dessus.

En dépit de cette question, une étude systématique est menée pour estimer l’influence du rapport d’aspect des grains sur la perméabilité. Trois rapports d’aspects de sphéroïdes sont étudiés : 1 (sphère), 5 (prolate) et 1/5 (oblate). Pour comparer la perméabilité d’un milieu composé de sphères pénétrables à celle d’un milieu composé de sphéroïdes pénétrables, on décide que toutes les particules ont *le même volume*. Par ailleurs, toutes les valeurs des perméabilités présentées dans la suite sont normalisées par le carré du rayon des *sphères*. Les grilles de discrétisation sont

⁶imagej.nih.gov/ij/

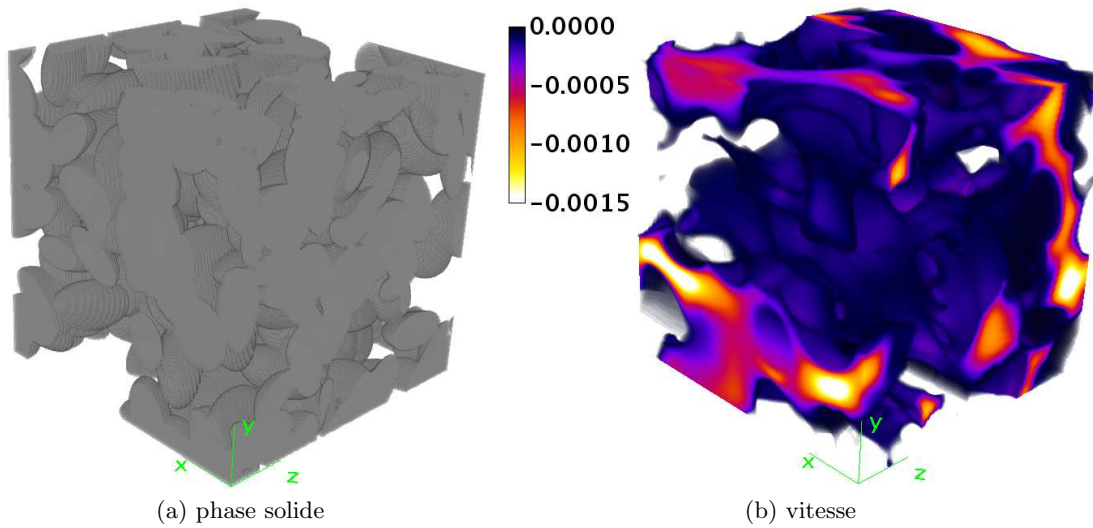


FIG. 2.9: Milieu granulaire de synthèse (a) La phase solide, en gris est composée de 200 prolates (rapport d'aspect 2). (b) Composante v_1 du champ de vitesse optimal pour une grille de 256^3 voxels. Les zones de très faible vitesse sont transparentes.

de 240^3 voxels, le rayon des sphères est d'environ 23,4 voxels, et la taille des oblates et prolates fixée afin que toutes ces particules aient le même volume.

Dans cette étude, 90 réalisations de milieux composés de sphères pénétrables ont été simulées : 10 réalisations de 200 sphères, 10 réalisations de 250 sphères, ..., 10 réalisations de 600 sphères. De même, 110 réalisations de milieux composés de sphéroïdes prolates (resp. oblates) avec un rapport d'aspect de 5 (resp. 1/5) ont été simulées : 10 réalisations de 100 prolates (resp. oblates), etc..., jusqu'à 600 grains. Pour chacune de ces 310 réalisations, trois calculs sont menés ($\alpha = e_1, e_2$ et e_3) pour déterminer le tenseur de perméabilité. Chaque calcul implique $240^3 \times 6 \approx 83.10^6$ degrés de liberté et environ 500 itérations avant d'atteindre le critère de convergence du solveur gradient conjugué.

Les résultats sont présentés Fig. 2.10. Pour chaque réalisation, on ne montre que la moyenne des termes diagonaux du tenseur de perméabilité. Si une tendance nette apparaît pour chacun des trois types de grains, les résultats montrent une dispersion relativement importante. Dans l'idéal, il aurait fallu simuler des domaines contenant plus de grains. Remarquons que pour l'homogénéisation de la perméabilité le VER doit être plus grand que pour l'homogénéisation des modules en élasticité linéaire. En effet, pour les mêmes réalisations, en attribuant un comportement élastique linéaire isotrope aux grains solides avec un module de compression $\kappa_s = 1$ et un coefficient de Poisson $\nu_s = 0,25$, les calculs par la méthode FFT présentée dans [20] montrent que le module de compression homogénéisé Fig. 2.11 présente une dispersion beaucoup plus faible. Une observation approfondie du champ de vitesse Fig. 2.9 montre que l'écoulement ne se fait que par très peu de passages préférentiels, ce qui peut expliquer la dispersion importante des résultats en perméabilité.

Les perméabilités présentées Fig. 2.10 suivent tout de même une tendance bien marquée. Pour le choix de correspondance entre la taille des sphéroïdes et des sphères qui est fait ici (même volume), les assemblages de sphères sont les plus perméables et les assemblages d'oblates les moins perméables. Ces calculs permettent aussi de montrer que les bornes établies au chapitre 1 pour les assemblages de sphères pénétrables surestiment très fortement (environ un ordre de grandeur) les résultats numériques. Ce fait est remarquable, car les bornes présentées au chapitre 1 comportent tout de même une information statistique riche (fonctions de corrélation à trois points). Au contraire, en élasticité linéaire, les fractions volumiques seules (fonctions

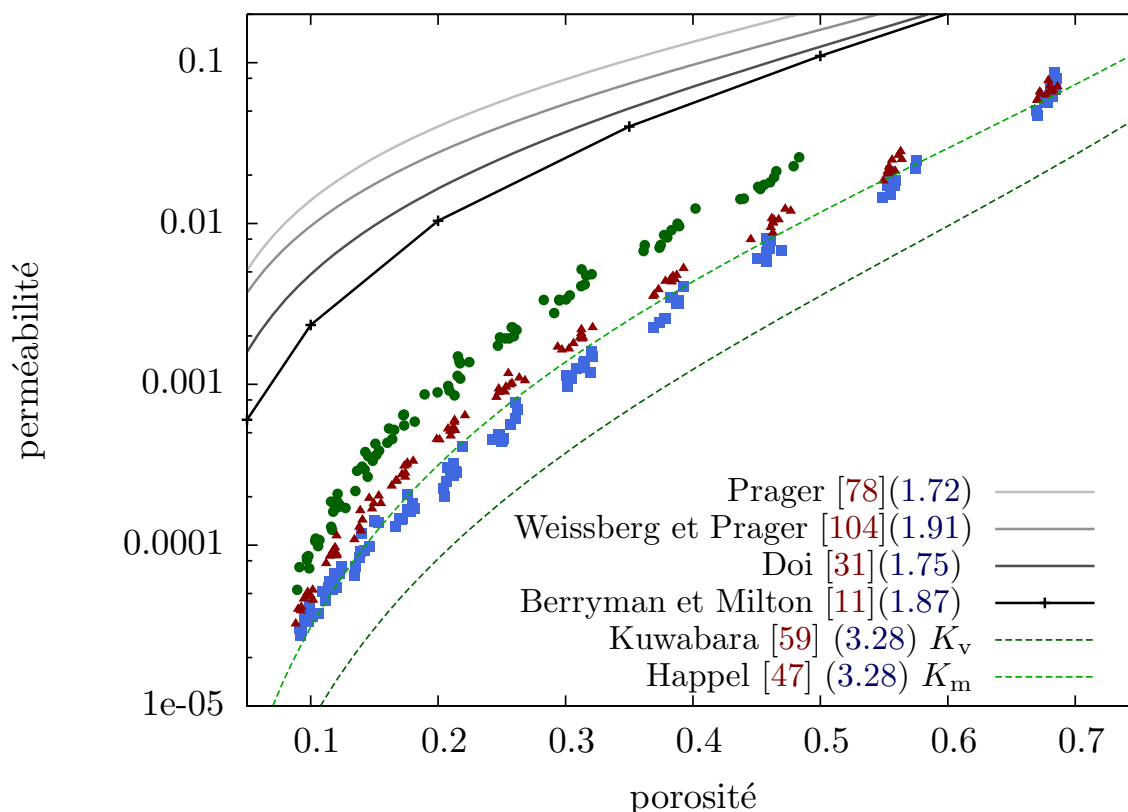


FIG. 2.10: Perméabilité intrinsèque de sphères ou sphéroïdes inter-pénétrables. Pour la méthode FFT ; ronds verts : sphères, triangles rouges : prolates avec rapport d'aspect 5, carrés bleus : oblates avec rapport d'aspect 1/5. Courbes grises : bornes supérieures pour des sphères inter-pénétrables. Courbes vertes : estimations pour des sphères non pénétrables. La perméabilité est normalisée par le carré du rayon des sphères, tous les grains ayant le même volume.

de corrélation à un point) permettent souvent d'attendre une précision de l'ordre de quelques pourcents.

Ces remarques illustrent un fait bien connu : la perméabilité est une grandeur physique beaucoup plus sensible à l'organisation de la microstructure que la raideur élastique.

À titre d'ouverture, remarquons Fig. 2.10 que les *estimations* proposées par Kuwabara [59] et Happel [47] pour la perméabilité d'un assemblage de sphères impénétrables (mais fixes) sont bien plus proches des résultats numériques que les bornes du chapitre 1. Partant de ce constat, le chapitre 3 a notamment pour but d'étendre ces estimations aux grains avec une orientation privilégiée.

Trois remarques pour conclure ce chapitre :

1 La méthode FFT de discrétisation et optimisation de la polarisation peut être déclinée pour le cadre variationnel simplifié (2.36). L'idée est la même : explorer les espaces de champs de force constants par voxels sur la phase solide et nuls sur la phase fluide. L'optimisation des degrés de liberté conduit alors à l'inversion d'une matrice symétrique mais non définie positive, qui correspond simplement à l'application de l'opérateur de Green d'ordre 2 (même dans le cas de multiples particules avec translation et rotation indépendantes!).

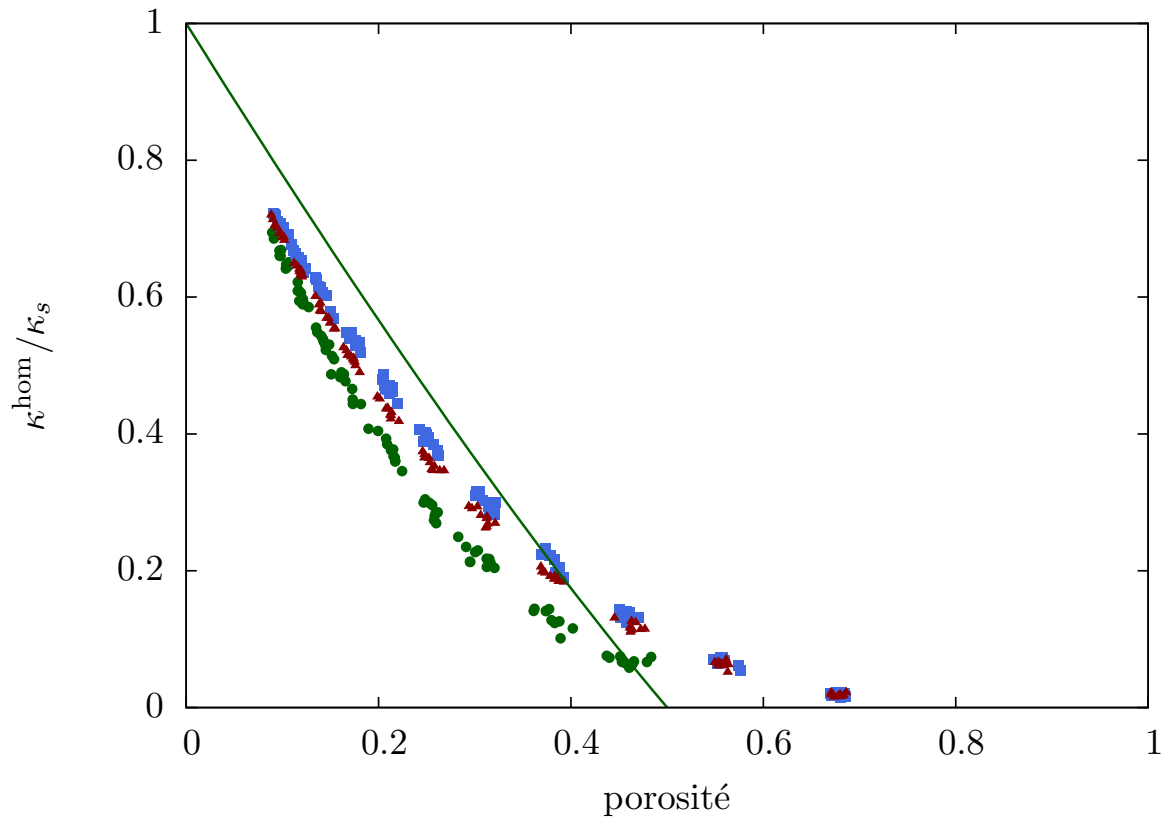


FIG. 2.11: Module élastique de compression homogénéisé κ^{hom} pour les réalisations dont la perméabilité est présentée Fig. 2.10. La phase solide est élastique linéaire isotrope avec un module de compression $\kappa_s = 1$ et un coefficient de Poisson $\nu_s = 0,25$. Pour la méthode FFT ; ronds verts : sphères, triangles rouges : prolates avec rapport d’aspect 5, carrés bleus : oblates avec rapport d’aspect 1/5. Courbes vertes : schéma auto-cohérent avec des sphères.

Une implémentation de cette méthode a été réalisée, très similaire à celle présentée ici et beaucoup plus simple en pratique. Les tests de cette méthode simplifiée ont montré qu’elle permet effectivement de donner des bornes sur la perméabilité, comparables bien que légèrement supérieures à celles obtenues par la méthode de polarisation. Chaque itération est plus rapide à calculer et le nombre de degrés de liberté réduit puisque l’on discrétise un champ de tenseur d’ordre 1 (la force) au lieu d’un champ de tenseur d’ordre 2 (la polarisation).

L’inconvénient de cette méthode simplifiée est que le système à inverser est mal conditionné et le nombre d’itérations pour converger 10 à 20 fois plus élevé que pour la méthode basée sur la polarisation. La raison fondamentale est que le champ de force optimal est singulier : il comporte une distribution de forces surfaciques à l’interface solide-fluide, qui ne peut pas bien être capturée par une discrétisation en champs constants par voxel. Numériquement, on observe ainsi une concentration du champ de force sur les voxels qui bordent l’interface solide fluide. Il est intéressant de remarquer que cette “distribution” de force surfacique n’est pas constante, contrairement au champ test (1.73) proposé par Doi [31] pour établir la borne (1.75). La méthode simplifiée peut donc être aussi vue comme une source d’inspiration pour chercher une nouvelle forme analytique de champ de force test.

2 Les applications potentielles du cadre variationnel de Hashin et Shtrikman (2.33) et (2.29) ne se cantonnent ni aux méthodes numériques, ni aux conditions aux limites périodiques. Tout comme dans le chapitre 1, on peut envisager de construire des bornes en utilisant des champs de force et de polarisation tests analytiques. Cependant, au regard des propriétés de (anti-)symétrie des opérateurs de Green d'ordre 3 et 4, on pressent que le champ de polarisation constant sur la phase solide optimum est ... nul.

3 Une des applications les plus intéressantes de la méthode FFT est son utilisation sur des microstructures voxelisées réelles obtenues par des techniques d'imagerie tridimensionnelle. Pour les géomatériaux à grains fins, les micro-tomographes actuels, qui ont une résolution de l'ordre de $0,25\mu\text{m}$, ne permettent pas de résoudre les pores. Les techniques d'imagerie par un microscope électronique à balayage couplé à des ablations par faisceau ionique (FIB/SEM) permettent de descendre à une résolution de 10nm. Avec cette résolution, les pores d'un calcaire à grains fins sont bien résolus [74] et ainsi qu'une fraction des pores dans les matériaux argileux (c.f. thèse de Yang Song, LML, 2014).

Outre l'obtention d'images de qualité, suffisamment résolues et convenablement alignées, plusieurs problèmes se posent. Comment segmenter la phase de pores ? Cette étape est bien souvent beaucoup plus complexe qu'un simple seuil sur le niveau de gris des images et requiert une véritable expertise. Ainsi, bien que disposant des images 3D brutes du réseau poreux de la craie de Haubourdin présentées dans [74], nous n'avons pas été en mesure de réaliser une segmentation satisfaisante. Par exemple, pour un plan de section donné, il est difficile de différencier la phase solide de la section en cours de la phase solide qui est vue par transparence à travers les pores, qui correspond à d'autres plans : une segmentation trop brutale aurait alors tendance à remplacer une partie du pore par du solide.

Enfin, lorsque la microstructure est prête à être utilisée par la méthode FFT, comment gérer les conditions aux limites ? En effet, la sensibilité aux conditions aux limites est beaucoup plus grande en perméabilité qu'en élasticité linéaire : une reproduction périodique de la microstructure qui, elle, ne l'est pas, peut complètement ou partiellement couper les passages préférentiels de circulation du fluide. Pour palier ce problème, avançons deux pistes. La première est d'ajouter une couche de fluide (d'épaisseur à déterminer) sur la face du domaine orthogonale au gradient de pression, à la manière d'un essai expérimental de mesure de perméabilité. La deuxième est de considérer une reproduction symétrique de la structure dans les 3 directions de l'espace et d'appliquer les conditions aux limites périodiques sur cette structure symétrisée. Il faudrait alors exploiter les propriétés de symétrie de l'écoulement et des transformées de Fourier pour ne pas devoir utiliser 2^3 fois plus de degrés de liberté, au prix d'une plus grande complexité de l'implémentation numérique.

* *

*

Chapitre 3

Estimations micromécaniques de la perméabilité

Résumé : *L'objet de ce chapitre est de proposer des estimations analytiques ou semi analytiques de la perméabilité d'un milieu poreux. Dans un premier temps, l'inadéquation des schémas d'homogénéisation classiques basés sur le problème d'Eshelby est soulignée. Dès lors, les estimations se basent sur la définition de cellules perméables équivalentes et leur utilisation dans un schéma auto-cohérent. La perméabilité équivalente est déterminée par la résolution d'un problème auxiliaire sur une cellule composée de solide et de fluide dans un domaine borné, dont la géométrie est adaptée au milieu poreux décrit. Une cellule à géométrie sphérique est d'abord présentée, avec prise en compte du glissement à l'interface solide-fluide. Ensuite, des géométries cylindriques à section elliptique ou sphéroïdales sont considérées pour tenter de capturer les effets d'anisotropie des grains solides. Des résolutions exactes (lorsque possible) et des encadrements par des méthodes énergétiques des problèmes auxiliaires sont établies à l'aide de diverses méthodes comme l'utilisation de la représentation de Papkovitch-Neuber combinée aux harmoniques en coordonnées sphéroïdales ou les transformations conformes du plan complexe et le développement en série entière des fonctions holomorphes. L'utilisation des cellules perméables équivalentes est enfin illustrée pour la modélisation de l'effet Klinkenberg et de la perméabilité relative.*

Sommaire

3.1	Schémas basés sur une inclusion dans un milieu infini	48
3.1.1	Schémas basés sur le problème d'Eshelby	48
3.1.2	Schémas basés sur l'écoulement de Stokes autour d'une particule	51
3.2	Cellules perméables équivalentes sphériques	53
3.2.1	Problème(s) auxiliaire(s)	53
3.2.2	Perméabilité équivalente du motif morphologique sphérique	54
3.3	Cellules équivalentes cylindriques de section elliptique	57
3.3.1	Description géométrique de la cellule équivalente	57
3.3.2	Représentation par les potentiels complexes	58
3.3.3	Exemple : écoulement entre deux cercles concentriques	59
3.3.4	Transformation conforme de Joukowski	60
3.3.5	Perméabilité de la cellule équivalente elliptique	61
3.4	Cellules équivalentes sphéroïdales	62
3.4.1	Description géométrique de la cellule équivalente	62
3.4.2	Écoulement axisymétrique	65
3.4.3	Écoulement tridimensionnel	68
3.4.4	Encadrements de la perméabilité équivalente	70

3.4.5	Discussion : effet des conditions aux limites	71
3.4.6	Perméabilité d'assemblages de grains anistropes inter-pénétrables	76
3.5	Estimations basées sur l'écoulement de Poiseuille	78
3.5.1	Écoulement de Poiseuille avec glissement aux parois	78
3.5.2	Définition d'une cellule perméable équivalente	79
3.6	Modélisation de l'effet Klinkenberg	80
3.6.1	Modèle basé sur l'écoulement de Poiseuille	80
3.6.2	Modèle basé sur les cellules perméables équivalentes sphériques	82
3.7	Perméabilité relative et pression de percée	83
3.7.1	Modèle basé sur l'écoulement de Poiseuille	84
3.7.2	Modèle basé sur les cellules perméables équivalentes sphéroïdales?	87

Au chapitre 2 ont été présentés un cadre variationnel et une méthode numérique pour l'homogénéisation de la perméabilité qui empruntent des concepts initialement introduits dans le cadre de l'homogénéisation de l'élasticité linéaire. Il est alors tentant de continuer à pousser l'analogie entre ces deux domaines pour établir des estimations micromécaniques analytiques de la perméabilité.

Cependant, l'homogénéisation de la perméabilité et celle de l'élasticité présentent des différences fondamentales. En élasticité linéaire, les *lois de comportement* ont la même nature aux échelles micro et macro : la loi de Hooke. Au contraire, pour la perméabilité, l'écoulement est décrit à l'échelle micro par les équations de Stokes ; tandis qu'à l'échelle macro il est décrit par la loi de Darcy. Par ailleurs, dans un problème d'homogénéisation les conditions aux limites cinématiques sont linéaires par rapport à la position ($\boldsymbol{\xi} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{z}$) en élasticité, alors qu'elle sont uniformes en vitesse ($\mathbf{v} = \mathbf{V}$) en perméabilité. De plus, pour la perméabilité les *conditions aux limites* sont de natures différentes aux deux échelles. À l'échelle microscopique, les conditions aux limites sur une surface sont imposables sur toutes les composantes du vecteur vitesse ou du vecteur contrainte $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$, tandis qu'à l'échelle macroscopique les conditions aux limites sont uniquement imposables sur la pression ou sur le flux $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$ de la vitesse. Enfin, l'écoulement micro fait intervenir une condition d'annulation de la vitesse ou de glissement à l'interface solide-fluide. L'homogénéisation de la perméabilité implique donc d'une part un *changement d'ordre tensoriel* dans les grandeurs reliées par les lois de comportement, d'autre part une *interversión du rôle des champs statiques et cinématiques*. Enfin, l'homogénéisation de la perméabilité fait intervenir un rapport de *tailles caractéristiques* : de par la condition d'adhérence, la taille caractéristique de fluctuation de la vitesse est la taille des pores, tandis celle de fluctuation du gradient de pression est gouvernée par la structure macroscopique de l'écoulement. Ainsi, la perméabilité varie avec le carré de la taille des pores, tandis que les modules élastiques ne font pas intervenir de taille caractéristique en l'absence d'effets d'interface.

Dès lors, certaines idées à la base des schémas d'homogénéisation classiques en élasticité (Hooke→Hooke) ou en perméabilité pure (Darcy→Darcy) ne sont plus appropriées pour l'homogénéisation Stokes→Darcy de la perméabilité. La section 3.1 illustre l'inadéquation d'une transposition directe des schémas d'homogénéisation basés sur le problème d'Eshelby. Une des raisons principales est que ce type de schéma basé sur la solution d'un problème avec conditions aux limites reportées à l'infini ne permet pas de rendre compte de la distance caractéristique de variation de la vitesse dans les pores. Or, tandis que les modules élastiques ne dépendent pas d'une taille caractéristique, la perméabilité y est très sensible comme mentionné ci dessus.

Pour tenir compte de la taille des pores, il faut alors définir un problème auxiliaire sur un motif morphologique qui décrit de manière simplifiée la géométrie à l'échelle d'un pore et/ou d'un grain de solide.

Suivant la forme des pores et des constituants de la phase solide, plusieurs motifs morphologiques sont étudiés dans ce chapitre. La section 3.2 propose une description basée sur un *grain solide* entouré d'une enveloppe concentrique de pore, de taille finie ajustée sur le rayon des pores. La section 3.3 se penche sur des grains en forme d'aiguilles décrits par un cylindre de section elliptique, entouré d'une enveloppe elliptique confocale de pore. La section 3.4 présente un motif morphologique constitué d'un grain solide sphéroïdal entouré d'une enveloppe sphéroïdale confocale de pore, afin de décrire des milieux granulaires dont les grains solides ont une orientation préférentielle. Enfin, la section 3.5 se base sur l'écoulement de Poiseuille pour décrire des *pores* plats (fissures, joints de grains, espace entre feuillettes) ou cylindriques (cf. idéalisation en porosimétrie mercure ou modèles d'adsorption BJH, BET, ...).

Pour appréhender ce chapitre avec une vision d'ensemble, il faut considérer que les sections 3.2, 3.3, 3.4 et 3.5 proposent un éventail de motifs morphologiques pour représenter des caractéristiques spécifiques des pores ou du solide. À partir de chacun de ces motifs morphologiques, une *cellule perméable équivalente* est définie. Chaque cellule perméable équivalente

est caractérisée une forme géométrique appropriée (sphère, ellipsoïde, plan, aiguille...) et par une perméabilité équivalente. Ces cellules perméables équivalentes constituent des briques élémentaires pour la construction de modèles micromécaniques d'estimation de la perméabilité d'un matériau. Par exemple, elles peuvent être intégrées dans les schémas d'homogénéisation classiques présentés dans la section 3.1.1.

3.1 Schémas basés sur une inclusion dans un milieu infini

3.1.1 Schémas basés sur le problème d'Eshelby

Bien que le coeur du chapitre soit consacré à l'estimation micromécanique de la perméabilité pour la transition d'un écoulement de Stokes à un écoulement de Darcy (Stokes \rightarrow Darcy), il est instructif de rappeler brièvement les schémas d'homogénéisation classiques pour un écoulement dans un milieu darcéen hétérogène (Darcy \rightarrow Darcy).

Homogénéisation de la loi de Darcy

Problème d'homogénéisation Le problème d'homogénéisation d'un milieu darcéen hétérogène peut se poser sur un VER Ω comme

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{v} &= 0 & (\Omega) \\ \mathbf{v} &= -\mathbf{K}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{grad} p & (\Omega) \\ p &= \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{z} & (\partial\Omega) \end{aligned} \quad (3.1)$$

Les conditions aux limites utilisées dans (3.1) sont appelées conditions aux limites homogènes en gradient de pression.

Règles de moyenne Deux résultats essentiels sont la règle de moyenne du gradient de pression et la règle de moyenne de la vitesse. Pour tout champ de pression p vérifiant les conditions aux limites homogènes en gradient de pression, le gradient de pression macroscopique $\boldsymbol{\alpha}$ est égal à la moyenne du gradient de pression local $\boldsymbol{\alpha} = \overline{\mathbf{grad} p}$ car :

$$\int_{\Omega} \mathbf{grad} p \, dV = \int_{\partial\Omega} p \mathbf{n} \, dS = \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{z}) \mathbf{n} \, dS = |\Omega| \boldsymbol{\alpha} \quad (3.2)$$

par utilisation du théorème de la divergence. À l'échelle macroscopique, la quantité duale (au sens de la puissance) du gradient de pression macroscopique $\boldsymbol{\alpha}$ est une vitesse macroscopique \mathbf{V} . Pour relier \mathbf{V} au champ de vitesse microscopique \mathbf{v} solution de (3.1), observons que la puissance de déformation dans Ω à l'échelle macroscopique $\mathcal{P} = |\Omega| \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{V}$ doit être égale à la puissance de déformation à l'échelle microscopique, soit

$$\mathcal{P} = \int_{\Omega} \mathbf{grad} p \cdot \mathbf{v} \, dV = - \int_{\Omega} p \operatorname{div} \mathbf{v} \, dV + \int_{\partial\Omega} p \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS = \boldsymbol{\alpha} \int_{\partial\Omega} (\mathbf{z} \otimes \mathbf{v}) \mathbf{n} \, dS = \boldsymbol{\alpha} \cdot \int_{\Omega} \mathbf{v} \, dV \quad (3.3)$$

par utilisation du théorème de la divergence et du caractère incompressible de l'écoulement. La confrontation de (3.3) avec la description macroscopique de la puissance dissipée permet de démontrer la règle de moyenne de la vitesse $\mathbf{V} = \overline{\mathbf{v}}$.

Perméabilité homogénéisée Par linéarité du problème (3.1), le champ de pression solution p et donc son gradient dépendent linéairement du chargement $\boldsymbol{\alpha}$. Il existe donc un champ de tenseurs d'ordre deux appelé tenseur de localisation et noté \mathbf{A} tel que $\mathbf{grad} p = \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\alpha}$. D'après la règle de moyenne du gradient de pression (3.2), la moyenne du tenseur de localisation est

l'identité : $\overline{\mathbf{A}} = \mathbf{I}$. La règle de moyenne de la vitesse permet en outre d'établir $\mathbf{V} = -\overline{\mathbf{K}} \cdot \overline{\mathbf{A}} \cdot \boldsymbol{\alpha}$. Or la perméabilité homogénéisée est définie comme le tenseur \mathbf{K}^{hom} qui relie la vitesse macroscopique $\mathbf{V} = \overline{\mathbf{v}}$ au gradient de pression macroscopique $\boldsymbol{\alpha} = \overline{\mathbf{grad} p}$ par $\mathbf{V} = -\mathbf{K}^{\text{hom}} \cdot \boldsymbol{\alpha}$. Par identification, la perméabilité homogénéisée se déduit du tenseur de localisation du gradient de pression par

$$\mathbf{K}^{\text{hom}} = \overline{\mathbf{K} \cdot \mathbf{A}} = \sum_{i=0}^n f_i \mathbf{K}^i \cdot \overline{\mathbf{A}}^i = \mathbf{K}^0 + \sum_{i=1}^n f_i (\mathbf{K}^i - \mathbf{K}^0) \cdot \overline{\mathbf{A}}^i \quad (3.4)$$

où les deux dernières égalités correspondent au cas d'un milieu hétérogène multiphasique où chaque phase i a une perméabilité homogène \mathbf{K}^i et occupe une fraction volumique f_i . La dernière égalité, qui fait utilisation de la règle de moyenne du gradient de pression $\mathbf{A} = \mathbf{1} = \sum_i f_i \mathbf{A}^i$, est utile dans le cas où la phase $i = 0$ joue le rôle particulier de matrice.

Estimations classiques de la perméabilité homogénéisée

Problème d'Eshelby Les schémas d'homogénéisation classiques proposent des estimations de la perméabilité homogénéisée \mathbf{K}^{hom} basées sur la solution du problème auxiliaire d'Eshelby.

Le problème auxiliaire d'Eshelby est défini sur un milieu infini constitué d'une matrice homogène de perméabilité \mathbf{K}^0 dans laquelle est plongée une inclusion ellipsoïdale I de perméabilité homogène \mathbf{K}^i . Le chargement est un gradient de pression macroscopique $\boldsymbol{\alpha}_0$ imposé à l'infini :

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{v} &= 0 & (\mathbb{R}^3) \\ \mathbf{v} &= -\mathbf{K}^0 \cdot \mathbf{grad} p & (\mathbb{R}^3 - I) \\ \mathbf{v} &= -\mathbf{K}^i \cdot \mathbf{grad} p & (I) \\ p &= \boldsymbol{\alpha}_0 \cdot \mathbf{z} & (|\mathbf{z}| \rightarrow \infty) \end{aligned} \quad (3.5)$$

Si l'inclusion I est ellipsoïdale, le gradient de pression dans l'inclusion est constant et se calcule à l'aide du tenseur de Hill \mathbf{P}_0^I correspondant à la géométrie de l'inclusion ellipsoïdale I et à la perméabilité \mathbf{K}^0 du milieu homogénéisé :

$$\mathbf{grad} p^I = [\mathbf{1} + \mathbf{P}_0^I \cdot (\mathbf{K}^i - \mathbf{K}^0)]^{-1} \cdot \boldsymbol{\alpha}_0 \quad (3.6)$$

Lorsque la perméabilité \mathbf{K}^0 est isotrope, c'est à dire $\mathbf{K}^0 = K^0 \mathbf{1}$, le tenseur d'Eshelby $\mathbf{S}_0^I = \mathbf{P}_0^I \cdot \mathbf{K}^0$ est indépendant de la perméabilité K^0 . Pour une inclusion I sphérique ou sphéroïdale (oblate ou prolate), le tenseur d'Eshelby se décompose en $\mathbf{S} = S_n \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + S_t (\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})$ [7], avec :

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^{\text{sph}} &= \frac{1}{3} \\ \mathbf{S}^{\text{pro}} &= \frac{-\sqrt{\omega^2 - 1} + \omega \operatorname{arccosh}(\omega)}{(\omega^2 - 1)^{3/2}} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + \frac{\omega(\omega\sqrt{\omega^2 - 1} - \operatorname{arccosh}(\omega))}{2(\omega^2 - 1)^{3/2}} (\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \\ \mathbf{S}^{\text{ob}} &= -\frac{-\sqrt{1 - \omega^2} + \omega \operatorname{arccos}(\omega)}{(1 - \omega^2)^{3/2}} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \frac{\omega(\omega\sqrt{1 - \omega^2} - \operatorname{arccos}(\omega))}{2(1 - \omega^2)^{3/2}} (\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \end{aligned} \quad (3.7)$$

où ω est le rapport d'aspect du sphéroïde ($\omega > 1$, prolate ; $\omega < 1$, oblate) et \mathbf{n} est le vecteur unitaire colinéaire à l'axe de révolution du sphéroïde.

Schéma dilué Lorsque le milieu hétérogène est constitué d'une matrice de perméabilité \mathbf{K}^0 et d'inclusions éloignées les unes des autres, l'idée est d'utiliser la règle de localisation (3.6) du

problème d'Eshelby avec $\alpha_0 = \alpha$ pour estimer les moyennes par phase inclusionnaire du tenseur de localisation qui interviennent dans (3.4) :

$$\mathbf{K}^{\text{hom}} \approx \mathbf{K}^{\text{dil}} = \mathbf{K}^0 + \sum_{i=1}^n f_i \delta \mathbf{K}^i \cdot [\mathbf{1} + \mathbf{P}_0^I \cdot \delta \mathbf{K}^i]^{-1}, \quad (3.8)$$

avec la notation $\delta \mathbf{K}^i = \mathbf{K}^i - \mathbf{K}^0$. L'utilisation du schéma dilué doit être restreinte aux très faibles fractions volumiques d'inclusions car le schéma dilué suppose l'absence d'interaction entre les inclusions.

Schéma de Mori-Tanaka Dans le cas d'un composite à matrice avec des concentrations d'inclusions non infinitésimales, l'interaction entre les inclusions peut être prise en compte d'une manière simplifiée. L'idée est de reprendre la règle de localisation du problème d'Eshelby avec des conditions aux limites modifiées : le gradient de pression auxiliaire α_0 appliqué à l'infini n'est plus choisi égal au gradient de pression macroscopique α mais est déterminé par la règle de moyenne du gradient de pression. Spécifiquement, le gradient de pression moyen dans la matrice est pris égal au gradient de pression auxiliaire α_0 , tandis que le gradient de pression moyen dans chaque phase inclusionnaire est déterminé par (3.6). La règle de moyenne du gradient de pression (3.2) impose alors la valeur du gradient de pression auxiliaire :

$$\alpha = f_0 \alpha_0 + \sum_{i=1}^n f_i [\mathbf{1} + \mathbf{P}_0^I \cdot \delta \mathbf{K}^i]^{-1} \cdot \alpha_0 \quad (3.9)$$

d'où l'on déduit

$$\alpha_0 = \left(f_0 \mathbf{I} + \sum_{i=1}^n f_i [\mathbf{1} + \mathbf{P}_0^I \cdot \delta \mathbf{K}^i]^{-1} \right)^{-1} \cdot \alpha = \left(\sum_{i=0}^n f_i [\mathbf{1} + \mathbf{P}_0^I \cdot \delta \mathbf{K}^i]^{-1} \right)^{-1} \cdot \alpha. \quad (3.10)$$

L'estimation de Mori-Tanaka de la perméabilité homogénéisée se déduit alors de (3.4) :

$$\mathbf{K}^{\text{hom}} \approx \mathbf{K}^{\text{mt}} = \left(\sum_{i=0}^n f_i \mathbf{K}^i \cdot [\mathbf{1} + \mathbf{P}_0^I \cdot \delta \mathbf{K}^i]^{-1} \right) \cdot \left(\sum_{i=0}^n f_i [\mathbf{1} + \mathbf{P}_0^I \cdot \delta \mathbf{K}^i]^{-1} \right)^{-1} \quad (3.11)$$

qui peut encore se réécrire plus généralement :

$$\mathbf{K}^{\text{mt}} = \overline{\mathbf{K} \cdot [\mathbf{1} + \mathbf{P}_0^I \cdot \delta \mathbf{K}]^{-1}} \cdot \left(\overline{[\mathbf{1} + \mathbf{P}_0^I \cdot \delta \mathbf{K}]^{-1}} \right)^{-1} \quad (3.12)$$

Schéma auto-cohérent Lorsque la microstructure est désordonnée, à la manière d'un polycristal, il n'y a plus lieu de privilégier une phase par rapport aux autres. Dans ce cas, le problème d'Eshelby est repris mais l'inclusion ellipsoïdale I est plongée dans un milieu infini qui possède les propriétés du milieu homogénéisé, a priori inconnues. La localisation du gradient de pression dans l'inclusion I fait alors intervenir le tenseur de Hill \mathbf{P}_{ac}^I de l'ellipsoïde I et de la perméabilité homogénéisée \mathbf{K}^{ac} . Comme dans le schéma de Mori-Tanaka, le gradient de pression appliqué à l'infini dans le problème d'Eshelby est un gradient de pression auxiliaire à déterminer par la règle de moyenne du gradient de pression. Finalement, un raisonnement similaire au schéma de Mori-Tanaka indique que la perméabilité homogénéisée \mathbf{K}^{ac} est solution de l'équation :

$$\mathbf{K}^{\text{ac}} = \overline{\mathbf{K} \cdot [\mathbf{1} + \mathbf{P}_{\text{ac}}^I \cdot \delta_{\text{ac}} \mathbf{K}]^{-1}} \cdot \left(\overline{[\mathbf{1} + \mathbf{P}_{\text{ac}}^I \cdot \delta_{\text{ac}} \mathbf{K}]^{-1}} \right)^{-1}, \quad (3.13)$$

où $\delta_{\text{ac}} \mathbf{K} = \mathbf{K} - \mathbf{K}^{\text{ac}}$. L'équation (3.13) peut se simplifier en :

$$\overline{\delta_{\text{ac}} \mathbf{K} \cdot [\mathbf{1} + \mathbf{P}_{\text{ac}}^I \cdot \delta_{\text{ac}} \mathbf{K}]^{-1}} = \mathbf{0} \quad (3.14)$$

3.1.2 Schémas basés sur l'écoulement de Stokes autour d'une particule

Revenons maintenant à la problématique au coeur de ce chapitre : l'établissement d'estimations pour la transition d'un écoulement décrit par les équations de Stokes à un écoulement décrit par la loi de Darcy. Cette section a pour but de détailler les écueils rencontrés lorsque l'on essaye d'effectuer un parallélisme direct avec les schémas d'homogénéisation classiques présentés dans la section 3.1.1.

Écoulement autour d'une particule plongée dans un milieu visqueux infini

Considérons un problème auxiliaire qui se veut l'analogue du problème auxiliaire d'Eshelby (3.5). Soit I une particule solide fixée, plongée dans un fluide newtonien qui suit un écoulement uniforme avec une vitesse \mathbf{V}_0 à l'infini. Le problème de Stokes est défini comme :

$$\begin{aligned}
\operatorname{div} \mathbf{v} &= 0 & (\mathbb{R}^3 - I) \\
\mathbf{v} &= \mathbf{0} & (\partial I) \\
\mathbf{d} &= \operatorname{grad}^s \mathbf{v} & (\mathbb{R}^3 - I) \\
\boldsymbol{\sigma} &= -p\mathbf{1} + 2\mu\mathbf{d} & (\mathbb{R}^3 - I) \\
\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} &= -\operatorname{grad} p + \mu\Delta \mathbf{v} = \mathbf{0} & (\mathbb{R}^3 - I) \\
\mathbf{v} &= \mathbf{V}_0 & (|z| \rightarrow \infty)
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Lorsque I est une sphère de rayon R , la solution de (3.15) est classique. La force de traînée exercée par le fluide sur la particule solide sphérique est $\mathbf{F}^I = 6\pi\mu R\mathbf{V}_0$.

Une première critique de ce modèle est que le champ de vitesse solution croît très lentement du 0 de la condition d'adhérence V , avec un comportement asymptotique en $1/r$. Le problème auxiliaire n'est donc pas vraiment représentatif de l'écoulement dans un pore où la vitesse varie brusquement, à l'échelle du pore. De plus, sa transposition pour un écoulement plan autour d'un disque n'admet pas de solution (solution de raccord avec effets d'inertie à l'infini)

Lorsque I est un sphéroïde de distance focale c , de rapport d'aspect ω et d'axe de révolution orienté par le vecteur unitaire \mathbf{n} , la force de traînée est [24] :

$$\mathbf{F}^I = 6\pi\mu c [D_n \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + D_t (\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})] \cdot \mathbf{V}_0 \tag{3.16}$$

où, si le sphéroïde est prolate, avec $\tau = \omega/\sqrt{\omega^2 - 1}$ et "arcoth" l'argument cotangente hyperbolique :

$$\begin{aligned}
D_n^{\text{pro}}(\tau) &= \frac{4}{3} (-\tau + (1 + \tau^2)\operatorname{arcoth}(\tau))^{-1} \\
D_t^{\text{pro}}(\tau) &= \frac{8}{3} (\tau + (3 - \tau^2)\operatorname{arcoth}(\tau))^{-1}
\end{aligned} \tag{3.17}$$

et si le sphéroïde est oblate, avec $\lambda = \omega/\sqrt{\omega^2 + 1}$ et "arcotan" l'argument cotangente :

$$\begin{aligned}
D_n^{\text{ob}}(\lambda) &= \frac{4}{3} (\lambda + (1 - \lambda^2)\operatorname{arcotan}(\lambda))^{-1} \\
D_t^{\text{ob}}(\lambda) &= \frac{8}{3} (-\lambda + (3 + \lambda^2)\operatorname{arcotan}(\lambda))^{-1}
\end{aligned} \tag{3.18}$$

D'une manière générale, par linéarité du problème (3.15), il existe un tenseur d'ordre deux \mathbf{L}^I tel que $\mathbf{F}^I = |I|\mu\mathbf{L}^I \cdot \mathbf{V}_0$.

Un schéma dilué

Considérons un milieu (fictif) composé de particules solides fixes très éloignées les unes des autres. Suivant (1.27), notons \mathbf{f} le champ de force volumique constant sur chaque inclusion et nul sur la phase fluide qui permet d'équilibrer la force de traînée exercée par le fluide sur le solide. D'après (1.27), la moyenne $\overline{\mathbf{f}}$ est alors égale au gradient de pression macroscopique. Sous réserve que les particules solides soient suffisamment éloignées les unes des autres pour ne pas interagir, le champ de force volumique \mathbf{f} peut être approché à partir de la solution du problème (3.15) par $-\mathbf{F}^I/|I|$ sur chaque inclusion I , avec $\mathbf{V}_0 = \mathbf{V}$ dans la limite diluée. La moyenne de ce champ de force volumique approché permet d'estimer le gradient de pression macroscopique :

$$\boldsymbol{\alpha} \approx -\overline{\sum_I \mathbf{F}^I \chi_I / |I|} = -\mu \overline{\sum_I \mathbf{L}^I \chi_I} \cdot \mathbf{V} \quad (3.19)$$

d'où l'estimation diluée de la perméabilité

$$\mathbf{K}^{\text{dil}} = \left(\mu \overline{\sum_I \mathbf{L}^I \chi_I} \right)^{-1}. \quad (3.20)$$

Par exemple, lorsque toutes les particules sont des sphères de rayon identique R , la perméabilité se comporte dans la limite diluée $\phi \rightarrow 1$ comme :

$$\mathbf{K}^{\text{dil}} = \frac{2}{9} \frac{1}{1-\phi} \frac{R^2}{\mu} \mathbf{1} \quad (3.21)$$

Remarquons qu'en dehors de la situation diluée, cette approximation est tout à fait inappropriée car elle ne s'annule pas lorsque la porosité est nulle.

Un schéma inspiré du schéma de Mori-Tanaka

Pour tenter de prendre en compte l'interaction entre les particules lorsque la fraction volumique de solide n'est pas infinitésimale, procédons comme dans le schéma de Mori-Tanaka. Le choix de \mathbf{V}_0 est maintenant guidé par la règle de moyenne de la vitesse. La moyenne de la vitesse dans le fluide est prise égale à \mathbf{V}_0 . La nullité de la vitesse dans le solide entraîne alors $\phi \mathbf{V}_0 = \mathbf{V}$ par la règle de moyenne de la vitesse. Procédant alors comme pour le schéma dilué, il vient finalement :

$$\mathbf{K}^{\text{mt}} = \phi \mathbf{K}^{\text{dil}} \quad (3.22)$$

qui présente le même comportement asymptotique que l'estimation diluée lorsque $\phi \rightarrow 1$, et qui s'annule bien lorsque la porosité est nulle. Dans le cas de sphères de rayon R , l'estimation (3.22) devient :

$$\mathbf{K}^{\text{mt}} = \frac{2}{9} \frac{\phi}{1-\phi} \frac{R^2}{\mu} \mathbf{1} \quad (3.23)$$

Cette expression est facilement comparable à la borne supérieure (1.91) proposée par Weissberg et Prager [104] K^{wp} : leur ratio est $K^{\text{mt}}/K^{\text{wp}} = -\ln(\phi)/(1-\phi)$. Lorsque la porosité tend vers 1, les deux valeurs convergent bien vers la limite diluée K^{dil} (3.21). Cependant, pour les faibles valeurs de porosité, $K^{\text{mt}} \gg K^{\text{wp}}$ bien que les résultats Fig. 1.2 montrent que K^{wp} surestime alors la perméabilité de plusieurs ordres de grandeur !

Le seul domaine de validité de (3.22) est donc les très fortes porosités. En utilisant (3.16), la perméabilité d'un assemblage de sphéroïdes identiques fixes orientés aléatoirement avec une loi isotrope se comporte asymptotiquement lorsque $\phi \rightarrow 1$ comme :

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\text{pro}}^{\text{mt}} &= \frac{3\tau(\tau^2 - 1)}{D_n^{\text{pro}}(\tau) + 2D_t^{\text{pro}}(\tau)} \frac{2}{9} \frac{\phi}{1-\phi} \frac{c^2}{\mu} \mathbf{1} \\ \mathbf{K}_{\text{ob}}^{\text{mt}} &= \frac{3\lambda(\lambda^2 + 1)}{D_n^{\text{ob}}(\lambda) + 2D_t^{\text{ob}}(\lambda)} \frac{2}{9} \frac{\phi}{1-\phi} \frac{c^2}{\mu} \mathbf{1} \end{aligned} \quad (3.24)$$

Un schéma auto-cohérent ?

Comment construire un schéma qui s’inspire du schéma auto-cohérent ? Faut-il remplacer la viscosité μ dans (3.15) par une “viscosité homogène” pour rendre compte de l’effet du reste de la phase solide sur l’écoulement autour de la particule solide I ? Le raisonnement se heurte directement à la différence de nature entre les lois de comportement aux échelles micro et macro.

Cette section illustre bien la difficulté de construire des estimations fiables de la perméabilité à partir de la définition d’un problème auxiliaire avec conditions aux limites reportées à l’infini. Fondamentalement, ces estimations ne permettent pas de rendre compte du caractère confiné de l’écoulement, où la vitesse s’annule avec une longueur caractéristique gouvernée par la taille des pores.

3.2 Cellules perméables équivalentes sphériques

Cette section introduit le concept de cellule perméable équivalente dans le cas d’une géométrie sphérique. L’idée consiste à affecter une perméabilité homogène à un domaine borné qui comprend une phase fluide et une phase solide dont l’agencement est suffisamment simple pour permettre la résolution d’un problème d’écoulement régi par les équations de Stokes, appelé problème auxiliaire.

3.2.1 Problème(s) auxiliaire(s)

Le problème auxiliaire est défini à l’intérieur d’un domaine Ω borné. La cellule perméable équivalente possède la même géométrie que le domaine Ω et sera affectée d’une perméabilité équivalente homogène. Pour le problème auxiliaire, on considère une particule solide immobile \mathcal{P} strictement incluse dans Ω . Dans l’espace $\Omega \setminus \mathcal{P}$ s’écoule un fluide newtonien de viscosité μ . L’écoulement est supposé incompressible et en $\partial\mathcal{P}$ la vitesse soumise soit à la condition de glissement (1.92) soit à la condition d’adhérence, suivant le type de fluide.

Du fait de la taille finie du domaine Ω , le type de conditions aux limites appliquées en $\partial\Omega$ est d’une importance cruciale. La transposition directe de (3.15) au milieu fini suggère d’imposer une vitesse uniforme $\mathbf{v} = \mathbf{V}$ sur $\partial\Omega$. Ce choix proposé par Kuwabara [59] correspond aux conditions aux limites uniformes en vitesse (1.32). Une alternative est d’imposer que seul le flux de la vitesse à travers $\partial\Omega$ corresponde au flux d’une vitesse uniforme ($\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{n}$), tandis que les contraintes visqueuses tangentielles s’annulent sur $\partial\Omega$. Ce choix proposé par Happel [47] correspond aux conditions aux limites mixtes (1.34). Par ailleurs, certains auteurs (par ex. [96]) ont proposé d’imposer que la vorticit   $\text{rot}\mathbf{v}$ s’annule sur $\partial\Omega$. Dans tous ces choix, le chargement est une vitesse impos  e \mathbf{V} .

Suivant l’argumentaire d  velopp   dans [18], on se concentre sur les conditions uniformes en vitesse (1.32) et les conditions mixtes (1.34). Les avantages de ces deux choix sont multiples. Tout d’abord, la condition d’incompressibilit   entra  ne que la moyenne de la vitesse dans la cellule Ω est directement $\bar{\mathbf{v}} = \mathbf{V}$. Par ailleurs, le gradient de pression effectif pour la cellule est d  fini sans ambigu  t   par (1.41) comme la force de train  e exerc  e par le fluide sur le solide, normalis  e par le volume de la cellule. Enfin, ces choix v  rifient la condition (1.29) qui permet de garantir le lemme de Hill (1.48) pour la cellule Ω , o   les champs admissibles sont d  finis par (1.33) ou (1.35) (   l’exception de la condition d’adh  rence en cas de glissement aux parois). Cette propri  t   est essentielle puisqu’elle garantit l’  quivalence entre les d  finitions   nerg  tique et directe de la perm  abilit     quivalente de la cellule.

Pour r  sumer, deux probl  mes auxiliaires sont d  finis, un pour chaque type de conditions

aux limites :

$$\begin{aligned}
\operatorname{div} \mathbf{v} &= 0 & (\Omega \setminus \mathcal{P}) \\
\mathbf{d} &= \operatorname{grad}^s \mathbf{v} & (\Omega \setminus \mathcal{P}) \\
\boldsymbol{\sigma} &= -p\mathbf{1} + 2\mu\mathbf{d} & (\Omega \setminus \mathcal{P}) \\
\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} &= -\operatorname{grad} p + \mu\Delta\mathbf{v} = \mathbf{0} & (\Omega \setminus \mathcal{P}) \\
\llbracket \mathbf{v} \rrbracket &= \frac{\zeta}{\mu} (\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} & (\partial\mathcal{P}) \\
\text{conditions aux limites} & \text{ (1.32) ou (1.34)} & (\partial\Omega)
\end{aligned} \tag{3.25}$$

La perméabilité de la cellule perméable équivalente est définie comme le tenseur \mathbf{K} tel que :

$$\mathbf{V} = -\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha} \text{ avec } \boldsymbol{\alpha} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\mathcal{P}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_{f \rightarrow s} \, dS \tag{3.26}$$

Comme évoqué ci-dessus, cette définition directe est équivalente à la définition énergétique :

$$\frac{1}{2} \mathbf{V} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{V} |\Omega| = \frac{1}{2} \int_{\Omega \setminus \mathcal{P}} 2\mu \mathbf{d}(\mathbf{v}) : \mathbf{d}(\mathbf{v}) \, dV + \frac{1}{2} \int_{\partial\mathcal{P}} \frac{\mu}{\zeta} \llbracket \mathbf{v}_t \rrbracket \cdot \llbracket \mathbf{v}_t \rrbracket \, dS \tag{3.27}$$

où \mathbf{v} est le champ de vitesse solution du problème auxiliaire (3.25) et \mathbf{v}_t la partie tangentielle de \mathbf{v} le long de l'interface solide-fluide. La définition énergétique (3.27) stipule que la puissance dissipée par la cellule perméable équivalente, dans sa description par la loi de Darcy, est égale à la puissance dissipée par la solution du problème auxiliaire (3.25) d'écoulement d'un fluide newtonien.

Plus généralement, les théorèmes du minimum de l'énergie potentielle (1.51) et complémentaire (1.58) s'appliquent (sous réserve de remplacer la puissance du taux de déformation (resp. des contraintes) par (1.98) (resp. (1.99)) en cas de glissement aux parois).

Le choix de conditions aux limites uniformes en vitesse ou mixtes va conduire à deux estimations différentes de la perméabilité de la cellule équivalente : \mathbf{K}_v et \mathbf{K}_m respectivement. Remarquons que le champ de vitesse \mathbf{v}_v solution du problème auxiliaire avec conditions aux limites uniformes en vitesse est cinématiquement admissible pour le problème avec conditions aux limites mixtes. D'après le théorème du minimum de l'énergie potentielle, la puissance visqueuse dissipée par \mathbf{v}_v est donc supérieure à celle dissipée par la solution du problème auxiliaire avec conditions aux limites mixtes. Par conséquent, on peut affirmer que la perméabilité \mathbf{K}_v est systématiquement inférieure à \mathbf{K}_m au sens des formes quadratiques.

3.2.2 Perméabilité équivalente du motif morphologique sphérique

Dans la suite de cette section, le domaine Ω est une sphère de rayon R_{ext} . La particule solide est une sphère de rayon $R = XR_{\text{ext}}$ concentrique avec Ω , où X varie entre 0 et 1. La fraction volumique de solide de la cellule est $\rho = X^3$. Ce modèle morphologique de base cherche à rendre compte localement, à l'échelle d'un grain, de l'écoulement dans un matériau constitué de grains sans orientation préférentielle. Cependant, la géométrie proposée est critiquable car elle passe à côté du caractère connexe de la phase solide.

Sans glissement aux parois

Lorsque le fluide suit la condition d'adhérence à l'interface solide-fluide, la perméabilité de la cellule équivalente sphérique a déjà été établie dans Boutin [18] :

$$\begin{aligned}
\frac{\mu}{R^2} K_v &= \frac{(1-X)^3(4+7X+4X^2)}{18X^3(1+X+X^2+X^3+X^4)}, \\
\frac{\mu}{R^2} K_m &= \frac{(1-X)^3(1+X)(2+X+2X^2)}{3X^3(3+2X^5)},
\end{aligned} \tag{3.28}$$

où $R = XR_{\text{ext}}$ est le rayon de la particule solide. Dans la limite où X tend vers 1, l'épaisseur h de la couronne de fluide tend vers 0 en $(1 - X)R$. Un développement limité au premier ordre des perméabilités équivalentes (3.28) en $h = 0$ montre que :

$$\frac{\mu}{h^2}K_v = \frac{2}{3} \frac{h}{R} + o\left(\frac{h}{R}\right) \quad ; \quad \frac{\mu}{h^2}K_m = \frac{1}{6} \frac{h}{R} + o\left(\frac{h}{R}\right). \quad (3.29)$$

Le développement limité de K_m coïncide avec la perméabilité équivalente d'une sphère perméable composite plongée dans un milieu perméable infini proposée dans [33]. La sphère perméable composite est constituée d'un noyau imperméable entouré d'une interface perméable, dont la perméabilité est ajustée sur l'écoulement de Poiseuille entre deux plans. Le développement limité de K_m correspond au cas où h est la moitié de la distance entre les deux plans, tandis que celui de K_v correspond à h égal à la distance entre les deux plans. Cette dernière remarque lève un doute sur la pertinence des conditions aux limites uniformes en vitesse lorsque la fraction volumique de solide de la cellule équivalente est élevée ¹.

Pour comparer ces perméabilités équivalentes avec les estimations de la section 3.1.2, les calculs numériques du chapitre 2 et les bornes du chapitre 1, il est intéressant d'ajuster la taille de la sphère extérieure sur la porosité en posant $\rho = X^3 = 1 - \phi$. Dans la limite des fortes porosités (X ou $\rho \rightarrow 0$), les deux perméabilités équivalentes (3.28) coïncident avec la limite diluée (3.21) de la section 3.1.2 : l'effet des conditions aux limites, repoussées à l'infini, ne se fait plus sentir. Par contre, plus la porosité diminue, plus les approches divergent. Dans la limite des très faibles porosités ($\rho \rightarrow 1$), les conditions aux limites mixtes conduisent à une perméabilité 4 fois plus élevée que celles uniformes en vitesse.

Une comparaison des perméabilités équivalentes (3.28) avec la perméabilité d'un assemblage de grains sphériques de rayon R qui peuvent s'inter-pénétrer est présentée Fig. 3.1. Deux séries de simulations sont utilisées pour le comparatif. La première série de simulations correspond aux résultats exposés Fig. 2.10, où les positions des grains sphériques sont complètement indépendantes et les sphères peuvent se recouvrir sans restriction. Dans la deuxième série de simulations, une distance minimale de 85% du diamètre est requise entre deux centres de sphères. Pour les deux séries, les phases solide et fluide de chaque réalisation sont connexes. Les perméabilités équivalentes (3.28) sous-estiment la perméabilité de l'assemblage de sphères complètement inter-pénétrables. Le meilleur accord est obtenu pour les conditions aux limites mixtes, bien que K_m sous-estime d'un facteur 2 à 3 la perméabilité de l'assemblage de sphères complètement inter-pénétrables. En revanche, K_m constitue une approximation raisonnable de la perméabilité de l'assemblage de sphères partiellement inter-pénétrables : l'écart relatif est inférieur à 25%.

Ce constat mitigé n'est pas surprenant, car le choix unique $\rho = X^3 = 1 - \phi$ suppose que la porosité est uniformément répartie autour des grains. Or, dans une dispersion aléatoire de grains complètement inter-pénétrables, les pores ne sont pas tous de même taille. Sur la réalisation numérique présentée Fig. 2.9, il apparaît ainsi clairement que les plus gros pores peuvent former des passages préférentiels pour l'écoulement. La taille caractéristique des pores qui assurent le transport n'est donc pas trivialement donnée à partir de la taille de grains et le choix $X^3 = 1 - \phi$. Malgré tout, ce choix simplifié permet déjà de produire des estimations de bien meilleure qualité que les bornes présentées au chapitre 1 qui s'appuient pourtant sur une description statistique bien plus complexe de la géométrie.

Avec glissement aux parois

Intéressons nous maintenant à l'effet d'un glissement aux parois à l'interface solide-fluide sur la perméabilité de la cellule équivalente sphérique.

¹se reporter aussi à la discussion autour des Fig. 3.7 et Fig. 3.8.

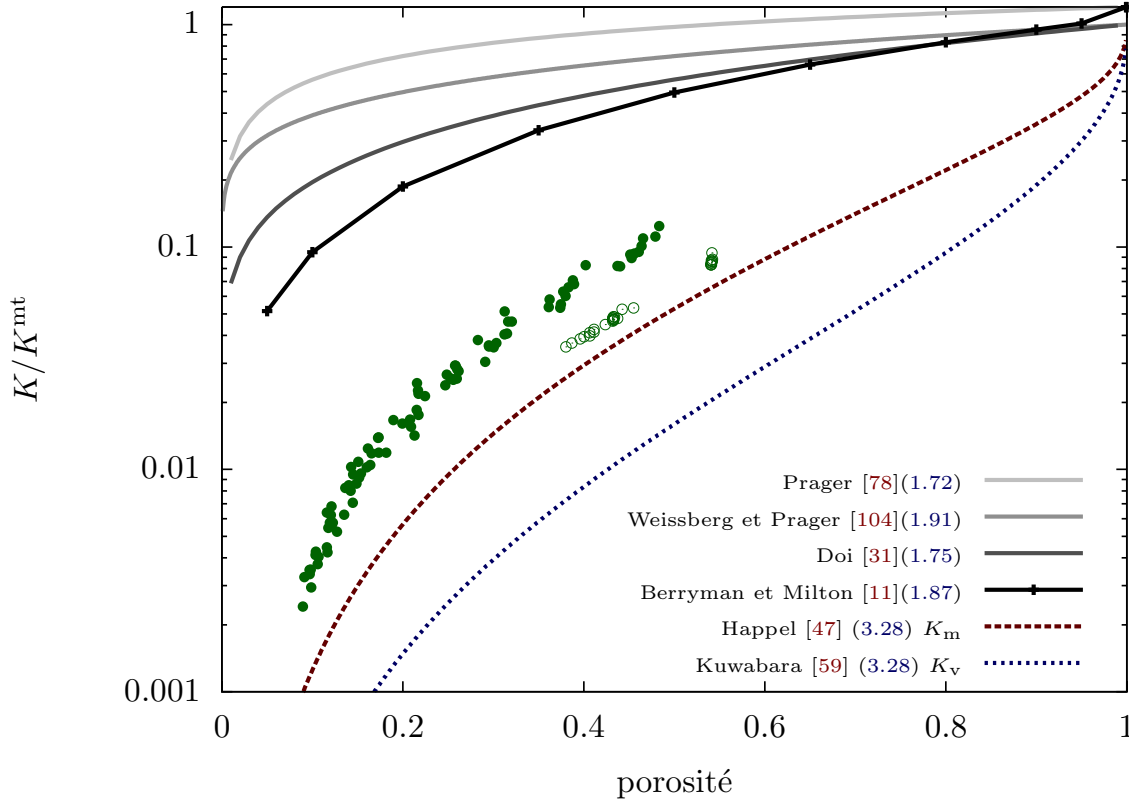


FIG. 3.1: Ronds pleins : sphères totalement interpénétrables, ronds vides : sphère interpénétrables sur 15% du rayon maximum.

Le repère cartésien orthonormé est choisi de sorte que la vitesse \mathbf{V} soit colinéaire à \mathbf{e}_z . Les champs de vitesse et pression solutions du problème auxiliaire (3.25) sont recherchés de la forme $\mathbf{v} = f(r) \cos(\theta) \mathbf{e}_r + g(r) \sin(\theta) \mathbf{e}_\theta$ et $p = \mu h(r) \cos(\theta)$ dans la base sphérique $(\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\phi)$. Le comportement newtonien incompressible et l'équation d'équilibre imposent :

$$g(r) = C_1 + C_2 r^2 + \frac{C_3}{r^3} + \frac{C_4}{r} \quad ; \quad f(r) = -\frac{C_2 r^2}{2} - \frac{2C_4}{r} + \frac{2C_3}{r^3} - C_1 \quad ; \quad h(r) = -5C_2 r - \frac{2C_4}{r^2} \quad (3.30)$$

Ensuite, les conditions aux limites en $r = R$ et R_{ext} permettent d'expliciter les coefficients C_i en fonction de X, R, V, μ et ζ . Enfin, le calcul de la force de trainée exercée par le fluide sur le solide permet de remonter à la perméabilité de la cellule équivalente par l'intermédiaire de (3.26). Pour les conditions aux limites uniformes en vitesse ou mixtes, les perméabilités équivalentes sont :

$$K_v(\kappa) = K_v(0) \left(1 + \frac{b_v \kappa}{1 + a_v \kappa} \right) \quad ; \quad K_m(\kappa) = K_m(0) \left(1 + \frac{b_m \kappa}{1 + a_m \kappa} \right) \quad (3.31)$$

avec $K_v(0)$ et $K_m(0)$ les perméabilités équivalentes en l'absence de glissement données par (3.28),

$$b_v = \frac{(2 + 4X + 6X^2 + 3X^3)^2}{X(X^4 + X^2 + X + X^3 + 1)(4X^2 + 7X + 4)} \quad ; \quad a_v = \frac{2 + 3X^5}{X(X^4 + X^2 + X + X^3 + 1)}$$

$$b_m = \frac{6(X^4 + X^2 + X + X^3 + 1)^2}{X(3 + 2X^5)(1 + X)(2X^2 + X + 2)} \quad ; \quad a_m = \frac{6(1 - X)^2(X^4 + X^2 + X + X^3 + 1)}{(3 + 2X^5)X} \quad (3.32)$$

et où $\kappa = \zeta/R_{\text{pore}}$ représente l'ordre de grandeur du nombre de Knudsen pour la cellule équivalente avec $R_{\text{pore}} = R(1 - X)/X$ le "rayon" d'un pore et ζ le coefficient de glissement donné par (1.93) pour un gaz parfait. Lorsque le coefficient de glissement est nul, la condition d'adhérence est retrouvée et (3.31) se réduit bien à (3.28).

Lorsque la taille des pores R_{pore} est grande devant le libre parcours moyen d'une molécule de gaz ², le nombre de Knudsen $\kappa \ll 1$. Le développement limité en $\kappa = 0$ au premier ordre de (3.31) donne :

$$\frac{K_v(\kappa)}{K_v(0)} = 1 + b_v \kappa + o(\kappa) \quad ; \quad \frac{K_m(\kappa)}{K_m(0)} = 1 + b_m \kappa + o(\kappa) \quad (3.33)$$

Enfin, lorsque l'épaisseur de la couronne de fluide h tend vers 0, un développement limité au premier ordre de $K_m(\kappa)$ dans (3.31) en $h = 0$ montre que :

$$\frac{K_m(\kappa)}{K_m(0)} = 1 + 3\kappa + \mathcal{O}\left(\frac{h}{R}\right) \quad (3.34)$$

On verra que la comparaison de (3.34) avec (3.63) conforte le fait que dans le cas où l'épaisseur h de la couronne de fluide tend vers 0, l'écoulement dans la couronne de fluide est très proche d'une moitié de l'écoulement de Poiseuille entre deux plans distants de $2h$.

Dans cette section, les définitions d'un problème auxiliaire sur un domaine borné et d'une cellule perméable équivalente présentées à la section 3.2.1 ont été appliquées sur un modèle morphologique sphérique. La cellule perméable équivalente ainsi définie apparaît être un candidat bien plus adapté à l'étude de la perméabilité d'un milieu constitué de grains sans orientation préférentielle que les estimations basées sur un écoulement dans un milieu infini proposées à la section 3.1.2. L'effet des conditions aux limites appliquées sur la frontière extérieure de la cellule a pu commencer à être investigué. Une question encore ouverte est le choix de l'épaisseur de la couche de fluide autour du grain solide. Enfin, cette méthode ouvre la porte à l'étude de l'impact du glissement aux parois sur la perméabilité.

Cependant, les géomatériaux présentent de nombreux exemples de milieux granulaires dont les grains ont une orientation préférentielle : par exemple, les paquets de feuillets d'argiles sont aplatis [22] et les cristaux de gypse dans le plâtre sont allongés [85]. Pour constituer une bibliothèque de cellules perméables équivalentes apte à décrire ces matériaux, la méthodologie présentée section 3.2.1 doit donc maintenant être appliquée à des motifs morphologiques qui présentent une orientation préférentielle. Ce faisant, les solutions des problèmes auxiliaires deviennent sensiblement plus difficiles à établir. Pour appréhender progressivement cette difficulté, la section 3.3 est consacrée à l'étude d'écoulements plans. L'étude des problèmes plans bénéficie en effet de la possibilité d'utiliser une représentation des champs de vitesse et de contrainte basée sur des potentiels complexes, qui peut être couplée à des transformations conformes du plan complexe pour aborder une grande variété de géométries.

3.3 Cellules équivalentes cylindriques de section elliptique

Notations : i est le nombre complexe tel que $i^2 = -1$ et, dans cette section uniquement, \bar{a} désigne le complexe conjugué de a au lieu de la moyenne volumique.

3.3.1 Description géométrique de la cellule équivalente

Dans cette section, les écoulements considérés sont dans le plan repéré par la base carthésienne orthonormée $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y)$. Le formalisme proposé à la section 3.3 est développé dans le

²se rapporter à la section 1.5 pour quelques ordres de grandeurs.

cas d'une géométrie elliptique du domaine Ω et de la particule \mathcal{P} . Les frontières $\partial\Omega$ et $\partial\mathcal{P}$ sont deux ellipses confocales, c'est à dire qu'elles partagent les mêmes foyers. Les foyers sont situés en $(x = \pm c, y = 0)$ où le réel positif c est la demi distance focale des ellipses $\partial\Omega$ et $\partial\mathcal{P}$. L'ellipse $\partial\Omega$ (resp. $\partial\mathcal{P}$) est alors déterminée de manière unique par la donnée de son rapport d'aspect $\omega_2 \in [0; 1]$ (resp. $\omega_1 \in [0; \omega_2]$) entre le demi petit axe orienté suivant \mathbf{e}_y et le demi grand axe orienté suivant \mathbf{e}_x . Pour chaque ellipse, les demi grand axes A_i et demi petits axes B_i sont reliés à la demi distance focale c et au rapport d'aspect ω_i par :

$$A_i = \frac{c}{\sqrt{1 - \omega_i^2}} \quad ; \quad B_i = \frac{c\omega_i}{\sqrt{1 - \omega_i^2}} \quad (i = 1 \text{ ou } 2) \quad (3.35)$$

La fraction volumique de solide de la cellule est $\omega_1/\omega_2 \times (1 - \omega_2^2)/(1 - \omega_1^2)$. Ainsi, si les paramètres c et ω_1 de l'ellipse frontière de la particule solide sont fixés, ajuster la fraction volumique de solide de la cellule revient à modifier le rapport d'aspect ω_2 de l'ellipse $\partial\Omega$. Pour les fortes fractions volumiques de solide, les deux ellipses ont des rapports d'aspect similaires, tandis que dans la limite diluée $\partial\Omega$ tend vers un cercle.

Un autre choix de liaison entre les ellipses intérieure et extérieure aurait pu être qu'elles aient le même rapport d'aspect au lieu d'être confocales. Dans ce cas, la perméabilité de la cellule équivalente serait bien entendu différente. Ce deuxième choix n'a pas été testé dans ce travail.

Par ailleurs, dans la limite où c tend vers 0 et ω_i tend vers 1 par la liaison $c = R_i \sqrt{1 - \omega_i^2}$, l'ellipse correspondante tend vers un cercle de rayon R_i .

Lorsque les deux ellipses dégénèrent en cercles concentriques de rayon R_1 et R_2 , la perméabilité dans le plan est donnée en l'absence de glissement aux parois dans [18] pour les conditions aux limites uniformes en vitesse ou mixtes :

$$\begin{aligned} \frac{\mu}{R_1^2} K_v &= -\frac{1}{4X^2} \left(\ln(X) + \frac{1 - X^2}{1 + X^2} \right) \\ \frac{\mu}{R_1^2} K_m &= -\frac{1}{4X^2} \left(\ln(X) + \frac{1 - X^4}{2(1 + X^4)} \right), \end{aligned} \quad (3.36)$$

avec $X = R_1/R_2$.

Dans la suite, on cherche à établir les composantes de la perméabilité dans le plan lorsque $\partial\mathcal{P}$ et $\partial\Omega$ sont des ellipses confocales. À cet effet, l'analogie entre un fluide de Stokes et un matériau élastique incompressible ($\nu = 1/2, \mu$) est mise à profit pour utiliser les potentiels complexes et les transformations conformes afin de traiter le problème d'écoulement plan.

3.3.2 Représentation par les potentiels complexes

Pour un problème plan, on montre que les champs de contraintes et de vitesse peuvent dériver de deux potentiels complexes $\phi(z)$ et $\psi(z)$ où $z = x + iy$ décrit le plan complexe. Les composantes des champs de vitesse de contraintes sont données par [73, 97] :

$$\begin{aligned} 2\mu(v_x + v_y) &= \kappa\phi(z) - \overline{\psi(z)} - z\overline{\phi'(z)} \\ \sigma_{xx} + \sigma_{yy} &= 2 \left(\phi'(z) + \overline{\phi'(z)} \right) \\ \sigma_{yy} - \sigma_{xx} + 2i\sigma_{xy} &= 2 \left(\psi'(z) + \overline{z\phi''(z)} \right) \end{aligned} \quad (3.37)$$

où $\kappa = 3 - 4\nu$ en déformations planes. Par ailleurs, la résultante des actions de contact exercées sur un arc orienté AB vérifie

$$F = F_x + iF_y = -i \left[\phi(z) + \overline{\psi(z)} + z\overline{\phi'(z)} \right]_{s_A}^{s_B} \quad (3.38)$$

où s est l'abscisse curviligne le long de l'arc et l'orientation de la normale extérieure à l'arc est $\mathbf{n} = \mathbf{t} \wedge \mathbf{e}_z$ avec \mathbf{t} le vecteur unitaire tangent à l'arc dans le sens de parcours de A vers B . Dans la suite, cette expression sera utilisée pour caractériser la force de traînée exercée par le fluide sur la particule solide. Comme le domaine de l'écoulement $\Omega \setminus \mathcal{P}$ est borné et ne contient pas l'origine, Muskhelishvili [73] a montré que les potentiels peuvent être recherchés de la forme d'un potentiel en $\log(z)$ pour la force de traînée et d'un potentiel holomorphe qui admet un développement en série de Laurent :

$$\phi(z) = -\frac{F}{2\pi(1+\kappa)} \log(z) + \sum_{k=-\infty}^{+\infty} a_k z^k \quad ; \quad \psi(z) = \frac{\kappa \bar{F}}{2\pi(1+\kappa)} \log(z) + \sum_{k=-\infty}^{+\infty} b_k z^k \quad (3.39)$$

où les a_k et b_k sont des constantes complexes.

Pour simplifier l'étude, on ne considère dans la suite que les conditions aux limites uniformes en vitesse. De plus, le fluide est supposé suivre la condition d'adhérence à l'interface solide-fluide (pas de glissement aux parois).

3.3.3 Exemple : écoulement entre deux cercles concentriques

Pour se familiariser avec la représentation par les potentiels complexes, on revisite dans un premier temps le cas de l'écoulement entre deux cercles concentriques.

Les conditions aux limites sont toutes de la forme vitesse imposée. La vitesse complexe $V = V_x + iV_y$ est imposée sur le cercle extérieur de rayon R_2 , et une vitesse nulle sur le cercle intérieur de rayon R_1 . Sur un cercle de rayon R centré à l'origine, on pose $z = Re^{i\theta}$ et on remarque $\bar{z} = R^2/z$. Pour expliciter les conditions aux limites en $R = R_1$ et R_2 , les potentiels complexes (3.39) sont injectés dans l'expression (3.37) de la vitesse. En réorganisant les termes, les coefficients complexes a_k , b_k et F des potentiels complexes (3.39) sont soumis à des conditions du type :

$$2\mu(v_x + iv_y) = -\frac{\kappa F \ln(R)}{\pi(1+\kappa)} + \frac{\bar{F}}{2\pi(1+\kappa)} \frac{z^2}{R^2} + \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \kappa a_k z^k - \bar{b}_k R^{2k} z^{-k} - k \bar{a}_k R^{2(k-1)} z^{2-k} \quad (3.40)$$

Le membre de gauche vaut 0 en $R = R_1$ et $2\mu(V_x + iV_y) = 2\mu V$ en $R = R_2$, de sorte que les coefficients recherchés suivent le système d'équation :

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{\kappa F \ln(R_1)}{\pi(1+\kappa)} + \kappa a_0 - \bar{b}_0 - 2\bar{a}_2 R_1^2 \\ 2\mu V &= -\frac{\kappa F \ln(R_2)}{\pi(1+\kappa)} + \kappa a_0 - \bar{b}_0 - 2\bar{a}_2 R_2^2 \\ 0 &= \frac{\bar{F}}{2\pi(1+\kappa)} R^{-2} + \kappa a_2 - \bar{b}_{-2} R^{-4} \quad (R = R_1 \text{ ou } R_2) \\ 0 &= \kappa a_k - \bar{b}_{-k} R^{-2k} + (k-2)\bar{a}_{2-k} R^{2(1-k)} \quad (k \neq 0 \text{ ou } 2, R = R_1 \text{ ou } R_2) \end{aligned} \quad (3.41)$$

Les constantes a_0 et b_0 ne peuvent être fixées indépendamment, on choisit $b_0 = 0$. En décomposant en parties réelles et imaginaires, la résolution du système donne 4 coefficients non nuls

$$\begin{aligned} F &= 2\pi\kappa\mu V(1+\kappa)(X^2+1)\Delta^{-1} \\ a_0 &= 2\mu V(\kappa^2 \ln(R_1)(X^2+1) - X^2)\kappa^{-1}\Delta^{-1} \\ a_2 &= -\mu\bar{V}X^2R_1^{-2}\Delta^{-1} \\ b_{-2} &= \kappa\mu V R_1^2 \Delta^{-1} \\ \text{avec } \Delta &= \kappa^2 \ln(X)(X^2+1) + 1 - X^2 \end{aligned} \quad (3.42)$$

où l'on a posé $X = R_1/R_2$. L'écoulement est incompressible donc $\kappa = 1$. Le gradient de pression est calculé comme l'opposé de la force F divisée par l'aire de Ω , qui vaut ici πR_2^2 . À l'aide de la définition directe (3.26) de la perméabilité équivalente, la perméabilité de l'assemblage de cylindres à section circulaire (3.36) est bien retrouvée.

3.3.4 Transformation conforme de Joukowski

Afin de traiter l'écoulement entre deux ellipses confocales, on propose d'utiliser les transformations conformes du plan complexe. Une transformation conforme est une application ω qui permet de passer d'un plan antécédant, décrit par l'abscisse complexe ζ , à un plan image, décrit par l'abscisse complexe $z = \omega(\zeta)$. L'adjectif *conforme* se réfère à la propriété de conservation des angles au cours de la transformation. Mathématiquement, on montre qu'une transformation est conforme si elle est holomorphe et si sa dérivée ne s'annule pas dans le domaine d'étude.

L'utilité des transformations conformes est de transférer le problème d'intérêt, posé dans le plan image z sur une configuration géométrique compliquée, en un problème fictif posé dans le plan antécédant ζ sur une configuration géométrique simple.

Par exemple, dans le problème qui nous intéresse, la transformation conforme de Joukowski centrée à l'origine définie par

$$z = \omega(\zeta) = \zeta + \frac{C^2}{\zeta} \quad (3.43)$$

permet de transformer deux cercles du plan antécédant (centrés à l'origine et de rayons R_1 et R_2 supérieurs au réel positif C) en deux ellipses confocales dans le plan image. Avec la notation $0 < \rho_i = C/R_i < 1$, le demi grand axe des ellipses est $C(1 + \rho_i^2)/\rho_i$ suivant e_x et demi le petit axe $C(1 - \rho_i^2)/\rho_i$ suivant e_y . La distance entre l'origine et un foyer est la demi distance focale $c = 2C$ et le rapport d'aspect de l'ellipse est $\omega_i = (1 - \rho_i^2)/(1 + \rho_i^2)$.

Le problème dans le plan antécédant est représenté par les potentiels complexes $\phi(\zeta)$ et $\psi(\zeta)$. Ces potentiels sont reliés aux potentiels complexes $\Phi(z)$ et $\Psi(z)$ du problème dans le plan image par le changement de variable $z = \omega(\zeta)$:

$$\phi(\zeta) = \Phi(\omega(\zeta)) \quad ; \quad \psi(\zeta) = \Psi(\omega(\zeta)). \quad (3.44)$$

La dérivation de la définition de $\phi(\zeta)$ conduit à l'identité $\Phi'(z) = \phi'(\zeta)/\omega'(\zeta)$. La vitesse dans le plan image s'exprime alors en fonction des potentiels complexes du plan antécédant en injectant ces relations entre potentiels dans (3.37) de sorte que

$$2\mu(v_x + v_y)\overline{\omega'(\zeta)} = \left(\kappa\phi(\zeta) - \overline{\psi(\zeta)}\right)\overline{\omega'(\zeta)} - z\overline{\phi'(\zeta)}. \quad (3.45)$$

Ainsi, lorsque ζ varie sur un cercle centré à l'origine du plan antécédant, (3.45) permet de décrire la vitesse du point image $z = \omega(\zeta)$ qui se trouve sur une ellipse par la transformation conforme de Joukowski (3.43). D'un point de vue pratique, la relation (3.45) permet d'appliquer des conditions aux limites en vitesse sur les potentiels complexes du plan antécédant.

À partir de la forme des potentiels complexes (3.39) de l'écoulement dans le plan image, les potentiels dans le plan antécédant peuvent être recherchés de la forme :

$$\begin{aligned} \phi(\zeta) &= \frac{-F}{2\pi(1+\kappa)} \log(\zeta) + a_0 + \sum_{k=1}^{+\infty} a_k \left(\rho_1 \frac{\zeta}{C}\right)^k + a_{-k} \left(\rho_2 \frac{\zeta}{C}\right)^{-k} \\ \psi(\zeta) &= \frac{\kappa\overline{F}}{2\pi(1+\kappa)} \log(\zeta) + \sum_{k=1}^{+\infty} b_k \left(\frac{\rho_1\zeta}{\rho_2 C}\right)^k + b_{-k} \left(\rho_1\rho_2 \frac{\zeta}{C}\right)^{-k} \end{aligned} \quad (3.46)$$

On peut montrer que $F = F_x + \iota F_y$ correspond à la force de traînée appliquée par le fluide sur la particule solide dans le problème défini sur le plan image. En revanche, les coefficients a_k et b_k ne

correspondent pas à leurs homologues dans (3.39). Les préfacteurs en $\rho_i = C/R_i$ ont été ajoutés afin d'assurer un bon comportement asymptotique des coefficients a_k et b_k lorsque k tend vers $\pm\infty$. Enfin, pour déterminer la perméabilité de la cellule équivalente, il suffit connaître F .

3.3.5 Perméabilité de la cellule équivalente elliptique

La valeur de la force de trainée F et des autres coefficients du développement (3.46) des potentiels complexes du plan antécédant sont déterminées à l'aide des conditions aux limites. Les conditions aux limites, qui sont ici toutes en vitesse, sont appliquées en injectant les potentiels (3.46) dans (3.45) pour $\rho = \rho_1$ et ρ_2 . Par identification des coefficients en facteurs de ζ^k pour chaque k , les coefficients des développements en série de Laurent des potentiels (3.46) vérifient le système d'équations suivant pour $\rho = \rho_1$ et ρ_2

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{-\rho^{2k}\varepsilon b_{-k}}{(\rho_1\rho_2)^k} + \frac{\rho^{2k}\varepsilon b_{2-k}}{(\rho_1\rho_2)^{k-2}} + \frac{k\rho^{2k+2}\varepsilon a_{-k}}{\rho_2^k} + \frac{(k-2)\rho^{2k-2}\varepsilon a_{2-k}}{\rho_2^{k-2}} \\
&\quad + \kappa\rho_1^k a_k - \kappa\rho_1^4 \rho_1^{k-2} a_{k-2} \quad (k = 1, 3, 4, 5\dots) \\
0 &= -\left(\frac{\rho_1}{\rho_2\rho^2}\right)^{k-2} \varepsilon b_{k-2} + \rho^4 \left(\frac{\rho_1}{\rho_2\rho^2}\right)^k \varepsilon b_k - \frac{k\rho_1^k}{\rho^{2k-2}} \varepsilon a_k \\
&\quad - (k-2)\rho^{6-2k} \rho_1^{k-2} \varepsilon a_{k-2} - \kappa\rho^4 \rho_2^{-k} a_{-k} + \kappa\rho_2^{2-k} a_{2-k} \quad (k \geq 1) \\
-2\rho^4 \mu V \delta &= \frac{2\kappa \ln(C/\rho)\rho^4 + \varepsilon\rho^2}{2\pi(1+\kappa)} F - \rho^4(\rho_1\rho_2)^{-2} \varepsilon b_{-2} - \kappa\rho^4 a_0 + \kappa\rho_1^2 a_2 + 2\rho^6 \rho_2^{-2} \varepsilon a_{-2} \quad (k = 2) \\
2\mu V \delta &= \frac{\varepsilon\rho^2 - 2\kappa \ln(C/\rho)}{2\pi(1+\kappa)} F + \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)^2 \varepsilon b_2 + \kappa a_0 - 2\rho^{-2} \rho_1^2 \varepsilon a_2 - \kappa\rho_2^{-2} \rho^4 a_{-2} \quad (k = 0)
\end{aligned} \tag{3.47}$$

avec $\varepsilon = 1$ si V est selon \mathbf{e}_x ou $\varepsilon = -1$ si V est selon \mathbf{e}_y et $\delta = 0$ si $\rho = \rho_1$ ou $\delta = 1$ si $\rho = \rho_2$.

Les coefficients a_k et b_k avec k impair sont tous nuls. La combinaison des 4 équations correspondantes aux coefficients de ζ^0 et ζ^2 permet d'exprimer a_2 , a_{-2} , b_2 et b_{-2} linéairement en fonction de a_0 et F , inconnus et V , le chargement. Ensuite une relation de récurrence peut être établie pour $k \geq 2$ pair, permettant de relier linéairement a_{k+2} , a_{k-2} , b_{k+2} et b_{k-2} en fonction de a_k , a_{-k} , b_k et b_{-k} en combinant les équations correspondantes aux coefficients de ζ^{k+2} et ζ^{-k} dans (3.45) :

$$\begin{pmatrix} a_{k+2} \\ a_{k-2} \\ b_{k+2} \\ a_{-k-2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}(k) & M_{12}(k) & 0 & 0 \\ M_{21}(k) & M_{22}(k) & 0 & 0 \\ M_{31}(k) & M_{32}(k) & (\rho_2/\rho_1)^2 & 0 \\ M_{41}(k) & M_{42}(k) & 0 & (\rho_1\rho_2)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ a_{-k} \\ b_k \\ a_{-k} \end{pmatrix} \tag{3.48}$$

où les M_{ij} sont explicites et se comportent asymptotiquement suivant :

$$\lim_{k \rightarrow \infty} M_{11}(k) = \rho_2^4/\rho_1^2 \quad ; \quad \lim_{k \rightarrow \infty} M_{22}(k) = \rho_2^2/\rho_1^4 \quad ; \quad \lim_{k \rightarrow \infty} M_{ij}(k) = 0 \quad (i \neq j). \tag{3.49}$$

Nous n'avons pas pu trouver la solution exacte du système ainsi défini. En l'absence de meilleure idée, la résolution du système se fait par troncature des coefficients à un ordre n ($a_k = a_{-k} = b_k = b_{-k} = 0$ pour $k > n$), et exploitation des deux équations correspondantes aux coefficients de ζ^{-n} dans (3.45) pour déterminer F et a_0 . Numériquement, cette procédure est extrêmement efficace du fait des relations de récurrence explicites. Une convergence très rapide avec n de la force F est observée pour toutes valeurs testées de ρ_1 et ρ_2 : une troncature à l'ordre $n = 100$ est suffisante pour une précision à la dixième décimale.

Les composantes non nulles du tenseur de perméabilité équivalent dans le plan ($K(\omega_1)_{v,xx}$ et $K(\omega_1)_{v,yy}$) sont comparées Fig. 3.2 à la perméabilité équivalente K_v de la cellule sphérique (3.36),

pour les rapports d'aspect $\omega_1 = 1/2, 1/5$ et $1/20$ de la particule solide. Pour cette comparaison, la taille caractéristique de normalisation de la perméabilité effective est choisie comme $\sqrt{A_1 B_1}$, c'est à dire qu'une particule solide elliptique est comparée à une particule solide sphérique de même aire. Avec cette normalisation, dans la limite d'une fraction volumique de solide nulle, les deux composantes du tenseur de perméabilité tendent vers la perméabilité K_v (3.36) de la cellule perméable équivalente sphérique. La perméabilité $K(\omega_1)_{v,xx}$ dans la direction colinéaire au grand axe de l'ellipse est toujours supérieure à $K(\omega_1)_{v,yy}$. L'écart entre ces deux composantes augmente avec la fraction volumique de solide ainsi qu'avec l'anisotropie de la particule solide.

La validité des résultats présentés Fig. 3.2 a été confirmée en plusieurs points par comparaison avec des calculs par éléments finis, beaucoup plus lourds numériquement. Ces calculs de validation par éléments finis ont été réalisés avec le code Cast3m³. Un soin particulier a été porté au traitement de la liaison d'incompressibilité par l'utilisation d'un lagrangien et d'éléments triangulaires QUAF/CENTREP1 qui sont stables et dont la précision spatiale est d'ordre 3 en vitesse et 2 en pression [44].

Cette section, restreinte à l'étude d'écoulements plans, illustre la difficulté de calculer explicitement les solutions des problèmes auxiliaires dont la géométrie n'est pas triviale. Revenons maintenant à des écoulements tridimensionnels.

3.4 Cellules équivalentes sphéroïdales

Afin de capturer une orientation préférentielle des particules qui constituent la phase solide, le formalisme proposé à la section 3.3 est développé dans le cas d'une géométrie sphéroïdale du domaine Ω et de la particule \mathcal{P} .

Ces problèmes auxiliaires d'écoulement entre deux sphéroïdes confocaux ou plus généralement entre deux ellipsoïdes ont été étudiés par Dassios *et al.* [26], Vafeas et Dassios [102]. La solution exacte de ces problèmes n'est pas connue, mais ces auteurs proposent une approximation dont le domaine de validité annoncé est restreint aux porosités supérieures à 70% et aux rapports d'aspect compris entre 1/5 et 5. Au vu de la forte restriction de ces estimations sur la porosité, nous proposons d'enrichir les estimations sur la base des fonctions proposées dans [26, 56, 102] en allant à des ordres supérieurs.

En outre, une attention particulière est portée au statut de bornes des approximations de la perméabilité équivalente proposées dans cette section. À l'aide des théorèmes du minimum de l'énergie potentielle et complémentaire, un encadrement rigoureux de la perméabilité équivalente est systématiquement mis en place pour vérifier la qualité des approximations proposées.

3.4.1 Description géométrique de la cellule équivalente

Pour décrire la géométrie de la cellule équivalente et appliquer efficacement les conditions aux limites, le système de coordonnées sphéroïdales est adopté par la suite.

Système de coordonnées sphéroïdales

Un sphéroïde est obtenu par rotation d'une ellipse par rapport à son grand axe (sphéroïde prolate, allongé) ou son petit axe (sphéroïde oblate, aplati). Le système de coordonnées sphéroïdales est un système orthonormé adapté à la description des sphéroïdes. L'expression du système de coordonnées est différente pour les prolates et les oblates. Une demi distance focale $c > 0$ est introduite. Le système de coordonnées est repéré par les variables d'espaces (η, θ, ϕ) où $\theta \in [0, \pi]$, $\phi \in [-\pi, \pi]$ sont les angles d'Euler des coordonnées sphériques. La variable adimensionnelle $\eta \in [0, +\infty]$ est substituée au rayon, de sorte que les surfaces iso- η sont des sphéroïdes

³<http://www-cast3m.cea.fr/>

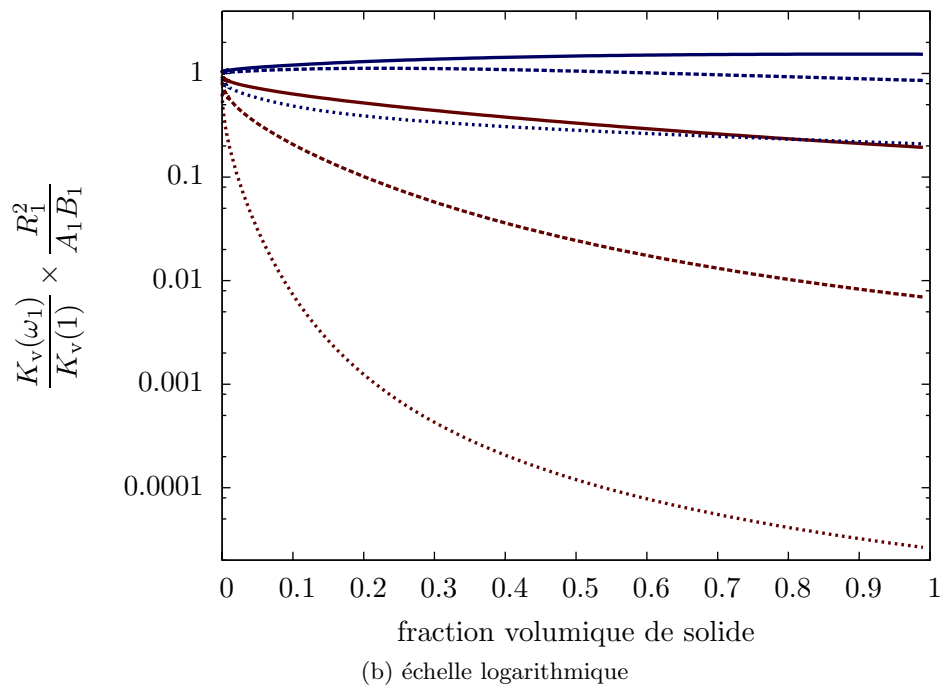
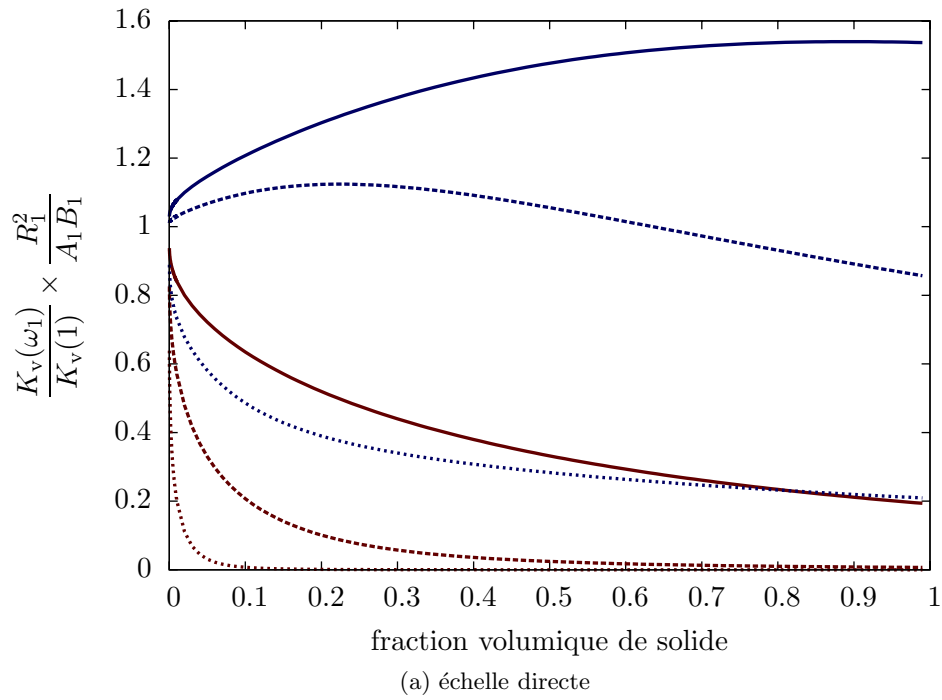


FIG. 3.2: Perméabilité de la cellule équivalente elliptique normalisée par (3.36) avec la taille de la particule solide elliptique telle que son aire soit égale à l'aire de la particule sphérique correspondante dans (3.36). Bleu : K_{xx} , rouge : K_{yy} et ligne pleine $\omega_1 = 1/2$, ligne en tirets $\omega_1 = 1/5$, ligne pointillée $\omega_1 = 1/20$.

construits par rotation d'ellipses confocales (cf. Fig. 3.3). Le rapport d'aspect ω se définit comme le quotient grand axe sur petit axe pour un prolate ($\omega \geq 1$) ou petit axe sur grand axe pour un oblate ($\omega \leq 1$).

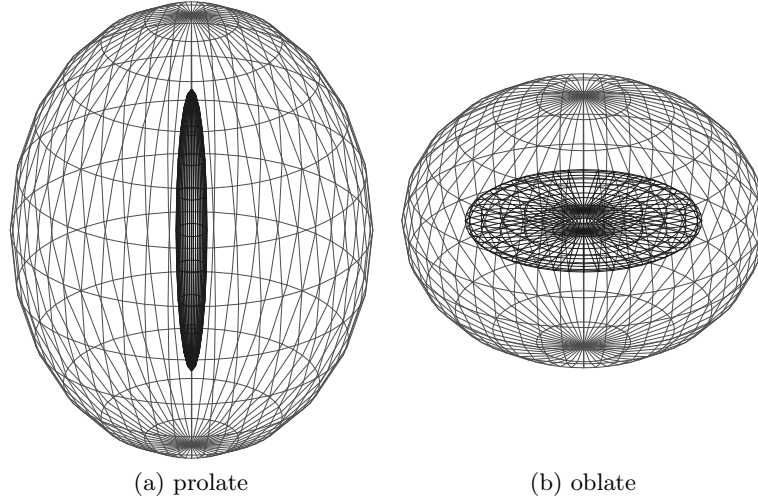


FIG. 3.3: Sphéroïdes confocaux prolates et oblates, obtenus comme surfaces d'iso-valeurs $\eta_1 = 0.1$ (noir) et $\eta_2 = 1$ (gris).

Pour un sphéroïde prolate, le changement de variable $\tau = \cosh(\eta)$, $\zeta = \cos(\theta)$ est classiquement introduit. Le rapport d'aspect des sphéroïdes prolates iso- η ou iso- τ est :

$$\omega = \frac{\cosh(\eta)}{\sinh(\eta)} = \frac{\tau}{\sqrt{\tau^2 - 1}}. \quad (3.50)$$

Le système de coordonnées sphériques se retrouve dans le passage à la limite $r = c\tau$ lorsque c tend vers 0. Les vecteurs de la base sphéroïdale prolate orthonormée sont

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_\eta &= \frac{\cosh(\eta) \sin(\theta) \mathbf{e}_R + \sinh(\eta) \cos(\theta) \mathbf{e}_3}{\sqrt{\cosh(\eta)^2 - \cos(\theta)^2}} = +\mathbf{e}_\tau = \frac{\tau \sqrt{1 - \zeta^2} \mathbf{e}_R + \sqrt{\tau^2 - 1} \zeta \mathbf{e}_3}{\sqrt{\tau^2 - \zeta^2}} \\ \mathbf{e}_\theta &= \frac{\sinh(\eta) \cos(\theta) \mathbf{e}_R - \cosh(\eta) \sin(\theta) \mathbf{e}_3}{\sqrt{\cosh(\eta)^2 - \cos(\theta)^2}} = -\mathbf{e}_\zeta = \frac{\sqrt{\tau^2 - 1} \zeta \mathbf{e}_R - \tau \sqrt{1 - \zeta^2} \mathbf{e}_3}{\sqrt{\tau^2 - \zeta^2}} \\ \mathbf{e}_\phi &= -\sin(\phi) \mathbf{e}_1 + \cos(\phi) \mathbf{e}_2 = +\mathbf{e}_\phi \end{aligned}$$

où $\mathbf{e}_R = \cos(\phi) \mathbf{e}_1 + \sin(\phi) \mathbf{e}_2$ désigne le vecteur unitaire radial en coordonnées cylindriques. La base orthonormée $(\mathbf{e}_\eta, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\phi)$ forme un trièdre direct. Cependant, lors du changement de variable la convention est de choisir $\mathbf{e}_\zeta = -\mathbf{e}_\theta$ pour exprimer les opérateurs différentiels sans problème de signe en fonction des coefficients métriques.

Le passage du système de coordonnées cartésien orthonormé (x_1, x_2, x_3) au sphéroïdal prolate d'axe de révolution suivant \mathbf{e}_3 se fait par

$$\begin{aligned} x_1 &= c\sqrt{\tau^2 - 1} \sqrt{1 - \zeta^2} \cos(\phi) = c \sinh(\eta) \sin(\theta) \cos(\phi) \\ x_2 &= c\sqrt{\tau^2 - 1} \sqrt{1 - \zeta^2} \sin(\phi) = c \sinh(\eta) \sin(\theta) \sin(\phi) \\ x_3 &= c\tau\zeta = c \cosh(\eta) \cos(\theta) \end{aligned}$$

Les coefficients métriques du système (η, θ, ϕ) sont

$$h_\eta = h_\theta = c\sqrt{\cosh(\eta)^2 - \cos(\theta)^2} \quad ; \quad h_\phi = c \sinh(\eta) \sin(\theta)$$

Alternativement, les coefficients métriques du système (τ, ζ, ϕ) sont

$$h_\tau = c\sqrt{\frac{\tau^2 - \zeta^2}{\tau^2 - 1}} \quad ; \quad h_\zeta = c\sqrt{\frac{\tau^2 - \zeta^2}{1 - \zeta^2}} \quad ; \quad h_\phi = c\sqrt{\tau^2 - 1}\sqrt{1 - \zeta^2}$$

L'élément de volume infinitésimal est donné par

$$\begin{aligned} dV &= h_\tau h_\zeta h_\phi d\tau d\zeta d\phi = c^3(\tau^2 - \zeta^2) d\tau d\zeta d\phi \\ &= h_\eta h_\theta h_\phi d\eta d\theta d\phi = c^3(\cosh(\eta)^2 - \cos(\theta)^2) \sinh(\eta) \sin(\theta) d\eta d\theta d\phi \end{aligned}$$

Sur un sphéroïde à η ou τ fixé, l'élément de surface est

$$\begin{aligned} dS &= h_\zeta h_\phi d\zeta d\phi = c^2 \sqrt{\tau^2 - \zeta^2} \sqrt{\tau^2 - 1} d\zeta d\phi \\ &= h_\theta h_\phi d\theta d\phi = c^2 \sqrt{\cosh(\eta)^2 - \cos(\theta)^2} \sinh(\eta) \sin(\theta) d\theta d\phi \end{aligned}$$

Les opérateurs différentiels usuels s'expriment en coordonnées sphéroïdales prolates par [56]

$$\begin{aligned} \text{grad } u &= \frac{\partial v}{\partial \tau} \frac{\mathbf{e}_\tau}{h_\tau} + \frac{\partial v}{\partial \zeta} \frac{\mathbf{e}_\zeta}{h_\zeta} + \frac{\partial v}{\partial \phi} \frac{\mathbf{e}_\phi}{h_\phi} \\ \text{div } \mathbf{u} &= \frac{1}{h_\tau h_\zeta h_\phi} \left[\frac{\partial}{\partial \tau} (v_\tau h_\zeta h_\phi) + \frac{\partial}{\partial \zeta} (v_\zeta h_\tau h_\phi) + \frac{\partial}{\partial \phi} (v_\phi h_\tau h_\zeta) \right] \\ \Delta u &= \frac{1}{h_\tau h_\zeta h_\phi} \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{h_\zeta h_\phi}{h_\tau} \frac{\partial v}{\partial \tau} \right) + \frac{\partial}{\partial \zeta} \left(\frac{h_\tau h_\phi}{h_\zeta} \frac{\partial v}{\partial \zeta} \right) + \frac{\partial}{\partial \phi} \left(\frac{h_\tau h_\zeta}{h_\phi} \frac{\partial v}{\partial \phi} \right) \right] \end{aligned}$$

Le système de coordonnées sphéroïdal oblate ainsi que tous les résultats peuvent se déduire du système prolata par la transformation $\tau \rightarrow i\lambda$ et $c \rightarrow -i\bar{c}$ où $\lambda = \sinh(\eta) \geq 0$ et \bar{c} la nouvelle demi distance focale. Dans la suite, sauf mention explicite, le système de coordonnées sphéroïdales prolata sera utilisé.

Cellule équivalente sphéroïdale

La cellule équivalente sphéroïdale est composée d'une particule solide \mathcal{P} incluse dans un domaine Ω borné tels que $\partial\Omega$ et $\partial\mathcal{P}$ sont deux sphéroïdes confocaux, caractérisés par $\eta_2 > \eta_1$ respectivement (alternativement $\tau_2 > \tau_1$).

Les problèmes auxiliaires sont définis par (3.25) pour les conditions aux limites uniformes en vitesse ou mixtes. L'étude est restreinte au cas où le coefficient de glissement ζ est nul et la condition d'adhérence à l'interface solide-fluide vérifiée.

Dans la suite, on propose de construire des solutions approchées des problèmes auxiliaires qui dérivent de fonctions de courant ou de potentiels.

3.4.2 Écoulement axisymétrique

Pour se familiariser avec la démarche, seuls les écoulements axisymétriques sont traités en premier lieu.

Fonction de courant scalaire

Lorsque l'écoulement est axisymétrique suivant \mathbf{e}_3 , l'incompressibilité du fluide permet de rechercher les champs de vitesse sous la forme [27] :

$$\begin{aligned} v_\eta = v_\tau &= \frac{1}{h_\phi h_\zeta} \frac{\partial \psi}{\partial \zeta} = \frac{1}{c^2 \sqrt{\tau^2 - \zeta^2} \sqrt{\tau^2 - 1}} \frac{\partial \psi}{\partial \zeta} \\ v_\theta = -v_\zeta &= \frac{1}{h_\phi h_\tau} \frac{\partial \psi}{\partial \tau} = \frac{1}{c^2 \sqrt{\tau^2 - \zeta^2} \sqrt{1 - \zeta^2}} \frac{\partial \psi}{\partial \tau} \\ v_\phi &= 0 \end{aligned} \tag{3.51}$$

où la fonction $\psi(\tau, \zeta)$ est appelée fonction de courant de l'écoulement axisymétrique. Lorsque l'écoulement est irrotationnel ($\text{rot } \mathbf{v} = 0$), la fonction de courant vérifie l'équation aux dérivées partielles $E^2(\psi(\tau, \zeta)) = 0$, où l'opérateur différentiel E^2 est caractérisé par

$$E^2 = \frac{1}{c^2(\tau^2 - \zeta^2)} \left((\tau^2 - 1) \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + (1 - \zeta^2) \frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} \right)$$

Par ailleurs, l'injection de la fonction de courant dans l'équation de Navier conduit à $E^4(\psi(\tau, \zeta)) = 0$ où $E^4 = E^2 \circ E^2$ [25]. Une propriété remarquable est que pour tout couple ψ_1, ψ_2 solution de $E^2\psi = 0$, la fonction $\psi = \psi_1 + r^2\psi_2$ est solution de $E^4\psi = 0$. Réciproquement, si ψ est solution de $E^4\psi = 0$, alors elle peut s'écrire (de manière non unique) sous la forme $\psi = \psi_1 + r^2\psi_2$ où ψ_1, ψ_2 sont solutions de $E^2\psi = 0$ [25] et r est la distance à l'origine. Or les solutions de $E^2\psi = 0$ sont connues sous forme séparables comme produit des fonctions de Gegenbauer d'ordre n du premier type G_n ou second type H_n (voir Annexe C). Dassios [25] a introduit une base du noyau de E^2 définie par les fonctions Θ_n^i d'ordre $n = 0, 1, 2, \dots$ et de type $i = 1, 2, 3, 4$ par

$$\begin{aligned} \Theta_n^1(\tau, \zeta) &= G_n(\tau)G_n(\zeta) & ; & & \Theta_n^2(\tau, \zeta) &= G_n(\tau)H_n(\zeta) \\ \Theta_n^3(\tau, \zeta) &= H_n(\tau)G_n(\zeta) & ; & & \Theta_n^4(\tau, \zeta) &= H_n(\tau)H_n(\zeta) \end{aligned}$$

Toute fonction ψ appartenant au noyau de E^2 peut se décomposer comme

$$\psi(\tau, \zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=1}^4 A_n^i \Theta_n^i(\tau, \zeta)$$

On rappelle que $r^2 = c^2(\tau^2 + \zeta^2 - 1)$. Les fonctions de base du noyau de E^4 additionnelles $\Pi_n^i = (\tau^2 + \zeta^2)\Theta_n^i$ sont donc introduites. Elles peuvent s'exprimer par composition de fonctions de Gegenbauer [25, 27]. Finalement, toute solution de $E^4\psi = 0$ peut se mettre (de manière non unique) sous la forme [27]

$$\psi(\tau, \zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=1}^4 A_n^i \Theta_n^i(\tau, \zeta) + B_n^i \Pi_n^i(\tau, \zeta)$$

Par ailleurs, on montre que la fonction $G_1(\tau)G_2(\zeta)$ est une combinaison particulière d'un nombre infini de termes construits sur la base des (Θ_n^i, Π_n^i) . Ce terme peut donc être ajouté à la base si l'on travaille avec un nombre fini de termes de la base. Pour conclure, la base des (Θ_n^i, Π_n^i) permet de construire des champs statiquement ou cinématiquement admissibles, sous la seule réserve de vérifier les conditions aux limites en contrainte ou en vitesse. L'originalité de ce travail est d'utiliser cette base pour construire des champs tests en vue de les injecter dans les principes variationnels pour encadrer rigoureusement la perméabilité équivalente de la cellule sphéroïdale. Les auteurs précédents ont plutôt cherché à produire des estimations, dont le status et la limite de validité ne sont pas précisés.

Majorant par le minimum de l'énergie complémentaire

Dans le cas d'un écoulement axisymétrique, la base de E^4 introduite à la Sec. 3.4.2 permet de créer des champs de vitesse et contrainte solutions des équations de Stokes. Afin de mettre en oeuvre le minimum de l'énergie complémentaire (1.58), une solution approchée est cherchée en explorant les termes de bas degrés de la base de E^4 . Certains termes sont directement éliminés car ne respectent pas la symétrie du problème (degrés impairs) ou contiennent des points singuliers ($H_n(\zeta)$).

On se limite alors aux termes solutions de E^4 contenant uniquement $G_2(\zeta)$ ou $G_4(\zeta)$. La solution est recherchée comme le champ de contraintes associé à la vitesse qui dérive du potentiel

$$\psi_s(\tau, \zeta) = C_0 G_1(\tau) G_2(\zeta) + \sum_{n=2,4,6} \sum_{i=1,3} A_n^i \Theta_n^i(\tau, \zeta) + B_n^i \Pi_n^i(\tau, \zeta) \quad (3.52)$$

La partie déviatorique du champ de contrainte qui dérive de ψ_s est $2\mu \text{grad}^s \mathbf{v}(\psi_s)$ où $\mathbf{v}(\psi_s)$ est le champ de vitesse, a priori non cinématiquement admissible, qui dérive de ψ_s par (3.51). La pression peut se calculer par intégration de l'équation d'équilibre $\mu \Delta \mathbf{v} = \text{grad } p$, en préférant l'intégration par rapport à ζ plutôt que τ .

L'énergie complémentaire peut alors être explicitée en fonction des 13 coefficients C_0, A_n^i et B_n^i . Le terme en Θ_2^1 correspond à une vitesse uniforme et ne participe donc pas à l'énergie complémentaire. Il peut être éliminé, ce qui laisse 12 inconnues. Notons cependant que l'expression de l'énergie complémentaire est extrêmement lourde.

Dans le cas des conditions aux limites mixtes, la nullité des composantes tangentielles du vecteur contrainte appliqué sur $\partial\Omega$ en τ_2 conduit à un système de 5 relations linéaires entre les coefficients. Dans le cas des conditions aux limites uniformes en vitesse, aucune condition aux limites en contrainte n'est à vérifier. L'énergie complémentaire est ensuite optimisée par dérivation par rapport aux coefficients indépendants (12 pour les conditions aux limites uniformes en vitesse, 7 pour les mixtes), ce qui fournit autant d'équations linéaires.

En pratique, la résolution des systèmes linéaires ainsi obtenus est réalisée numériquement car les termes sont beaucoup trop lourds pour un calcul analytique. Ce procédé permet toutefois d'obtenir très rapidement (inversion d'un système 12 par 12 ou 5 par 5 puis 7 par 7) les valeurs optimales des coefficients pour chaque jeu de valeurs du couple (τ_1, τ_2) . Les valeurs optimales sont ensuite réinjectées dans l'expression de l'énergie complémentaire pour donner une borne supérieure sur la perméabilité.

Minorant par le minimum de l'énergie potentielle

À notre connaissance, il n'est pas possible de vérifier toutes les conditions aux limites en vitesse (dans le cas des conditions aux limites uniformes en vitesse) pour un champ de vitesse qui dérive d'un potentiel construit avec un nombre fini d'éléments de la base de E^4 . Dans le cas contraire, la solution exacte serait obtenue immédiatement.

Pour utiliser le minimum de l'énergie potentielle (1.51) afin de trouver une borne inférieure sur la perméabilité, il est donc nécessaire d'enrichir l'espace des fonctions test par des fonctions n'appartenant pas au noyau de E^4 . La fonction test est recherchée comme somme des 10 termes :

$$\psi_c(\tau, \zeta) = C_0 G_1(\tau) G_2(\zeta) + \sum_{n=2,4} \sum_{i=1,3} A_n^i \Theta_n^i(\tau, \zeta) + B_n^i \Pi_n^i(\tau, \zeta) + C_1 G_6(\tau) G_4(\zeta)$$

Le dernier terme, qui n'appartient pas au noyau de E^4 , est choisi comme étant une troncature de l'expression de Π_6^1 en terme de fonctions de Gegenbauer. Ce choix, arbitraire, permet de conserver la même richesse des fonctions en ζ , nécessaire à la réalisation des conditions aux limites.

L'énergie potentielle peut être calculée explicitement en fonction des 10 coefficients introduits. Tout comme pour l'énergie complémentaire, cette expression est toutefois très lourde. Dans le cas des conditions aux limites uniformes en vitesse, un système de 10 équations linéaires indépendantes est directement obtenu, ce qui fixe les valeurs des coefficients sans optimisation. Dans le cas des conditions aux limites mixtes, les conditions sur la vitesse résultent en un système de 8 équations linéaires indépendantes. Le choix des deux paramètres indépendants qui restent est réalisé par optimisation de l'énergie potentielle. La résolution des systèmes se fait numériquement pour chaque jeu de paramètres.

3.4.3 Écoulement tridimensionnel

Les écoulements axisymétriques ne permettent que d'obtenir la composante axiale du tenseur de perméabilité de la cellule équivalente. Pour dépasser cette restriction, on se place maintenant dans un cadre plus général.

Représentation de Papkovitch-Neuber

Les solutions du système d'équation de Stokes admettent la représentation de Papkovitch-Neuber (voir par exemple [42]) :

$$\begin{aligned} 2\mu\mathbf{v} &= \kappa\boldsymbol{\psi} - \mathbf{x} \cdot \mathbf{grad}\boldsymbol{\psi} - \mathbf{grad}\chi \\ p &= \operatorname{div} \boldsymbol{\psi} \end{aligned} \quad (3.53)$$

où $\boldsymbol{\psi}$ est un champ de tenseur d'ordre 1 harmonique ($\Delta\boldsymbol{\psi} = 0$), χ un champ scalaire harmonique (i.e. solution de l'équation de Laplace $\Delta\chi = 0$) et $\kappa = 3 - 4\nu = 1$. En particulier, les champs de vitesse et de contrainte ainsi construits sont systématiquement à divergence nulle. La représentation de Papkovitch-Neuber (3.53) comporte des similitudes avec la représentation des problèmes plans par les potentiels complexes (3.37).

La solution générale de l'équation de Laplace en coordonnées sphéroïdales est donnée en termes de fonctions de Legendre associées du premier (P_n^m) et du second (Q_n^m) type d'ordre n et de rang m dans \mathbb{N} [56, 102] (voir Annexe C) :

$$\begin{aligned} \chi(\tau, \zeta, \phi) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n P_n^m(\zeta) [P_n^m(\tau) (d_n^m \cos(m\phi) + d_n^{\prime m} \sin(m\phi)) \\ &\quad + Q_n^m(\tau) (D_n^m \cos(m\phi) + D_n^{\prime m} \sin(m\phi))], \end{aligned} \quad (3.54)$$

où $d_n^m, d_n^{\prime m}, D_n^m$ et $D_n^{\prime m}$ sont des constantes scalaires. Cette décomposition est adoptée pour le potentiel scalaire χ . Il faut faire attention aux expressions de $P_n^m(\tau)$ et $P_n^m(\zeta)$: elles diffèrent car se réfèrent à deux intervalles de définition distincts. Pour construire des champs de vecteurs harmoniques, [56] propose de passer par les vecteurs de la base cartésienne orthonormée, puis d'effectuer le changement de base vers la base sphéroïdale pour exprimer les conditions aux limites. Dans la suite, les composantes du potentiel vecteur $\boldsymbol{\psi}$ sont construites en remplaçant les noms en $D_n^m, d_n^m, D_n^{\prime m}, d_n^{\prime m}$ des constantes de χ par $A_n^m, a_n^m, A_n^{\prime m}, a_n^{\prime m}$ pour la direction \mathbf{e}_1 , $B_n^m, b_n^m, B_n^{\prime m}, b_n^{\prime m}$ pour \mathbf{e}_2 et $C_n^m, c_n^m, C_n^{\prime m}, c_n^{\prime m}$ pour \mathbf{e}_3 .

Les termes facteurs de $P_n^m(\tau)$ sont appelés harmoniques intérieures car ils divergent à l'infini. Les termes facteurs de $Q_n^m(\tau)$ sont appelés harmoniques extérieures car ils divergent à l'origine (i.e. en $\tau = 1$). Les problèmes auxiliaires sur la cellule équivalente sont bornés et ne contiennent pas l'origine, ils requièrent donc les deux types d'harmoniques. Au contraire, seules les harmoniques extérieures sont nécessaires pour résoudre le problème de la translation d'un sphéroïde dans un fluide Newtonien avec vitesse évanescence à l'infini [56]. La solution est connue explicitement et fait intervenir uniquement les termes en A_0^0 et D_1^1 pour un écoulement transversal suivant \mathbf{e}_1 et les termes en C_0^0 et D_1^0 pour un écoulement axial suivant \mathbf{e}_3 ⁴.

Malheureusement, rajouter les termes équivalents pour les harmoniques intérieures ne permet pas de résoudre notre problème. En effet, les termes en a_0^0 et d_1^1 sont égaux et conduisent tous les deux à une vitesse uniforme suivant \mathbf{e}_1 tandis que les termes en c_0^0 et d_1^0 sont égaux et conduisent tous les deux à une vitesse uniforme suivant \mathbf{e}_3 : il manque toujours une inconnue par rapport aux nombres d'équations pour ces deux directions de chargement.

La forme générale de la solution proposée permet toutefois de construire des champs statiquement ou cinématiquement admissibles, sous la seule réserve de vérifier les conditions aux

⁴Cependant, l'expression de la force de traînée qui en est déduite dans [56] comporte une erreur de calcul : se référer à [24] par exemple pour la valeur correcte de la force de traînée

limites en contrainte ou en vitesse. Les résultats qui suivent sont basés sur la représentation de Papkovitch-Neuber et l'utilisation de fonctions de forme qui correspondent aux harmoniques sphéroïdales. Le développement en harmoniques sphéroïdales est tronqué à un ordre n . Le problème se résume à trouver les valeurs des composantes $A_n^m, a_n^m, \dots, d_n^m$ qui permettent de respecter les conditions aux limites en vitesse ou en contrainte, d'explicitier l'énergie potentielle ou complémentaire en fonction de ces coefficients, puis éventuellement d'optimiser les coefficients indépendants. Le détail de cette procédure est purement technique, seules les grandes lignes en seront esquissées. De manière générale, on observe qu'à nombre de termes explorés fixé, il est plus efficace de chercher à augmenter l'ordre n que le rang m .

Pour simplifier la discussion, on considère séparément deux types de chargement : une vitesse macroscopique "normale" suivant \mathbf{e}_3 , dans l'axe de révolution des sphéroïdes et une vitesse macroscopique "tangentielle" suivant \mathbf{e}_1 , transversalement à l'axe. Nous n'avons pas malheureusement pu déterminer de règle pour le choix des ordres et rangs des coefficients à activer. En pratique, on procède au cas par cas pour tenter de vérifier les conditions aux limites. La section suivante a pour but de préciser les coefficients utilisés pour le lecteur désireux de reproduire nos résultats ou de les étendre à d'autres applications.

Majorant par le minimum de l'énergie complémentaire

Écoulement axial

Conditions aux limites uniformes en vitesse : La solution approchée proposée repose sur l'activation des 14 termes exposés section 3.4.3 qui correspondent aux coefficients : $C_0^0, C_2^0, C_4^0, A_2^1, B_2^1, D_1^0, D_3^0, D_5^0, c_2^0, c_4^0, a_2^1, b_2^1, d_3^0$ et d_5^0 . Aucune condition aux limites ne pèse sur les éléments statiquement admissibles de \mathcal{S}_v (1.33) : l'énergie complémentaire est optimisée par rapport à ces 14 termes. Notons que les termes $d_1^0 \Leftrightarrow c_0^0$ correspondent à une translation uniforme suivant \mathbf{e}_3 et ne contribuent pas à l'énergie complémentaire : ils ne sont donc pas activés.

Conditions aux limites mixtes : La solution approchée proposée repose sur l'activation de 10 termes. Les conditions aux limites qui portent sur les éléments statiquement admissibles de \mathcal{S}_m (1.35) fixent 4 termes (par exemple $C_0^0, D_1^0, C_4^0, c_4^0$). Les 6 termes qui restent ($C_2^0, D_3^0, d_3^0, d_5^0, D_5^0, c_2^0$) sont déterminés par optimisation de l'énergie complémentaire. L'ajout des termes A_2^1, B_2^1, a_2^1 et b_2^1 utilisés dans l'approche en vitesse ne conduit pas à une amélioration de la borne obtenue et n'est pas nécessaire.

Écoulement transversal

Conditions aux limites uniformes en vitesse : La solution approchée proposée repose sur l'activation de 14 termes suivants : $A_0^0, A_2^0, A_4^0, C_2^1, D_1^1, D_3^1, D_5^1, a_2^0, c_2^1, d_3^1, d_5^1, a_4^0, C_4^1$ et c_4^1 . Aucune condition aux limites ne porte sur les éléments de \mathcal{S}_v (1.33), l'énergie complémentaire est optimisée par rapport à ces 14 termes. Les termes d_1^1 et a_0^0 correspondent à une translation uniforme suivant \mathbf{e}_1 et ne sont pas activés.

Conditions aux limites mixtes : La solution approchée proposée repose sur l'activation de 14 termes. Les conditions aux limites qui portent sur les éléments de \mathcal{S}_m (1.35) fixent 6 termes ($A_0^0, C_2^1, C_4^1, D_1^1, c_2^1, c_4^1$). Les 8 termes qui restent ($A_4^0, D_5^1, D_3^1, a_2^0, A_2^0, a_4^0, d_5^1, d_3^1$) sont déterminées par optimisation de l'énergie complémentaire.

Minorant par le minimum de l'énergie potentielle

Écoulement axial

Conditions aux limites uniformes en vitesse : Cette borne est la plus difficile à établir car quelque soit le nombre de termes activés, il manque toujours au moins un terme pour vérifier les conditions aux limites en vitesse (1.33). Le choix des 8 termes en $C_0^0, D_1^0, C_2^0, c_0^0, c_2^0, a_2^1, b_2^1$ et D_3^0 ne requiert qu'un terme additionnel pour vérifier les conditions aux limites en vitesse. À cet effet, la base des fonctions harmoniques explorée est enrichie d'un terme qui ne vérifie pas les équations

de Stokes. Ce terme doit être choisi à divergence nulle et de même dépendance en ζ que les autres. On montre que le terme de vitesse supplémentaire correspondant à $\text{rot}(\gamma P_5^1(\tau) P_3^1(\zeta) \mathbf{e}_\phi)$ où γ est une constante permet de construire un champ de vitesse cinématiquement admissible à 9 termes. Toutes les constantes sont fixées par les conditions aux limites, l'étape d'optimisation de l'énergie potentielle n'a pas lieu.

Conditions aux limites mixtes : La solution approchée proposée repose sur l'activation de 9 termes de la base des fonctions harmonique et du terme supplémentaire en γ introduit pour les conditions aux limites uniformes en vitesse. Les conditions aux limites sur les composantes de la vitesse fixent 7 termes ($C_0^0, D_1^0, C_2^0, c_0^0, c_2^0, B_2^1, d_3^0$). Les 3 termes qui restent sont déterminées par optimisation de l'énergie potentielle (D_3^0, A_2^1 et le terme supplémentaire en γ de l'approche en vitesse). Le terme en γ n'est pas nécessaire pour obtenir une borne mais contribue à son amélioration.

Écoulement transversal

Conditions aux limites uniformes en vitesse : Tout comme pour l'écoulement axial, il manque toujours au moins un terme pour vérifier les conditions aux limites de \mathcal{C}_v (1.33). Le choix des 3 termes en A_0^0, D_1^1 et a_0^0 ne requiert qu'un terme additionnel pour vérifier les conditions aux limites en vitesse. Le terme de vitesse axiale supplémentaire $\alpha \sqrt{1 - \zeta^2} \cos(\phi) \mathbf{e}_\tau / (\sqrt{\tau^2 - 1} \sqrt{\tau^2 - \zeta^2})$ où α est une constante est à divergence nulle et permet de construire un champ de vitesse cinématiquement admissible à 4 termes. En dépit de nos efforts, nous n'avons pas réussi à construire de termes appropriés pour construire des champs cinématiquement admissible d'ordres supérieurs. Par conséquent, la borne obtenue est de qualité inférieure à toutes les autres bornes proposées.

Conditions aux limites mixtes : La solution approchée proposée repose sur l'activation de 9 termes. Les conditions aux limites qui portent sur les composantes de la vitesse fixent 7 termes ($A_0^0, A_2^0, C_2^1, D_1^1, a_0^0, a_2^0, c_2^1$). Les 2 termes qui restent (d_3^1, D_3^1) sont déterminées par optimisation de l'énergie potentielle.

Remarque : Dans le calcul de l'énergie complémentaire et de l'énergie potentielle, le terme quadratique peut généralement être évalué par une intégrale de surface au lieu d'une intégrale de volume. En effet, dans le cas de la construction de champs de contrainte, chaque terme du développement conduit à un champ de contrainte $\boldsymbol{\sigma}^i$ à divergence nulle mais dont le taux de déformation associé $\mathbf{d}^i = \mathbb{K} \boldsymbol{\sigma}^i : / (2\mu)$ est compatible géométriquement avec un champ de vitesse \mathbf{v}^i par la construction de Papkovitch-Neuber. Le théorème de la divergence permet alors d'écrire pour deux termes i et j construits sur la base de potentiels harmoniques

$$\int_{\Omega_f} \boldsymbol{\sigma}^i : \frac{\mathbb{K}}{2\mu} : \boldsymbol{\sigma}^j \, dV = \frac{1}{2\mu} \int_{\partial\Omega_f} \mathbf{v}^i \cdot \boldsymbol{\sigma}^j \cdot \mathbf{n} \, dS$$

La même remarque s'applique pour la procédure basée sur le minimum de l'énergie potentielle. Cependant, les termes supplémentaires qui ne résultent pas de la formulation de Papkovitch-Neuber, parfois utilisés pour vérifier les conditions aux limites, doivent être traités séparément car on ne peut pas leur associer un champ de contrainte à divergence nulle.

3.4.4 Encadrements de la perméabilité équivalente

Le choix d'une longueur caractéristique pour adimensionner les résultats n'est pas évident dans le cas d'un assemblage sphéroïde. On choisit de normaliser la perméabilité par le carré du rayon R_{eq} d'une sphère de même volume que la particule sphéroïdale solide.

En raison de la grande gamme de perméabilité (de l'infini à 0) parcourue pour une fraction volumique de solide de 0 à 1, les perméabilités équivalentes des cellules sphéroïdales sont peu lisibles présentées d'une manière brute. Pour les comparer aux perméabilités des cellules équivalentes sphériques, les Fig. 3.4, 3.5 et 3.6 présentent le ratio entre la perméabilité des

cellules sphéroïdales normalisées par R_{eq}^2 et la perméabilité des cellules sphériques (3.28) normalisées par R^2 , pour le même type de conditions aux limites. Cette façon de présenter masque que les conditions aux limites mixtes conduisent toujours à une perméabilité supérieure à celle des conditions aux limites uniformes en vitesse, comme indiqué section 3.3. L'écart entre les deux types de conditions aux limites diminue pour les sphéroïdes prolates et augmente pour les oblates.

Tout d'abord, pour la composante normale de la perméabilité, on observe que les résultats basés sur la représentation de Papkovich-Neuber sont strictement équivalents à ceux basés sur la fonction de courant scalaire présentés section 3.4.2, signe d'une correspondance entre les deux représentations.

À rapports d'aspect du sphéroïde intérieur fixés, les encadrements des composantes de la perméabilité équivalente sont présentés Fig. 3.4 et 3.5 en fonction de la fraction volumique de solide et comparés lorsque possible à des calculs par éléments finis. Les calculs de comparaison par éléments finis sont, comme pour les cellules équivalentes planes elliptiques, réalisés en prenant soin d'imposer la liaison d'incompressibilité. Seuls des calculs axisymétriques ont été menés car les calculs tridimensionnels sont trop coûteux avec le type d'éléments utilisé. Par ailleurs, seules les conditions aux limites uniformes en vitesse ont pu être imposées.

Remarquons que pour les rapports d'aspect considérés, les encadrements proposés sont relativement serrés dans toute la gamme de fraction volumique de solide. Par ailleurs, la borne inférieure obtenue par construction d'un champ de vitesse montre un excellent accord avec les calculs réalisés par éléments finis, même aux très fortes fractions volumiques de solide et pour des rapports d'aspects élevés.

Toutefois, pour les oblates, la borne inférieure obtenue par construction d'un champ de vitesse avec conditions aux limites uniformes en vitesse diverge (tout en gardant le statut de borne) pour une fraction volumique de solide intermédiaire dont la valeur dépend du rapport d'aspect, tandis que le comportement aux faibles et fortes fractions volumiques est de bonne qualité. Ce comportement divergeant est peut être dû à la concentration élevée de l'écoulement dans le plan équatorial (voir Fig. 3.8) et à l'absence de phase d'optimisation dans le choix des coefficients (nombre d'inconnues égal au nombre d'équations indépendantes pour vérifier les conditions aux limites). L'ajout de termes pour laisser plus de degrés de liberté serait à tester.

Ensuite, à fractions volumiques de solide fixées, les encadrements proposés des composantes de la perméabilité équivalente sont présentés Fig. 3.6 en fonction du rapport d'aspect de la particule solide sphéroïdale.

Ces résultats constituent une avancée significative par rapport aux travaux originaux présentés dans [26], où les estimations sont restreintes à 4 degrés de liberté et ne bénéficient pas du statut de borne. Toutefois, la contrepartie de la précision des résultats présentés dans cette section est une formulation plus lourde et l'absence de formules explicites.

3.4.5 Discussion : effet des conditions aux limites

La structure des champs de vitesse optimaux est présentée Fig. 3.7 pour un écoulement axisymétrique autour d'un oblate. Pour le rapport d'aspect 1/4 considéré, cette solution approchée est en effet d'excellente qualité. L'effet du type de conditions aux limites, uniformes en vitesse ou mixtes, est très clair sur ces figures. Le long du plan équatorial, l'écoulement prend la forme parabolique de l'écoulement de Poiseuille.

Une coupe de la vitesse axiale dans le plan équatorial Fig. 3.8 permet d'observer la différence de concentration l'écoulement entre les deux types de conditions aux limites ainsi que la différence entre les oblates et les prolates. À rapport d'aspect donné, pour un écoulement axial, la concentration de vitesse sur le plan équatorial est beaucoup plus importante pour les oblates. Cette observation pourrait être l'explication de la divergence de la borne inférieure sur la perméabilité axiale des oblates pour les conditions aux limites uniformes en vitesse.

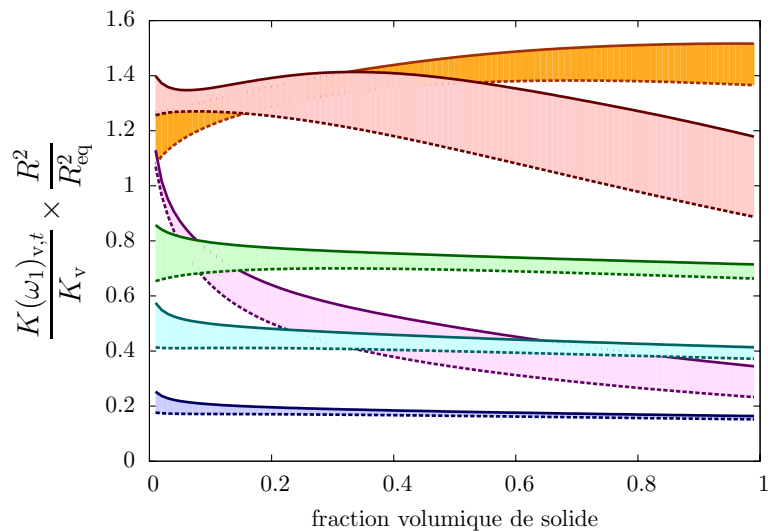
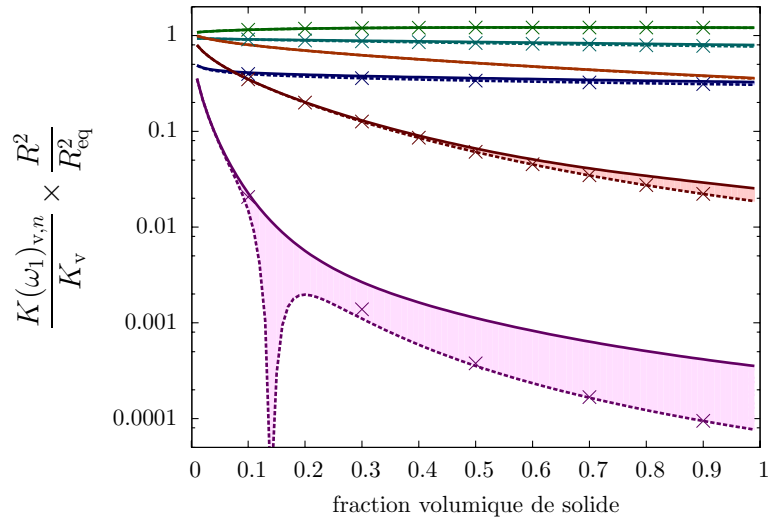
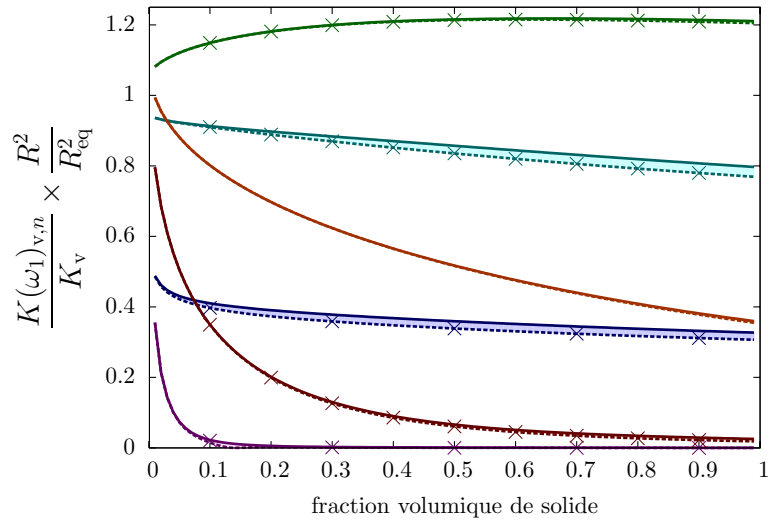


FIG. 3.4: Encadrement de la perméabilité équivalente de la cellule sphéroïdale normalisée par la perméabilité de la cellule sphérique pour les conditions aux limites uniformes en vitesse. Rapport d'aspect ω_1 du sphéroïde intérieur : bleu marine = 20, bleu clair = 5, vert = 2, orange = 1/2, rouge = 1/5, violet = 1/20. Les croix correspondent aux calculs par éléments finis.

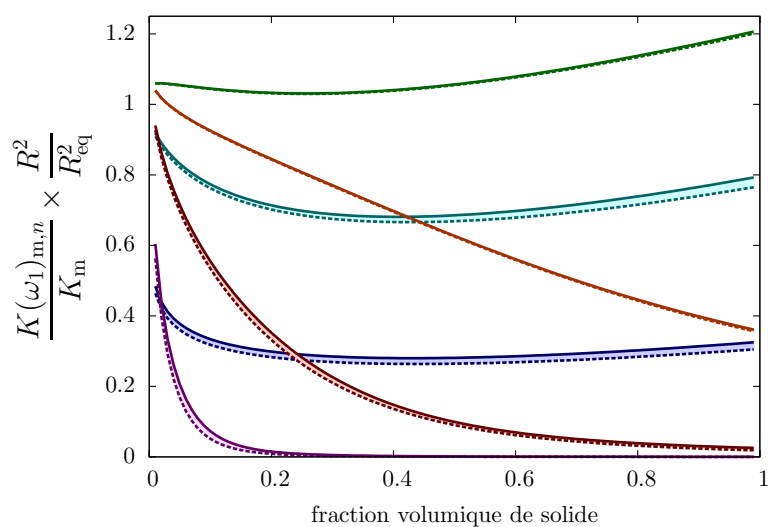
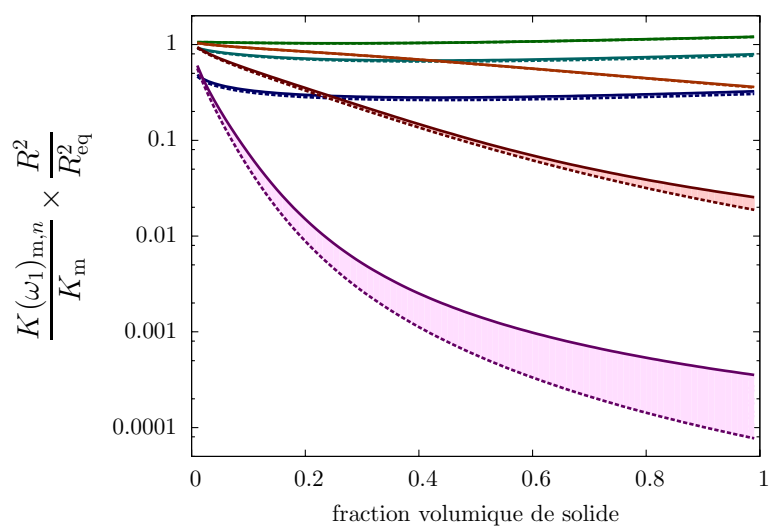
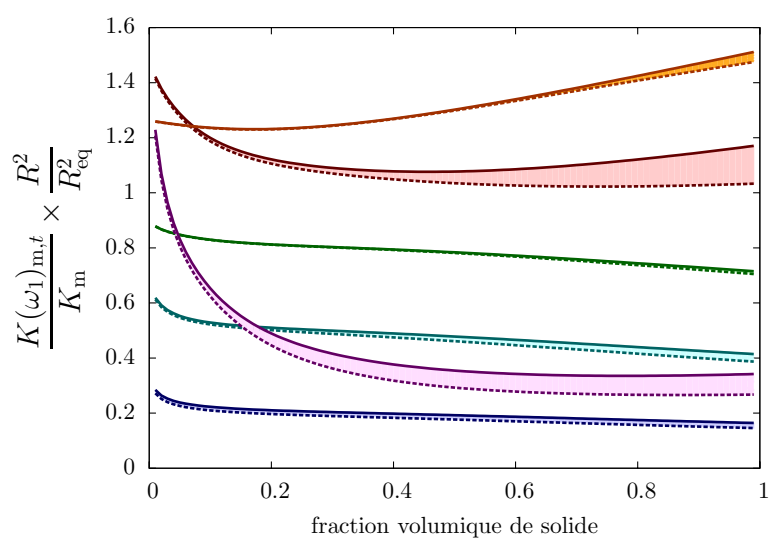
(a) $K(\omega_1)_{m,n}$ normal, c.l. mixtes(b) $K(\omega_1)_{m,n}$ normal (log), c.l. mixtes(c) $K(\omega_1)_{m,t}$ tangentiel, c.l. mixtes

FIG. 3.5: Encadrement de la perméabilité équivalente de la cellule sphéroïdale normalisée par la perméabilité de la cellule sphérique pour les conditions aux limites mixtes. Rapport d'aspect ω_1 du sphéroïde intérieur : bleu marine 20, bleu clair = 5, vert = 2, orange = 1/2, rouge = 1/5, violet = 1/20).

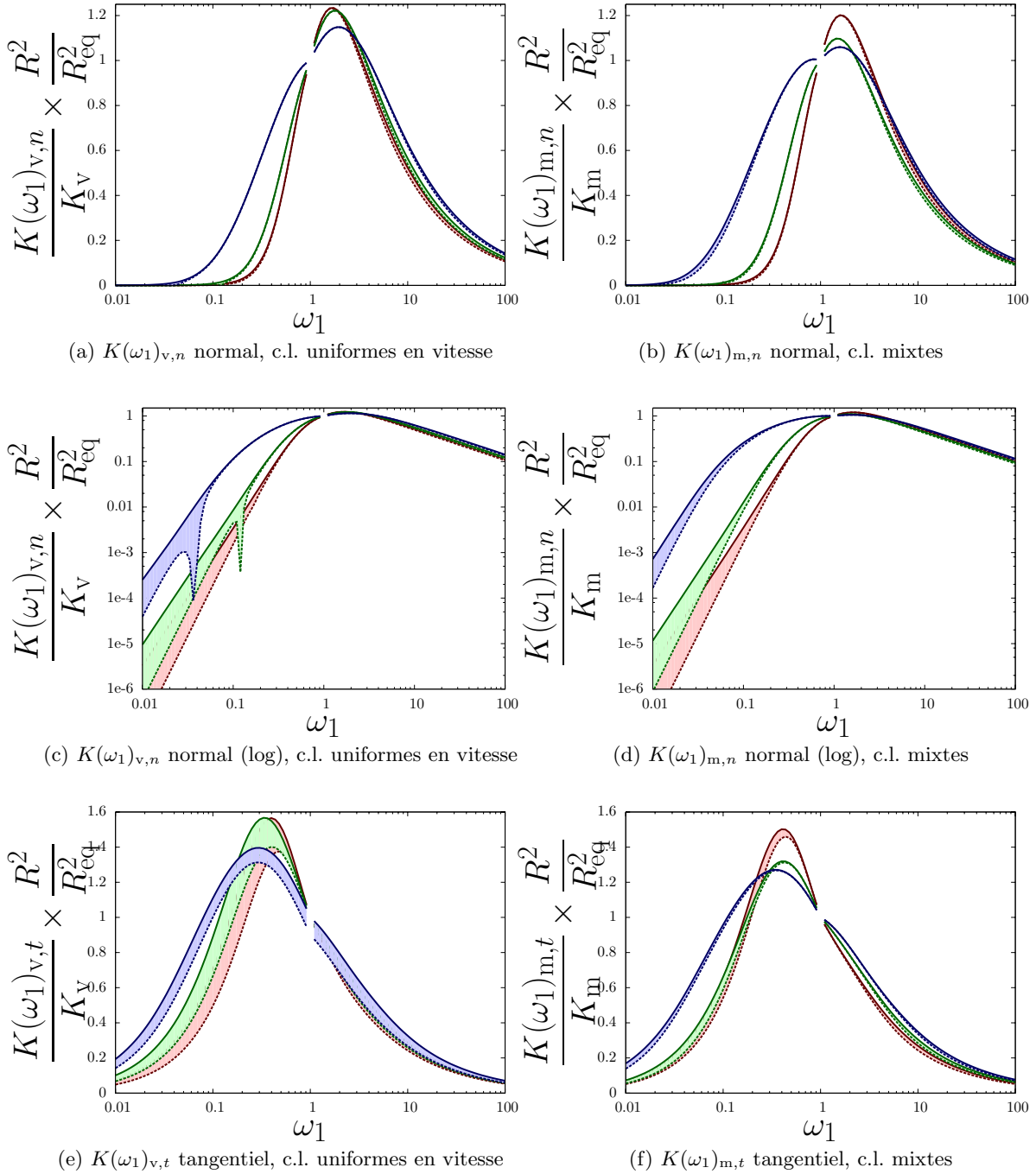
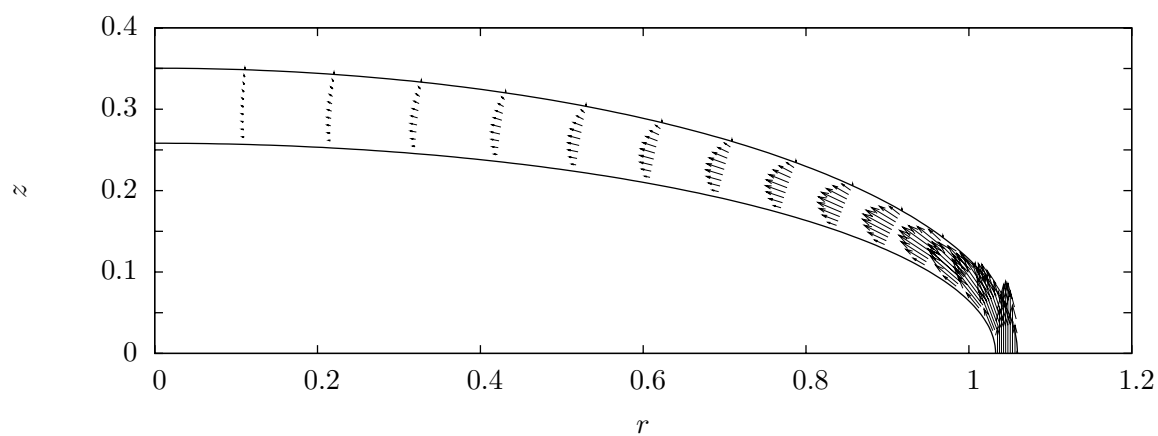
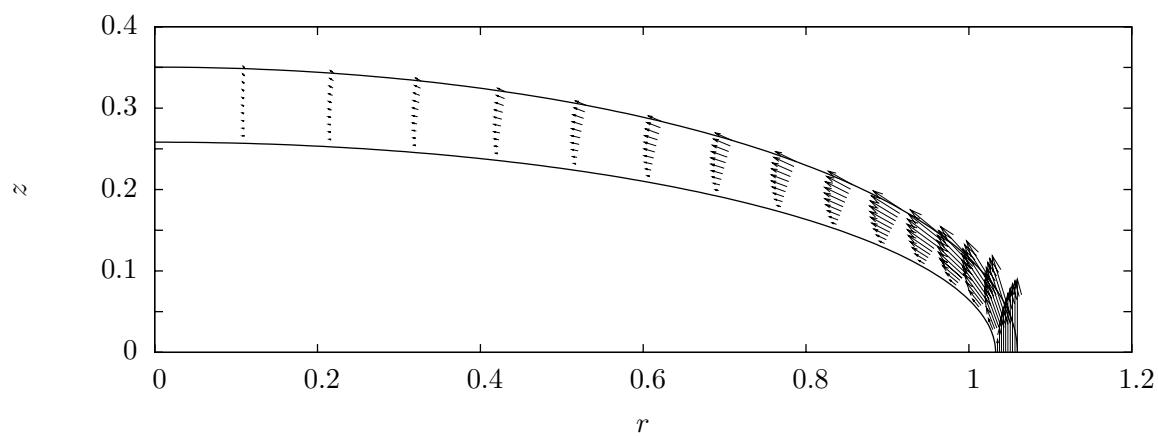


FIG. 3.6: Encadrement de la perméabilité équivalente de la cellule sphéroïdale normalisée par la perméabilité de la cellule sphérique, pour différentes fractions solides (bleu = 0.1, vert = 0.5, rouge = 0.9).



(a) Conditions aux limites uniformes en vitesse



(b) Conditions aux limites mixtes

FIG. 3.7: Effet des conditions aux limites sur le champ de vitesse pour écoulement axisymétrique entre deux sphéroïde confocaux oblates. Le rapport d'aspect de la particule solide est $1/4$, la fraction volumique de solide 0.7 et la demi distance focale $c=1$.

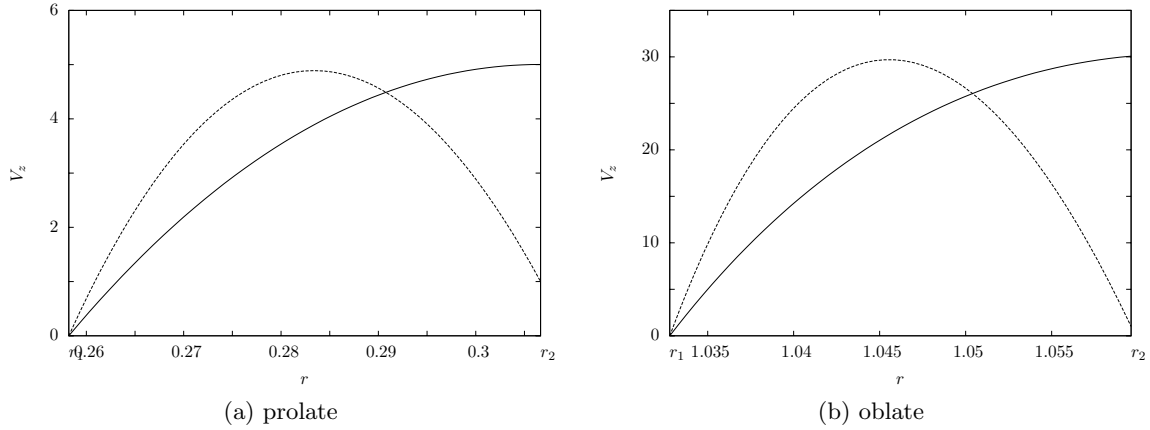


FIG. 3.8: Effet des conditions aux limites sur la composante axiale de la vitesse pour un écoulement axisymétrique entre deux sphéroïdes confocaux prolates ou oblates. Le rapport aspect de la particule solide est 4 ou 1/4, la fraction volumique de solide 0.7 et la demi distance focale $c=1$. La vitesse imposée sur le sphéroïde extérieur est $\mathbf{V} = 1\mathbf{e}_z$. Ligne pleine : conditions aux limites mixtes, pointillée : uniformes en vitesse.

Les conditions aux limites mixtes semblent plus adaptées pour capturer l'interaction entre plusieurs particules. En effet, supposons que l'on accole les solutions de deux cellules identiques avec la même orientation et disposées de sorte que le segment qui rejoint leur centre soit orthogonal à la direction de l'écoulement. Le profil de vitesse dans l'axe de l'écoulement (c'est à dire obtenu en ajoutant la symétrie par rapport à la droite verticale passant par r_2 Fig. 3.8) présente alors une forme quasi-parabolique pour les conditions aux limites mixtes, tandis qu'il a la forme d'un "m" pour les conditions aux limites uniformes en vitesse, ce qui est tout à fait improbable.

3.4.6 Perméabilité d'assemblages de grains anisotropes inter-pénétrables

Dans cette section, la capacité des cellules perméables équivalentes sphéroïdales à rendre compte de la perméabilité d'un assemblage de grains anisotropes inter-pénétrables est évaluée par une confrontation aux simulations numériques présentés Fig. 2.10 au chapitre précédent. Rappelons que les assemblages de ces simulations sont constitués de grains sphéroïdaux tous identiques et dont la loi d'orientation est isotrope.

La perméabilité du milieu granulaire est estimée par l'application du schéma auto-cohérent à un assemblage de cellules perméables équivalentes sphéroïdales identiques avec une loi d'orientation isotrope. La taille et le rapport d'aspect de la particule solide de la cellule perméable équivalente sont pris égaux à ceux des grains du matériau. Le sphéroïde extérieur de la cellule perméable équivalente est choisi tel que la porosité de la cellule soit égale à la porosité du matériau granulaire. La cellule perméable équivalente sphéroïdale a un tenseur de perméabilité isotrope transverse $\mathbf{K}(\omega_1, \omega_2) = K_n(\omega_1, \omega_2)\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + K_t(\omega_1, \omega_2)(\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})$.

La perméabilité homogénéisée est isotrope, de la forme $K_{ac}\mathbf{1}$ où K_{ac} est la solution de (3.14), qui prend la forme scalaire :

$$\frac{(K_n(\omega_1, \omega_2) - K_{ac})}{1 + S_n(\omega_2)(K_n(\omega_1, \omega_2)/K_{ac} - 1)} + \frac{2(K_t(\omega_1, \omega_2) - K_{ac})}{1 + S_t(\omega_2)(K_t(\omega_1, \omega_2)/K_{ac} - 1)} = 0 \quad (3.55)$$

avec $S_n(\omega_2)$ et $S_t(\omega_2)$ les composantes normale et tangentielle du tenseur d'Eshelby (3.7) du

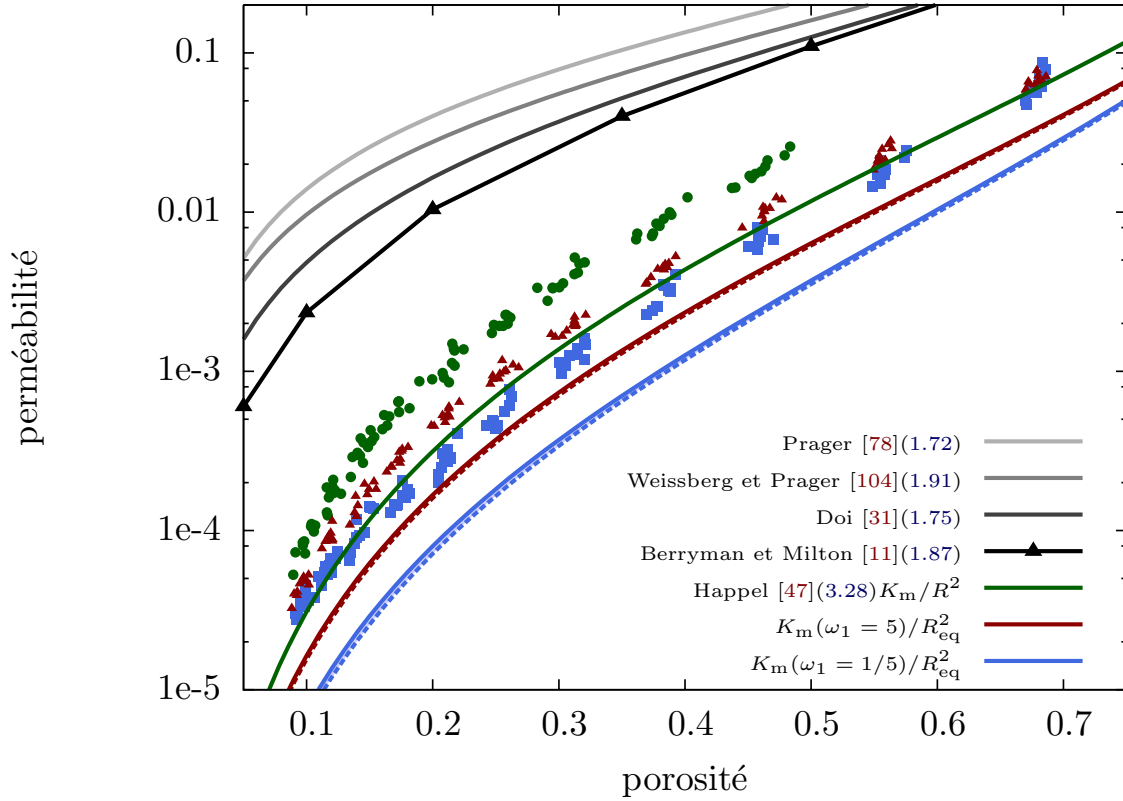


FIG. 3.9: Perméabilité d'assemblages de grains sphéroïdaux complètement inter-pénétrables. Tous les grains ont le même volume et les perméabilités intrinsèques sont normalisées par le carré du rayon des sphères. Pour les calculs par FFT : ronds verts = sphères, triangles rouges : prolates ($\omega = 5$), carrés bleus : oblates ($\omega = 1/5$). Courbes en niveaux de gris : bornes pour des sphères inter-pénétrables. Courbes en couleurs : estimations par les cellules perméables équivalentes sphéroïdales avec conditions aux limites mixtes.

sphéroïde extérieur de la cellule perméable équivalente. La perméabilité solution est

$$K_{ac} = \frac{-K_n - 2K_t + (S_t + 2S_n)(K_n + K_t) - \sqrt{[K_s + K_n + 2K_t]^2 - 4K_sK_n}}{2(S_t + 2S_n - 3)} \quad (3.56)$$

avec $K_s(\omega_1, \omega_2) = (S_t(\omega_2) + 2S_n(\omega_2))(K_n(\omega_1, \omega_2) - K_t(\omega_1, \omega_2))$

Les estimations obtenues par cette méthode sont confrontées aux simulations numériques Fig. 3.9. Seules les estimations basées sur les conditions aux limites mixtes sont présentées. De même que pour le milieu constitué de sphères complètement inter-pénétrables, les estimations par particules équivalentes sphéroïdales sous estiment la perméabilité des assemblages granulaires. Les raisons de cet écart sont présumées être les mêmes que celles exposées section 3.2.2. Une piste d'amélioration de l'estimation serait de prendre en compte la distribution non monodisperse des tailles de pores. En revanche, l'effet du rapport d'aspect est bien reproduit, ce qui présente un argument en faveur de la méthode des cellules perméables équivalentes.

3.5 Estimations basées sur l'écoulement de Poiseuille

Lorsque les pores sont plats (fissures, espace entre paquets de feuillets, joints de grains) ou idéalisés comme cylindriques (pores allongés), un problème auxiliaire adapté est l'écoulement de Poiseuille [7, 22, 36]. Le motif morphologique du problème auxiliaire est alors un pore cylindrique ou l'espace poreux entre deux plans de phase solide.

3.5.1 Ecoulement de Poiseuille avec glissement aux parois

Afin d'étudier l'effet du glissement d'un gaz aux parois sur la perméabilité, les problèmes de Poiseuille sont présentés dans le cas de la condition de glissement (1.92) à l'interface solide-fluide. Le problème classique de Poiseuille avec adhérence à l'interface solide-fluide correspond au cas particulier où le coefficient de glissement ζ est nul. Pour un gaz parfait, le coefficient de glissement peut être estimé par (1.93) dans le cadre de la théorie cinétique des gaz.

Écoulement entre deux plans

Le problème auxiliaire est défini dans l'espace entre les deux plans de normale \mathbf{e}_z situés en $z = \pm R$. Un gradient de la pression $\mathbf{grad} p = \alpha$ orthogonal à \mathbf{e}_z est appliqué au fluide newtonien de viscosité μ , par exemple $\mathbf{grad} p = \alpha \mathbf{e}_x$. À l'interface entre le gaz et le solide en $z = \pm R$, la vitesse est supposée être gouvernée par la condition de glissement aux parois (1.92). L'écoulement, supposé incompressible, vérifie ainsi le problème suivant :

$$\begin{aligned}
 \operatorname{div} \mathbf{v} &= 0 & (z \in [-R; R]) \\
 \mathbf{d} &= \operatorname{grad}^s \mathbf{v} & (z \in [-R; R]) \\
 \boldsymbol{\sigma} &= -p\mathbf{1} + 2\mu\mathbf{d} & (z \in [-R; R]) \\
 \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} &= -\operatorname{grad} p + \mu\Delta \mathbf{v} = \mathbf{0} & (z \in [-R; R]) \\
 \llbracket \mathbf{v} \rrbracket &= \frac{\zeta}{\mu} (\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} & (z = \pm R) \\
 p(x_2, y, z) - p(x_1, y, z) &= (x_2 - x_1)\alpha & (z \in [-R; R])
 \end{aligned} \tag{3.57}$$

Le champ de vitesse solution du problème auxiliaire (3.57) est

$$\mathbf{v} = -\frac{1}{\mu} \left[\frac{R^2 - z^2}{2} + \zeta R \right] \alpha \tag{3.58}$$

La moyenne de la vitesse du gaz entre les deux plans est ainsi reliée au gradient de pression par

$$\bar{\mathbf{v}} = -\frac{1}{\mu} \left(\frac{R^2}{3} + \zeta R \right) \alpha \tag{3.59}$$

Écoulement dans un tube de section circulaire

On considère maintenant l'écoulement à l'intérieur d'un tube cylindrique de section circulaire de rayon R et de normale \mathbf{e}_z . Le gradient de la pression est appliqué colinéairement à l'axe du cylindre $\mathbf{grad} p = \alpha \mathbf{e}_z$. À ces modifications près, le problème auxiliaire est défini comme (3.57). En coordonnées cylindriques, le champ de vitesse solution est

$$\mathbf{v} = -\frac{1}{2\mu} \left[\frac{R^2 - r^2}{2} + \zeta R \right] \alpha \mathbf{e}_z \tag{3.60}$$

3.5.2 Définition d'une cellule perméable équivalente

La deuxième étape est la définition d'une géométrie et d'un tenseur de perméabilité pour la cellule perméable équivalente. Si la définition d'une perméabilité transversale (resp. normale) est sans ambiguïté pour les pores plats (resp. cylindriques), l'attribution d'une perméabilité normale (resp. transversale) est problématique.

Pores plats

L'espace entre les deux plans peut être remplacé par un milieu Darcéen dont la perméabilité tangentielle dans le plan est

$$K_t = \frac{R^2}{3} + \zeta R = \frac{R^2}{3} \left(1 + \frac{3\zeta}{R} \right) \quad (3.61)$$

Suivant la forme consacrée par Klinkenberg [55], cette expression peut s'écrire à l'aide de (1.93) en fonction de la pression p du fluide :

$$K_t = K_t^\infty \left(1 + \frac{\beta}{p} \right) \quad \text{avec } K_t^\infty = \frac{R^2}{3} \quad ; \quad \beta = \frac{3\pi\mu\bar{v}_{\text{mol}}(2 - \vartheta)}{4\vartheta R} \quad (3.62)$$

Le coefficient de Klinkenberg β est indépendant de la pression de fluide. La loi de Klinkenberg prévoit que la perméabilité effective au gaz augmente lorsque le glissement augmente, ou de manière équivalente lorsque la pression diminue. Dans la limite des très fortes pressions, la perméabilité effective au gaz doit coïncider avec la perméabilité au liquide, car le coefficient de glissement (qui est de l'ordre de grandeur du libre parcours moyen d'une molécule de gaz) devient très faible devant R . Remarquons pour la suite que l'étude la variation de la perméabilité en fonction de ζ est équivalente à son étude en fonction de $1/p$ car ζ est proportionnel à $1/p$. Si l'on définit $\kappa = \zeta/R$ comme coefficient de Knudsen, la perméabilité devient :

$$K_t = K_t^\infty (1 + 3\kappa). \quad (3.63)$$

Il reste à attribuer une perméabilité équivalente normale et une géométrie au milieu perméable équivalent utilisé pour décrire le pore plat. La géométrie de la cellule perméable équivalente du pore plat est choisie comme un sphéroïde oblate dont le rapport d'aspect ω est petit devant 1. Bien que la perméabilité tangentielle (3.61) ait été établie pour $\omega = 0$, on effectuera l'approximation que cette forme de la perméabilité reste valide pour ω petit devant 1 mais non nul. Ce choix vise surtout à conférer une extension finie aux pores afin qu'ils ne traversent pas tout le domaine. Il faut alors considérer R dans (3.61) comme une taille de pore équivalente légèrement inférieure au demi petit axe de l'ellipsoïde oblate.

Pour une utilisation du sphéroïde perméable équivalent dans le schéma auto-cohérent, Barthélémy [7] préconise alors de vérifier $K_n \gg \omega^2 K_t$ pour éviter de créer des obstacles à l'écoulement. Pour "laisser le choix" au schéma auto-cohérent, [22] propose de choisir $K_n = \infty$. Un autre choix pourrait être de supposer que les pores plats ne modifient pas l'écoulement dans la direction normale au plan du pore, ce qui reviendrait à choisir $K_n = K_{\text{ac}}$ dans le schéma auto-cohérent.

Pores allongés

L'intérieur du tube peut être remplacé par un milieu darcéen dont la perméabilité normale dans l'axe est, sous la forme proposée par Klinkenberg et (1.93) :

$$K_n = K_n^\infty \left(1 + \frac{\beta}{p} \right) = K_n^\infty (1 + 4\kappa) \quad \text{avec } K_n^\infty = \frac{R^2}{8} \quad ; \quad \beta = \frac{\pi\mu\bar{v}_{\text{vol}}(2 - \vartheta)}{\vartheta R} \quad ; \quad \kappa = \frac{\zeta}{R} \quad (3.64)$$

La géométrie de la cellule perméable équivalente du pore allongé est choisie comme un sphéroïde prolata dont le rapport d'aspect ω est grand devant 1. L'attribution d'une perméabilité équivalente tangentielle à un pore allongé est une question ouverte. Contrairement au cas des pores plats, le choix $K_t = \infty$ n'est pas recevable. En effet, pour le schéma auto-cohérent, un assemblage de grains imperméables sphériques et de tels cylindres perméables avec $K_t = \infty$ avec une loi d'orientation isotrope fait apparaître une porosité au delà de laquelle la perméabilité est infinie. En revanche, supposer que les pores cylindriques ne modifient pas un écoulement tangential ($K_t = K_{ac}$) ne présente pas ce type de comportement divergent.

La "bibliothèque" de cellules équivalentes qui a été exposée aux sections 3.2, 3.3, 3.4 et 3.5 pour divers motifs morphologiques est maintenant mise à profit pour proposer quelques modèles simples qui visent à répondre à des problématiques d'intérêt pratique. Une première problématique est *l'effet Klinkenberg* dû au glissement aux parois : pour un gaz, la perméabilité intrinsèque effective dépend de la pression du gaz. Une deuxième problématique est la notion de *perméabilité relative*, c'est à dire la variation de la perméabilité effective à un premier fluide lorsque le réseau poreux est partiellement saturé d'un second fluide. Une troisième problématique, liée à la précédente est la notion de *pression de percée* du gaz à travers un échantillon initialement saturé en eau.

Pour aborder ces problématiques, deux modèles morphologiques simplifiés sont proposés à titre illustratif : un milieu composé d'une phase imperméable traversée par des fissures ou des pores plats, ainsi qu'un milieu composé uniquement de sphéroïdes perméables équivalents.

3.6 Modélisation de l'effet Klinkenberg

La validité de la correction de Klinkenberg pour les milieux très faiblement perméables est récemment remise en cause dans la littérature. Plusieurs raisons différentes sont avancées :

- Sur la base de simulations en dynamique moléculaire, Fathi *et al.* [39] remettent en cause pour des pores de taille nanométrique l'effet de glissement tel qu'il est décrit par la théorie cinétique des gaz.
- Suivant Moghadam et Chalaturnyk [69], l'écoulement de Poiseuille est trop idéalisé car il ne rend pas compte des gradients de contrainte tangentielle aux parois des pores. Les résultats (3.31) obtenus pour la cellule équivalente sphérique avec glissement aux parois viennent confirmer cette intuition.

Dans le cadre de ce travail, nous resterons dans le cadre d'un glissement aux parois décrit par la théorie cinétique des gaz. À l'aide du schéma auto-cohérent, quelques modèles simples sont proposés pour illustrer une déviation à la loi de Klinkenberg pour deux types de raisons :

- le caractère non uniforme de la contrainte tangentielle aux parois des pores, tel qu'il apparaît pour la cellule équivalente sphérique,
- l'hétérogénéité des tailles de pores.

3.6.1 Modèle basé sur l'écoulement de Poiseuille

Dans un premier temps, supposons que la perméabilité de tous les constituants suit une loi de la forme :

$$K(\zeta) = \tilde{K}R^2 + \zeta R. \quad (3.65)$$

Les pores plats dans lesquels l'écoulement est décrit par l'écoulement de Poiseuille avec glissement (3.61) en sont un exemple. Rappelons cette expression peut se mettre sous la forme $K^{\text{eff}} = K^{\text{int}}(1 + \beta/p)$ proposée par Klinkenberg, où β/p est proportionnel à ζ/R (3.62).

Dans la suite, on suppose que tous les pores sont plats et décrits par un sphéroïde oblate équivalent de rapport d'aspect unique $\omega \ll 1$. La perméabilité équivalente tangentielle d'un tel

sphéroïde est gouvernée par (3.61). La perméabilité intrinsèque normalisée par le carré du demi-espacement entre les plans dans l'écoulement de Poiseuille est notée $\tilde{K}_t = K_t(\zeta=0)/R^2$ ($= 1/3$). La perméabilité normale est choisie infinie, mais on montre que les mêmes tendances seraient obtenues dans la suite si l'on choisit $K_n = K_{ac}$.

De plus, les pores plats sont supposés de tailles disperses. Ainsi, si la perméabilité équivalente tangentielle de chaque pore suit la forme proposée par Klinkenberg, le coefficient de Klinkenberg, en $1/R$ (3.62), n'est pas le même pour tous les pores. L'interprétation des isothermes de désorption expérimentaux présentés au chapitre suivant Fig. 4.6 suggère que les tailles de pores s'étalent sur plusieurs ordres de grandeurs dans les roches argileuses. Pour simplifier, on supposera qu'une loi log-uniforme continue sur un domaine borné est une première approximation raisonnable de la distribution de densité volumique de tailles de pores. Soient R_1 le demi-écartement entre les parois du plus petit pore et R_2 celui du plus grand. La dispersion de la distribution est caractérisée par $\rho = R_2/R_1$. La distribution log-uniforme de tailles de pores est alors définie telle que la fraction volumique de pores dont le rayon est compris dans l'intervalle infinitésimal dR autour du rayon $R \in [R_1; R_2]$ est :

$$f(R) dR = \frac{1}{\ln \rho} d(\ln R) \quad (3.66)$$

Pour la distribution log-uniforme, le rayon médian est $R_m = \sqrt{R_1 R_2}$.

Tous les pores sont supposés décrits par le même rapport d'aspect. Pour chaque taille de pores, l'orientation des pores suit une loi isotrope. La phase solide est représentée par des grains sphériques imperméables. La perméabilité homogénéisée, estimée par le schéma auto-cohérent, est un tenseur isotrope $K_{ac}/\mu \mathbf{1}$, où K_{ac} est la perméabilité intrinsèque solution de (3.14). En utilisant les propriétés des tenseurs $\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$ et $\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$, (3.14) se résume ici à l'équation scalaire :

$$-(1 - \phi) \frac{9}{2} + \phi \int_{R_1}^{R_2} \left(\frac{1}{S_n} + 2 \frac{\tilde{K}_t R^2 + \zeta R - K_{ac}}{K_{ac} + S_t(\tilde{K}_t R^2 + \zeta R - K_{ac})} \right) \frac{dR}{R \ln \rho} = 0, \quad (3.67)$$

où le premier terme correspond aux inclusions sphériques imperméables, le second terme aux pores sphéroïdaux et ϕ est la porosité totale. Après intégration, la perméabilité homogénéisée est solution de l'équation

$$F(K_{ac}, \zeta) = \frac{9(1 - \phi)}{4\phi} - \frac{1}{2S_n} \quad (3.68)$$

avec

$$F(K_{ac}, \zeta) = \frac{1}{\ln(\rho) S_t (1 - S_t)} \left[\frac{\ln \left(S_t (\tilde{K}_t R^2 + \zeta R) + (1 - S_t) K_{ac} \right)}{2} - S_t \ln(R) \right. \\ \left. + \frac{\zeta S_t}{\sqrt{4\tilde{K}_t K_{ac} S_t (1 - S_t) - (S_t \zeta)^2}} \arctan \left(\frac{S_t (2\tilde{K}_t R + \zeta)}{\sqrt{4\tilde{K}_t K_{ac} S_t (1 - S_t) - (S_t \zeta)^2}} \right) \right]_{R_1}^{R_2} \quad (3.69)$$

Lorsque le glissement est nul, la perméabilité intrinsèque est explicite :

$$K_{ac}(\zeta = 0) = \tilde{K}_t R_m^2 \rho \frac{S_t}{1 - S_t} \frac{1 - \rho^{m-2}}{\rho^m - 1} \quad \text{où } m = S_t \frac{9S_n(1 - S_t) - \phi(9S_n S_t - 5S_n + 2S_t - 2)}{2\phi S_n} \quad (3.70)$$

La perméabilité normalisée par le carré du rayon médian est une fonction croissante de $\rho = R_2/R_1$ lorsque le glissement est nul. La pente de $K_{ac}(\zeta)$ en $\zeta = 0$ est donnée par $-\frac{\partial F}{\partial \zeta} / \frac{\partial F}{\partial K_{ac}}$. Le développement limité en $\zeta = 0$ au premier ordre de $K_{ac}(\zeta)$ solution de (3.68) peut se mettre sous une forme analogue à (3.61) :

$$K_{ac}(\zeta) = K_{ac}(\zeta = 0) \left(1 + 3 \frac{\zeta}{R_0} + o\left(\frac{\zeta}{R_0}\right) \right) \quad (3.71)$$

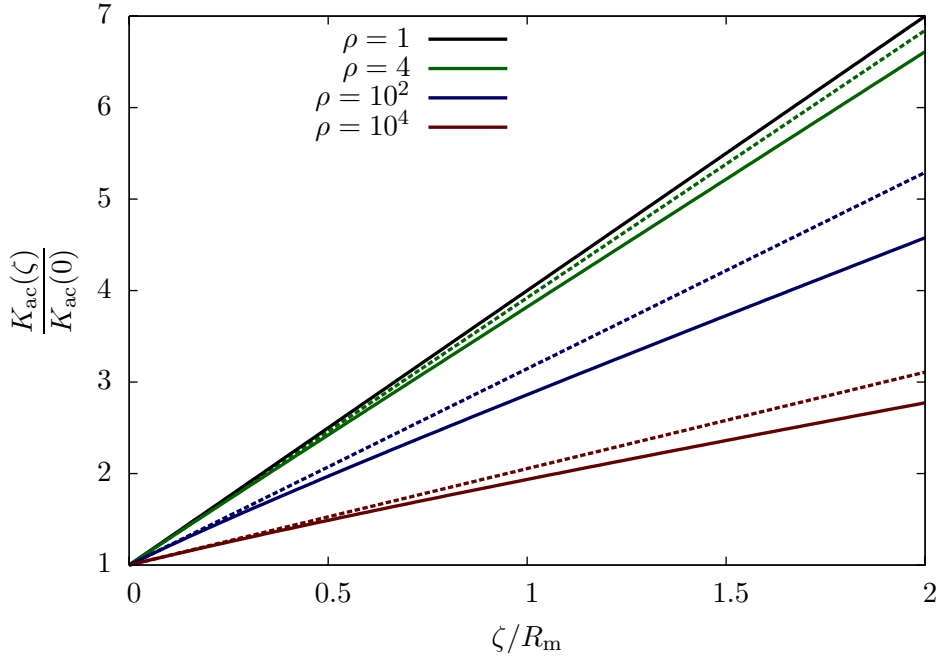


FIG. 3.10: Effet du glissement : $K_{ac}(\zeta)$ (3.68) (lignes pleines) et son développement limité à l'origine (3.71) (lignes pointillées) pour $R_m = 1$.

où le rapport R_0/R_m est la fonction qui croît lentement de 1 en $\rho = 1$ à ≈ 4 en $\rho = 10^5$ donnée par :

$$\frac{R_0}{R_m} = \frac{\sqrt{\rho}(1 - \rho^m)(\rho^m - \rho^2)}{(\rho^m(\rho^2 - 1)q(\arctan(\rho q) - \arctan(q)) - (\rho^m - 1)(\rho^m - \rho))\rho} \quad \text{où } q = \sqrt{\frac{1 - \rho^m}{\rho^m - \rho^2}} \quad (3.72)$$

Une comparaison entre $K_{ac}(\zeta)$ (3.68) et son développement limité à l'origine (3.71) est présentée Fig. 3.10 pour une porosité $\phi = 20\%$ et un rapport d'aspect $\omega = 1/20$ des pores. Si tous les pores ont la même taille ($\rho = 1$), la perméabilité est une fonction linéaire de ζ donc la forme de Klinkenberg est retrouvée à l'échelle macroscopique. En revanche lorsque $\rho > 1$ la perméabilité macroscopique ne suit plus exactement une loi de Klinkenberg car $K_{ac}(\zeta)$ diffère de son développement limité à l'ordre 1 à l'origine. Cependant, la non linéarité des courbes $K_{ac}(\zeta)$ n'est pas fortement marquée. En première approximation, la perméabilité macroscopique peut raisonnablement être décrite par une loi de Klinkenberg, où le coefficient de Klinkenberg apparent est déduit de (3.71). Pour ce choix, le coefficient de Klinkenberg apparent décroît en $1/R_0$ avec R_0 donné par (3.72).

3.6.2 Modèle basé sur les cellules perméables équivalentes sphériques

Les perméabilités des cellules perméables équivalentes (3.31) ont une dépendance en la distance r entre les sphères intérieures et extérieures de la forme

$$K^{\text{eff}} = \tilde{K}r^2 \left(1 + \frac{b\zeta/r}{1 + a\zeta/r} \right) = \tilde{K}r^2 \left(1 + b\frac{\zeta}{r} + o\left(\frac{\zeta}{r}\right) \right). \quad (3.73)$$

où a et b sont donnés par (3.32) et \tilde{K} dépend uniquement de la fraction volumique de solide de la cellule perméable équivalente. L'estimation par le schéma auto-cohérent de la perméabilité d'un assemblage de cellules perméables équivalentes sphériques de même fraction volumique et

de tailles qui suivent une loi log-uniforme est solution de :

$$\int_{r=R_1}^{R_2} \frac{\tilde{K} r^2 \left(1 + \frac{b\zeta}{r + a\zeta}\right) - K_{ac}}{\tilde{K} r^2 \left(1 + \frac{b\zeta}{r + a\zeta}\right) + 2K_{ac}} \frac{dr}{r} = 0 \quad (3.74)$$

Lorsque le coefficient de glissement ζ tend vers l'infini, la perméabilité homogénéisée tend une asymptote horizontale décrite par $K_{ac}(\zeta) \rightarrow (1 + b/a)K_{ac}(\zeta = 0)$. En procédant comme à la section précédente, le développement limité de $K_{ac}(\zeta)$ en $\zeta = 0$ est de la forme

$$K_{ac}(\zeta) = K_{ac}(\zeta = 0) \left(1 + b \frac{\zeta}{r_0} + o\left(\frac{\zeta}{r}\right)\right) \quad (3.75)$$

où $K_{ac}(\zeta = 0)$ et r_0 sont explicites. La fonction r_0/R_m ne dépend que de ρ et est lentement croissante, de 1 en $\rho = 1$ à ≈ 4 en $\rho = 10^4$. La Fig. 3.11 montre que l'on peut en première approximation remplacer $K_{ac}(\zeta)$ par une expression analogue à (3.31) :

$$K_{\text{approx}}(\zeta) = K_{ac}(\zeta = 0) \left(1 + \frac{b\zeta/r_0}{1 + a\zeta/r_0}\right), \quad (3.76)$$

avec

$$\frac{r_0}{R_m} = \frac{2\rho^{\frac{5}{6}}(\rho^{\frac{2}{3}} + 1)(\rho^2 - 1)}{(2\rho^{\frac{1}{3}} + 6\rho + 9\rho^{\frac{5}{3}} + 6\rho^{\frac{7}{3}} + 2\rho^3)\rho q(\arctan(\rho q) - \arctan(q)) - 2\rho^{\frac{4}{3}} + \rho^{\frac{5}{3}} - 2\rho^2 + 2\rho^{\frac{7}{3}} - \rho^{\frac{8}{3}} + 2\rho^3}$$

$$K_{ac}(\zeta = 0) = \tilde{K} R_m^2 \rho \frac{1 - \rho^{-4/3}}{\rho^{2/3} - 1} \quad ; \quad q = \sqrt{\frac{\rho^{-2/3}}{2\rho^{2/3} + 2}} \quad (3.77)$$

En particulier, l'asymptote horizontale de $K_{ac}(\zeta)$ en $\zeta \rightarrow \infty$ est ainsi retrouvée par l'approximation.

Pour conclure, cette section illustre que lorsque les perméabilités de tous les constituants suivent une même forme de dépendance au coefficient de glissement, il n'est pas garanti que la perméabilité homogénéisée présente une dépendance de forme analogue. Par exemple, si la perméabilité de tous les constituants suit une loi de Klinkenberg, la perméabilité homogénéisée peut ne pas dépendre linéairement du coefficient de glissement. Ainsi, une distribution de tailles de pores non monodisperse induit un écart à la loi de Klinkenberg. Cependant, en première approximation, la perméabilité homogénéisée peut être approchée par une expression de forme analogue à celle des constituants (par ex. (3.71) ou (3.76)), qui fait intervenir une taille de pore équivalente pour le glissement (cf. (3.72)).

3.7 Perméabilité relative et pression de percée

Dans cette section, on considère la situation où une partie du réseau poreux est occupée par un fluide supposé immobile (eau), tandis qu'un autre fluide (gaz) s'écoule dans la fraction restante du réseau poreux. L'objectif est de rendre compte de la diminution de perméabilité effective au gaz avec l'augmentation de la saturation en eau. Un intérêt particulier est prêté à l'état critique de saturation en eau pour lequel la perméabilité au gaz s'annule. La présentation est inspirée de [22, 33]

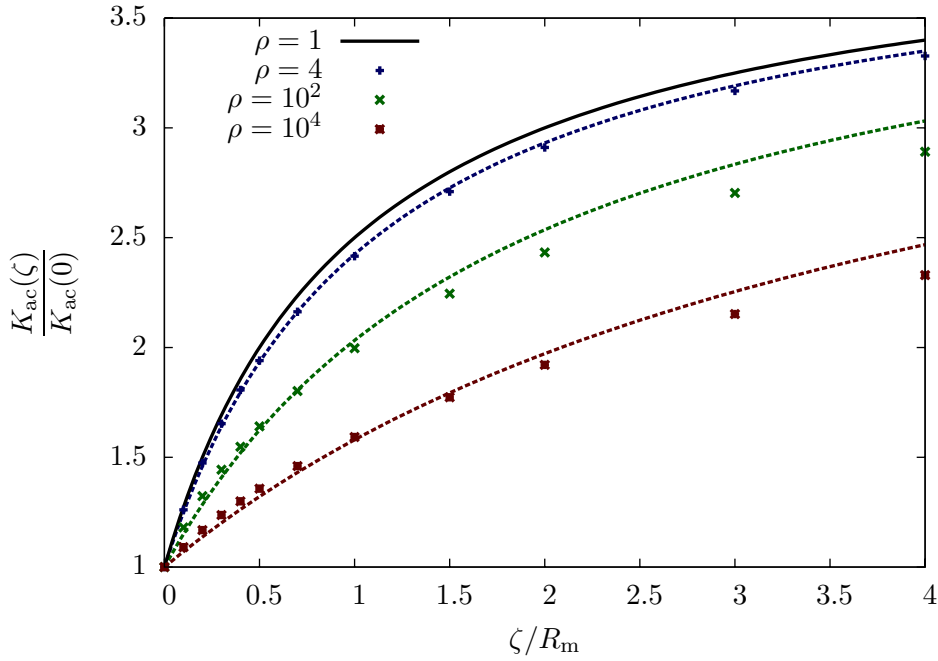


FIG. 3.11: Effet du glissement : $K_{ac}(\zeta)$ (3.74) (points) et son approximation (3.76) (lignes pointillées) pour $R_m = 1$, $a = 1$ et $b = 3$.

3.7.1 Modèle basé sur l'écoulement de Poiseuille

Description du modèle La saturation en eau s est définie comme la fraction du volume poreux occupée par l'eau. L'eau est supposée être le fluide mouillant et être immobile lors de l'écoulement du gaz. Lorsque l'échantillon est sec, $s = 0$ et lorsque l'échantillon est totalement saturé en eau, $s = 1$.

Reprenons le modèle présenté section 3.6.1, en l'absence de glissement aux parois. Dans la suite on appelle taille de pore le demi espace entre les deux parois d'un pore aplati. Pour simplifier la représentation, on suppose que tous les pores les plus petits sont remplis en priorité par l'eau (voir section 4.1.2). Ainsi, on suppose l'existence d'une taille de pore $R_\star \in [R_1; R_2]$ telle que la fraction volumique des pores de taille inférieure à R_\star est s . Pour la loi log-uniforme sur le domaine $[R_1; R_2]$, la saturation est liée à la taille R_\star par la relation bi-univoque :

$$s = \frac{\ln(R_2/R_\star)}{\ln(R_2/R_1)} \Leftrightarrow R_\star = R_2^s R_1^{1-s} \quad (3.78)$$

Ce modèle est très réducteur car il oblitère la description géométrique du ménisque à l'interface liquide-gaz. Il est ainsi plus rustique que les modèles de réseau de pores [17] ou que les simulations numériques qui décrivent exhaustivement la géométrie des interfaces fluide-gaz [98]. Notamment, il suppose qu'un pore ne peut être que soit complètement saturé en eau soit complètement sec. De plus, il ne permet pas de rendre compte de l'hystérésis entre la sorption et la désorption.

Perméabilité effective au gaz Les pores saturés en eau sont supposés imperméables au gaz. La perméabilité au gaz macroscopique est estimée par le schéma auto-cohérent (3.14), qui se résume ici à l'équation scalaire :

$$-(1-\phi)\frac{9}{2} - \phi s \left(\frac{1}{1-S_n} + \frac{2}{1-S_t} \right) + \phi \int_{R_\star}^{R_2} \left(\frac{1}{S_n} + 2 \frac{\tilde{K}_t R^2 - K_{ac}}{K_{ac} + S_t(\tilde{K}_t R^2 - K_{ac})} \right) \frac{dR}{R \ln \rho} = 0, \quad (3.79)$$

où le premier terme représente la phase solide, le second terme les pores saturés (imperméables au gaz) et le troisième terme les pores non saturés (perméables au gaz). Après intégration, la solution est explicitement donnée par :

$$K_{ac}(s) = \tilde{K}_t R_m^2 \frac{\rho S_t}{1 - S_t} \frac{1 - \rho^{2(s-1)+m(s)}}{\rho^{m(s)} - 1} \quad (3.80)$$

avec

$$m(s) = S_t(1 - S_t) \left[\frac{s}{S_n(1 - S_n)} + \frac{9S_n(1 - S_t) - \phi(9S_n S_t - 5S_n + 2S_t - 2)}{2\phi S_n(1 - S_t)} \right] \quad (3.81)$$

L'expression (3.80) permet d'étudier l'effet du rapport d'aspect des sphéroïdes oblates utilisés pour décrire les pores plats, de la porosité, de la saturation et de la dispersion de la distribution de tailles de pores sur la perméabilité.

Tout d'abord, le seuil de percolation du schéma auto-cohérent permet de rendre compte d'une saturation critique au delà de laquelle la perméabilité au gaz est nulle. La saturation critique s_c est solution de

$$2(s_c - 1) + m(s_c) = 0 \quad (3.82)$$

La saturation critique ne dépend que du rapport d'aspect des pores et de la porosité. En particulier, une diminution de porosité entraîne une diminution de la saturation critique s_c tandis qu'une diminution du rapport d'aspect entraîne une augmentation de s_c .

Pression de percée Tentons de mettre à profit le seuil de percolation sur la perméabilité effective au gaz pour proposer un moyen de rendre compte du phénomène de pression de percée.

D'après la loi de Laplace, dans un pore plat de taille R , la pression capillaire P_c ou différence de pression entre le gaz (P_g) et l'eau (P_l) supposée parfaitement mouillante est donnée par $P_c = P_g - P_l = \gamma/R$ où γ est la tension superficielle à l'interface liquide-gaz. Supposons qu'un échantillon de matériau initialement saturé en eau soit installé dans une cellule d'essai et mis en contact sur la face aval avec de l'eau à la pression P_l , et sur la face amont avec du gaz à la pression P_g initialement égale à P_l . On appelle *pression de percée* la différence de pression entre le gaz et le liquide qu'il faut appliquer pour observer un écoulement de gaz sur la face aval de l'échantillon. D'après le modèle simplifié considéré et la loi de Laplace, à mesure que la pression de gaz augmente, tous les pores de rayon supérieurs à $\gamma/(P_g - P_l)$ sont supposés vidangés par perméation de l'eau vers l'aval de l'échantillon. La vitesse de montée en pression est supposée très faible devant le temps de perméation de l'eau de sorte à pouvoir négliger les gradients de pression dans l'eau lors de l'application de la loi de Laplace. On travaille sous hypothèse que la saturation en eau est alors homogène dans tout l'échantillon. En particulier, on suppose que la percée du gaz ne se fait pas par digitation. Le gaz ne peut alors perméer à travers l'échantillon que lorsque $P_g - P_l$ est tel que la saturation en eau a décru jusqu'à la saturation critique s_c . La percée a lieu lorsque $P_g - P_l$ est supérieur à $\gamma/R_*(s_c)$, où $R_*(s_c)$ est la valeur de la taille de pore qui correspond par (3.78) à la saturation critique (3.82) associée au seuil de percolation. Le présent modèle permet donc, via le seuil de percolation du schéma auto-cohérent, de rendre compte du phénomène de pression de percée. La pression de percée prend ici la valeur $\gamma/R_*(s_c)$.

Perméabilité relative L'expression (3.80) permet d'étudier la perméabilité relative en fonction de la saturation partielle du matériau. La Fig. 3.12 illustre que les allures de courbes de perméabilité relative peuvent être très variées. Outre la porosité et le rapport d'aspect des sphéroïdes, l'allure de la courbe de perméabilité relative est sensible à la distribution de tailles de pores. Il serait donc intéressant d'étudier d'autres lois de distribution des tailles de pores, car la loi log-uniforme ne rend pas compte de possibles pics de distribution de tailles.

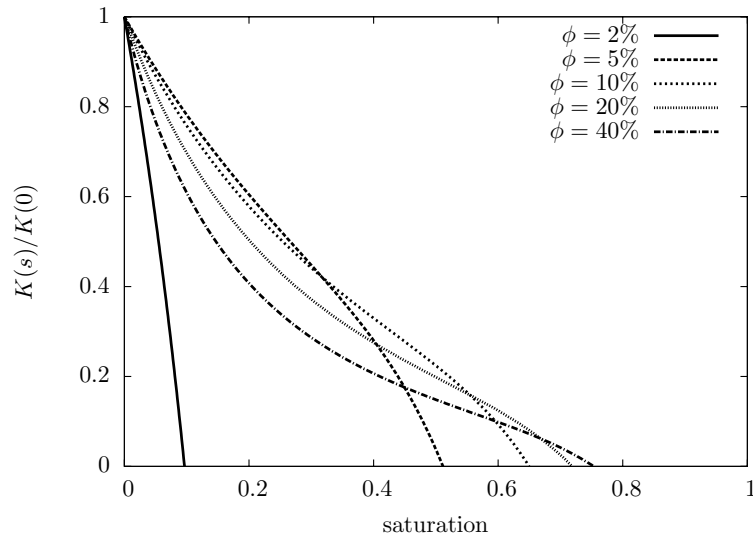
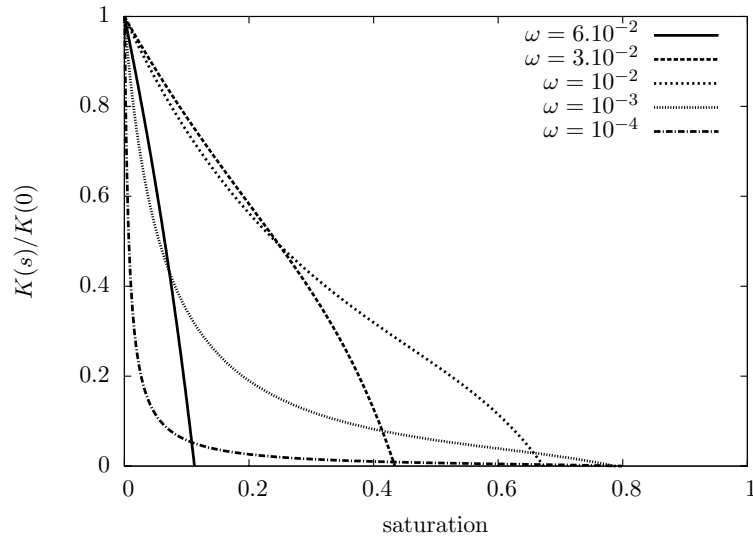
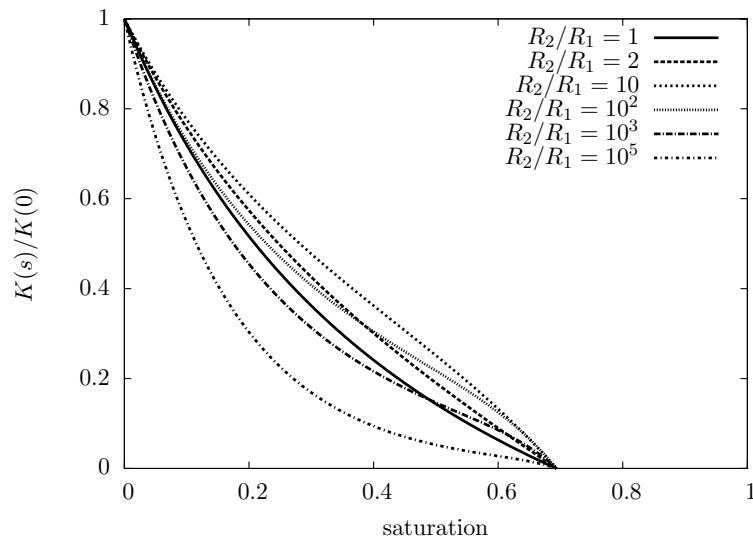
(a) porosité ϕ (b) rapport d'aspect ω (c) dispersion de la distribution $\rho = R_2/R_1$

FIG. 3.12: Sensibilité de l'estimation de la perméabilité relative à l'aide de (3.80) aux paramètres du modèle : (a) ϕ avec $\omega = 1/100$ et $R_2/R_1 = 100$ (b) ω avec $\phi = 0, 12$ et $R_2/R_1 = 100$ (c) R_2/R_1 avec $\phi = 0, 12$ et $\omega = 1/120$.

3.7.2 Modèle basé sur les cellules perméables équivalentes sphéroïdales ?

On peut s'interroger sur la capacité d'un modèle composé de cellules perméables équivalentes sphériques ou sphéroïdales à rendre compte efficacement de la perméabilité relative d'un milieu granulaire. En effet, la transposition directe du modèle utilisé pour les pores plats reviendrait à supposer que les cellules les plus petites sont totalement saturées en eau, tandis que les plus grandes ne sont occupées que par le gaz. Or en réalité, la phase fluide va préférentiellement se localiser au niveau des angles formés par l'intersection de plusieurs grains. On se heurte donc à un problème majeur lié au motif morphologique utilisé qui ne comporte qu'un grain.

Cependant, dans la limite où la fraction volumique de solide d'une cellule perméable équivalente tend vers 1, il a été montré section 3.2.2 que l'utilisation des conditions aux limites mixtes permet de retrouver l'inclusion sphérique composite avec noyau imperméable et interface perméable qui a été présentée dans [33]. Cette dernière est bien adaptée à la modélisation des matériaux tels que les grès à grains fins dans lequel l'écoulement est localisée dans les joints entre grains de silice. Lorsque ce type de matériau est partiellement saturé, la phase liquide est aussi préférentiellement localisée dans les joints de grains, de sorte que la transposition de la méthode exposée pour les pores plats reste raisonnable. Il serait alors intéressant d'évaluer si les cellules perméables équivalentes sphéroïdales avec une fraction volumique de solide proche de 1 sont de bonnes candidates à la modélisation de la perméabilité relative de tels matériaux à grains anistropes et joints de grains qui régissent l'écoulement.

Dans ce chapitre, nous avons tenté de proposer des outils pour construire des modèles micromécaniques d'estimation de la perméabilité à partir de caractéristiques morphologiques de la microstructure. Malgré une certaine analogie entre les équations de champs d'un écoulement de Stokes et celles de l'élasticité linéaire incompressible, les différences de conditions aux limites et de nature des lois de comportement homogénéisées rendent caduque toute tentative de construire des schémas d'homogénéisation de la perméabilité analogues aux schémas classiques en élasticité linéaire basés sur le problème d'Eshelby.

Le concept de cellule perméable équivalente permet de proposer une alternative qui semble mieux capturer la perméabilité de milieux granulaires simples que les bornes présentées au chapitre 1. Nous nous sommes efforcés d'étendre les travaux existants à la prise en compte de glissement aux parois ou d'anisotropie des grains de la phase solide. Dès que l'on s'écarte de la géométrie sphérique, la complexité mathématique empêche de donner une expression explicite de ces estimations. Cependant, plusieurs stratégies ont été développées pour évaluer ou encadrer rapidement les valeurs des perméabilités équivalentes lorsqu'elles ne sont pas explicites.

Le chapitre se termine sur quelques exemples illustratifs d'utilisation des outils développés pour construire des modèles micromécaniques qui permettent de rendre compte de phénomènes de glissement aux parois type Klinkenberg ou autres, ainsi que de la perméabilité relative au gaz et d'une saturation critique d'annulation de la perméabilité effective au gaz. Ces exemples n'ont pas vocation à être représentatifs de la morphologie de l'espace poreux d'une roche argileuse, qui est très certainement bien plus complexe.

* *

*

Chapitre 4

Caractérisation expérimentale de roches argileuses

Résumé : *Les objectifs de la caractérisation expérimentale présentée dans ce chapitre sont d'évaluer les capacités de rétention de gaz des roches de couverture et de production de gaz des roches mères. Une des grandes difficultés de cette caractérisation est la très faible perméabilité des matériaux étudiés, qui allonge considérablement les temps de mesures. Dans un premier temps, deux méthodes de mesures de la porosité sont comparées : à l'eau sans confinement, classique ou au gaz sous confinement, plus originale. Des courbes de pression capillaire sont établies à partir d'isothermes de sorption/désorption d'eau et interprétées pour quantifier la finesse des pores. Dans un deuxième temps, la perméabilité au gaz est évaluée en fonction de la saturation en eau et de la pression de confinement. La sensibilité de la perméabilité au gaz au phénomène de glissement aux parois est détaillée. En complément pour les roches de couverture, des mesures de perméabilité à l'eau puis de pression de percée sont menées pour évaluer leur qualité de couverture. Dans un troisième temps, des modifications des propriétés élastiques dues à la saturation sont mises en évidence, et quelques propriétés poro-mécaniques sont évaluées.*

Sommaire

4.1	Matériaux et dispositifs expérimentaux	90
4.1.1	Origines, aspect et préparation des matériaux	90
4.1.2	État sec, saturé et partiellement saturé	93
4.1.3	Confinement en cellule et dispositifs d'injection de gaz	95
4.1.4	Presse d'essais mécaniques et jauges de déformation	96
4.2	Méthodes expérimentales	96
4.2.1	Caractérisation du réseau poreux	96
4.2.2	Perméabilités intrinsèque et relative au gaz	98
4.2.3	Pression de percée	102
4.2.4	Élasticité : effet de la saturation	102
4.2.5	Poro-mécanique	102
4.3	Résultats	103
4.3.1	Caractérisation du réseau poreux	103
4.3.2	Perméabilités effective, intrinsèque et relative au gaz	105
4.3.3	Propriétés poro-mécaniques	112

puits	usage	origine	stratigraphie	profondeur	état conservation	particularité
LB	gaz	Lingen, Allemagne	Wealden	814 à 897 m	dégradé, sec	très fissuré
LW	gaz	Lingen, Allemagne	Posidonia	984 m	dégradé, sec	légères fissures
LRS	gaz	Lingen, Allemagne	Posidonia	2063 m	sec	sain
SK2	gaz	Skelbro, Danemark	Alum	10 à 40 m	sec	riche en MO
cap1	couverture	n.c.	n.c.	452 m	bon	très carbonaté
cap2	couverture	n.c.	n.c.	419 m	excellent	non induré

TAB. 4.1: Informations générales sur les carottes utilisées.

Les résultats expérimentaux présentés dans ce chapitre ont été menés sur une grande variété de roches argileuses. Les carottes utilisées proviennent de divers puits en Europe et sont issues de profondeurs entre 10 et 2000 m. Ces roches argileuses ont été carottées pour un des deux objectifs industriels suivant :

- la caractérisation de leur potentiel pour la production de gaz naturel : ce sont alors des *roches mères* (ou “shale gas”).
- l’évaluation de leur capacité de rétention pour le stockage de gaz : ce sont alors des *roches de couvertures* (ou “caprocks”).

Le potentiel de production des roches mères est principalement déterminé par la quantité de gaz en place et la vitesse de sa récupération. La quantité de gaz en place est conditionnée par la porosité et l’adsorption du gaz aux parois, tandis que la vitesse de récupération est gouvernée par la perméabilité au gaz. La production potentielle de gaz à partir d’une roche est d’autant meilleure que la porosité, l’adsorption et la perméabilité sont élevées.

Au contraire, une bonne roche de couverture est caractérisée par une perméabilité au gaz très faible et une pression élevée de percée du gaz à travers le réseau poreux saturé en eau.

4.1 Matériaux et dispositifs expérimentaux

4.1.1 Origines, aspect et préparation des matériaux

Provenance et aspect macroscopique La table 4.1 fournit un résumé des provenances des carottes. La Fig. 4.1 illustre une partie des types de roches étudiés.

- Le premier type de roche mère étudié provient d’anciens carottages effectués dans la région de Lingen en Allemagne, dans les couches stratigraphiques Posidonia et Wealden entre 800 et 2000 m de profondeur. Les matériaux, exposés à l’air depuis plus de 20 ans, sont globalement dans un état dégradé. Pour certaines carottes, la dessiccation a induit une fissuration parallèle au plan de dépôt. Les roches reçues sont très diverses, mais seules les carottes provenant des puits LB, LW et LRS (table 4.1), moins dégradées visuellement, sont retenues pour l’étude.
- Le second type de roche mère provient du forage scientifique Skelbro-2 (abrégé SK2) réalisé en 2010 au Danemark dans la couche stratigraphique Alum, qui est presque affleurante car le puits ne descend qu’à 40 m. La roche est très riche en matière organique (plus de 10% de MO) et surmature, c’est à dire que la matière organique a été trop chauffée au cours de son histoire géologique pour contenir encore un potentiel pétrolier ou gazier. La roche est macroscopiquement très uniforme, sans hétérogénéité visible à cette échelle et laisse une poudre noire au toucher.
- Deux carottes différentes de roches de couvertures ont été étudiées. Leur provenance n’est pas communiquée, et les noms banalisés “cap1” et “cap2” seront utilisés pour y référer dans la suite. Les carottes cap1 et cap2 sont issues respectivement de 452 et 419 m de profondeur. La carotte cap1 a été sélectionnée car elle est très carbonatée, ce qui facilite la préparation des échantillons. Elle présente un aspect homogène, non fissuré macroscopiquement.

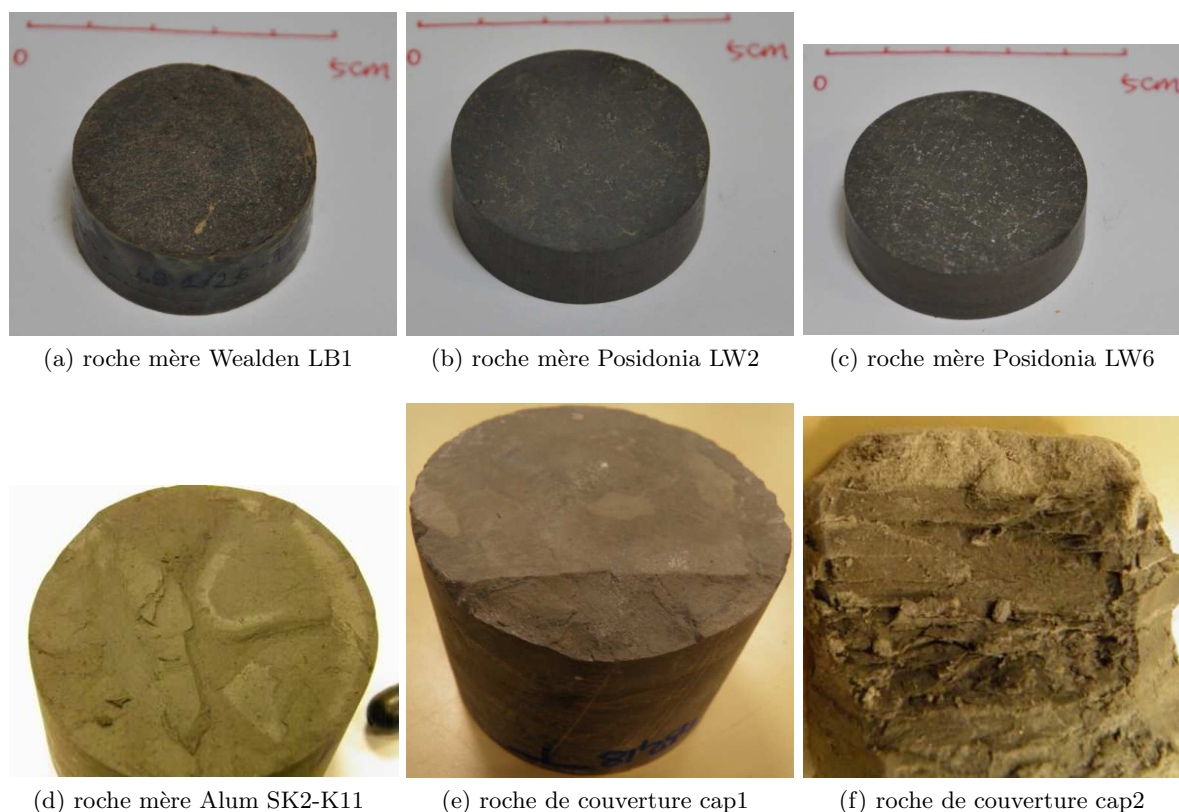


FIG. 4.1: Aspect macroscopique de quelques roches étudiées.

piquement. Elle représente une roche relativement perméable pour une couverture (toutes proportions gardées). La carotte cap2 n'est pas indurée (molle, se détache à la main) et constituée d'une argile traversée par des lentilles silteuses d'étendue centimétrique. Les deux carottes ont été reçues scellées, encore saturées et dans un très bon état de conservation.

Aspect microscopique La Fig. 4.2 montre des observations au microscope électronique qui ont été réalisées par Bertrand Van de Moortèle et Gilles Dromart (ENS Lyon & Tharsis Energy). Les échantillons ont été coupés et polis afin d'obtenir une surface relativement plane, puis découpée par abrasion ionique (FIB). Les clichés sont d'une résolution de l'ordre de la dizaine de nanomètres par pixel.

La roche de couverture cap1 est majoritairement constituée d'amas de nodules de carbonates, qui apparaissent en gris clair. L'interprétation de cette image par leurs auteurs est que les nodules de carbonates se sont progressivement développés au cours de la diagenèse de la roche et ont repoussé les particules argileuses (gris foncé) à leur périphérie. La porosité connectée (noir) se concentre à la périphérie des nodules carbonatés et au sein de la phase argileuse. La taille des amas de nodules de carbonates est de l'ordre de 1 à 15 μm , celle des pores entre carbonates de l'ordre de 0,1 à 0,5 μm et les liserés argileux ont une épaisseur de 0,5 à 1,5 μm et une longueur de 1 à 5 μm .

La microstructure de la roche mère SK2 de l'Alum est très hétérogène. La matière organique est présente à toutes les échelles et mêlée aux phases minérales. De nombreux silts de quartz de 7 à 10 μm , quelques silts d'anatase (TiO_2) et des amas de pyrite framboïdale sont pris dans une matrice constituée d'argiles et de matière organique. Un fait surprenant est qu'aucune porosité n'est visible, même dans la matière organique qui, très mature, devrait présenter un

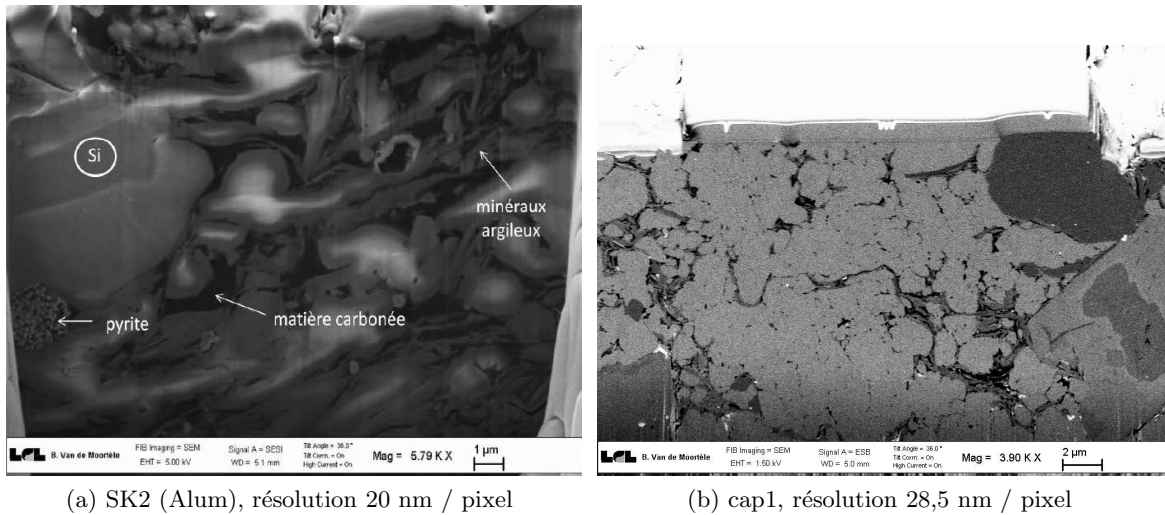


FIG. 4.2: Images au microscope électronique, réalisées par Bertrand Van de Moortèle (ENS Lyon) et Gilles Dromart (Tharsis Energy) après préparation de surfaces par polissage et abrasion au FIB.

réseau poreux [68]. Une hypothèse avancée par les auteurs de cette image est que la roche ait été soumise à une compaction tardive entraînant une déformation ductile importante qui a refermé la porosité.

Composition La composition minérale et le contenu en matières organiques total des roches mères étudiées sont présentés dans la table 4.2. Les roches comportent une majorité de minéraux argileux, complétés d’inclusions silteuses de quartz ou de carbonates. La pyrite, associée à présence de matière organique, est fréquemment retrouvée et se présente sous forme d’amas de grains cubiques (pyrite “framboïdale”). L’hydratation de l’anhydrite en bassanite ou en gypse induit un gonflement des cristaux qui peut d’être à l’origine de la fissuration de certains échantillons. Des cristaux de gypse ont en effet été observés au microscope électronique sur des plans de fissuration naturels. Du fait de leur contenu élevé en matière organique, les roches étudiées méritent bien l’appellation de roche mère (d’hydrocarbures).

Préparation des échantillons La plupart des essais nécessite la confection d’échantillons cylindriques. À cet effet, les échantillons sont prélevés par carottage dans les lots reçus puis découpés à la scie à fil. Seule la roche cap2 ne suit pas ce protocole car elle n’est pas indurée : elle est prélevée à l’emporte-pièce et tronçonnée au couteau. Ces procédés permettent d’obtenir une section bien cylindrique, dont le diamètre d peut être mesuré au pied à coulisse avec une précision de $\Delta d = 0,05$ mm. Pour les matériaux indurés, une découpe à la scie à fil à sec permet de tronçonner les cylindres à la longueur désirée. Cependant, malgré les précautions prises, les faces ne sont généralement pas rigoureusement perpendiculaires à l’axe du cylindre. Les faces n’ont pas été retravaillées à la rectifieuse afin de limiter l’endommagement de l’échantillon induit par la préparation. Après découpe, les faces présentent une légère ondulation inférieure au millimètre, attribuée aux aller-retours de la scie. Cette ondulation est ensuite atténuée par un polissage manuel au papier abrasif. La hauteur h de l’échantillon est prise comme la moyenne des deux mesures au pied à coulisse les plus extrêmes, afin de tenir compte de la faible inclinaison des faces par rapport à la normale à l’axe du cylindre. La précision sur la hauteur est de l’ordre de $\Delta h = 0,1$ mm. Le volume total V de l’échantillon en est déduit par $V = \pi h d^2 / 4$ avec une incertitude relative $\Delta V / V = \Delta h / h + 2 \Delta d / d$.

Le processus de préparation est une source d’endommagement pour les échantillons. Par

phase minérale (% masse)	LB1-18 ⁽¹⁾	LB1-26 ⁽²⁾	LW2 ⁽²⁾	LW6 ⁽¹⁾	LRS4 ⁽²⁾	SK2-K13 ⁽¹⁾
illite/smectite/muscovite	36,6	61,9	57,2	30,1	32,9	52,1
chlorite ((Fe,Mg,Al) ₆ (Si,Al) ₄ O ₁₀ (OH) ₈)	3,2	7,9	5,3	2,5	-	4,2
kaolinite (Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄)	8,2	5,1	8,7	30,9	5,1	3,0
quartz (SiO ₂)	13,8	10,9	16,2	17,5	15,6	21,6
calcite (CaCO ₃)	1,0	0,9	1,7	2,3	32,1	-
dolomite (CaMg[CO ₃] ₂)	-	-	0,8	-	3,8	-
sidérite (FeCO ₃)	-	1,9	-	-	-	-
pyrite (FeS ₂ cubique)	2,9	3,8	2,8	6,0	6,1	8,6
marcasite (FeS ₂ orthorhombique)	-	-	-	-	-	0,8
gypse (CaSO ₄ -2H ₂ O)	1,8	2,8	3,4	7,9	1,3	0,8
bassanite (CaSO ₄ -0,5H ₂ O)	1,4	-	-	1,1	-	-
anhydrite (CaSO ₄)	-	1,3	-	-	-	-
albite (NaAlSi ₃ O ₈)	-	1,7	1,7	-	1,6	-
K-feldspars (KAlSi ₃ O ₈)	-	1,5	1,4	-	0,8	7,8
anatase (TiO ₂)	0,6	-	-	1,1	-	1,4
rutile (TiO ₂ , >700°C)	0,6	0,4	0,2	0,5	0,2	0,7
apatite (Ca ₅ [PO ₄] ₃ (OH,Cl,F))	-	-	0,8	-	0,6	-
amorphe et n.d.	29,9	-	-	-	-	-
matière organique	13,5	12,7	3,6	?	8,8	12-13 ⁽³⁾

TAB. 4.2: Compilations des compositions minéralogiques estimées par diffraction aux rayons X et des analyses RockEval réalisées par : ⁽¹⁾ l'Institut des Sciences de la Terre à l'Université J. Fourier (Grenoble) et ⁽²⁾ le RWTH de l'Université de Aachen (LEK). ⁽³⁾ : rapports GASH et Tharsis-Energy.

exemple, les matériaux les plus fissurés se sont retrouvés réduits en copeaux à l'issue du carottage. Il est probable que la carottage ait induit ou amplifié une micro-fissuration de certains échantillons.

4.1.2 État sec, saturé et partiellement saturé

Afin d'étudier l'impact de la saturation en eau sur les propriétés de transfert et mécaniques de la roche, différents états de saturation sont obtenus par séchage, immersion dans l'eau ou équilibrage avec une atmosphère dont l'humidité relative est imposée. Les masses des échantillons sont suivies à l'aide d'une balance avec une précision $\Delta m = 0,01$ g.

État sec Les échantillons sont placés dans une enceinte climatique qui réalise un séchage par étuve à 60°C. L'humidité relative dans l'enceinte n'est pas rigoureusement nulle mais très faible (de l'ordre de 5%). La masse de l'échantillon se stabilise en deux à quatre semaines. L'état alors obtenu est choisi comme état sec de référence. Une température de séchage supérieure (105°C) permettrait une dessiccation plus complète de l'échantillon. Toutefois, elle s'accompagnerait probablement de micro-fissuration, entraînant une modification irréversible des propriétés étudiées par la suite.

État saturé Les échantillons sont placés dans une enceinte hermétique en contact avec de l'eau déminéralisée. Le vide est maintenu dans la partie supérieure de l'enceinte par l'intermédiaire d'une pompe. Après 24h, la masse de l'échantillon est stable (vérifié par des mesures à 48h et 72h). Cet état est pris comme état totalement saturé de référence.

État partiellement saturé Différents états de saturation intermédiaires sont obtenus par équilibrage avec une atmosphère dont l'humidité relative est contrôlée.

solution saline	humidité relative	pression capillaire (MPa)	rayon cylindre (nm)
chlorure de Lithium	11 %	298,6	0,49
carbonate de Potassium	43 %	114,2	1,27
bromure de Sodium	59 %	71,39	2,04
chlorure de Sodium	73 %	42,58	3,42
chlorure de Potassium	85 %	21,99	6,62
nitrate de Potassium	92 %	11,28	12,9
sulfate de Potassium	98 %	2,733	53,3
-	99 %	1,360	107
eau pure	100 %	0	-

TAB. 4.3: Humidités relatives en équilibre avec des solutions salines dissolues à saturation dans l'eau pure. Pressions capillaires correspondantes selon la loi de Kelvin entre l'air et l'eau liquide. Valeur du rayon d'un tube cylindrique pour ces pressions capillaires selon la loi de Laplace. Toutes les valeurs sont données à une température de 20°C.

À cet effet, plusieurs enceintes hermétiques sont préparées à l'avance. Le fond de chacune des enceintes est rempli d'une solution saline de nature différente, constituée d'eau pure dans laquelle est dissout à saturation un sel. À une température donnée, l'air se charge partiellement en vapeur d'eau, en équilibre thermodynamique avec la solution saline. Le rapport de la pression partielle de vapeur d'eau qui règne dans l'enceinte divisée par la pression de vapeur saturante est appelé humidité relative (HR) et est exprimé en %. Les humidités relatives qui correspondent aux solutions salines utilisées sont indiquées dans la table 4.3 pour une température de 20°C. L'incertitude sur les humidités relative régnant dans les enceintes est de quelques pourcents.

Un échantillon est ensuite placé dans l'enceinte, sans contact avec la solution saline. La saturation en eau de l'échantillon évolue jusqu'à l'équilibre thermodynamique, selon une cinétique contrôlée par la perméabilité à l'eau de l'échantillon et/ou la diffusion de la vapeur d'eau dans l'air. Pour les tailles d'échantillons considérées, l'équilibre est atteint en deux à quatre semaines.

À l'équilibre, l'égalité des potentiels chimiques de la vapeur d'eau et de l'eau liquide (supposée fluide mouillant) dans les pores de l'échantillon implique que la pression capillaire P_{cap} diminue lorsque l'humidité relative augmente selon la loi de Kelvin

$$P_{\text{cap}} = P_g - P_l = -\frac{\rho_l RT}{M} \ln(\text{HR}), \quad (4.1)$$

où P_g et P_l sont les pressions des phases gazeuse et liquide, ρ_l la masse volumique de l'eau liquide, T la température, R la constante des gaz parfaits et M la masse molaire de l'eau. Pour de l'eau pure à 20°C, les pressions capillaires sont reportées en fonction de quelques valeurs d'humidité relative dans la table 4.3.

Par ailleurs, la loi de Laplace relie la pression capillaire à la courbure moyenne C de l'interface entre la phase gazeuse et l'eau liquide

$$P_{\text{cap}} = P_g - P_l = \gamma C, \quad (4.2)$$

où γ est le coefficient de tension superficielle et la courbure moyenne de l'interface est $C = \text{div}_s(\mathbf{n})$ où \mathbf{n} est le vecteur normal unitaire à la surface dirigé du gaz vers le liquide et div_s l'opérateur divergence appliqué le long de l'interface. Dans l'hypothèse d'un pore cylindrique de rayon R , en supposant l'angle de contact entre l'eau et la phase solide nul, la courbure moyenne vaut $C = 2/R$. Dans l'hypothèse d'un pore plat compris entre deux plans espacés de $2R$, la courbure moyenne est $C = 1/R$. Pour l'eau dont la taille des molécules est de l'ordre de 0,4 nm, la loi de Laplace n'a plus de sens pour des pores de moins de 2 nm car il devient difficile

de différencier l'eau liquide libre, la phase vapeur, l'eau adsorbée et de parler d'un ménisque d'interface liquide-vapeur.

Schématiquement, pour les faibles humidités relatives, l'échantillon est faiblement saturé car seuls les plus petits pores ne sont pas vidangés. Pour les fortes humidités relatives, seuls les plus gros pores sont vidangés et la saturation est plus élevée.

Pour un échantillon donné, il n'existe généralement pas de relation bi-univoque entre la saturation et l'humidité relative : la saturation présente un effet d'hystérésis qui dépend de l'historique de chargement hydrique de l'échantillon. Ainsi, on distingue les isothermes de sorption qui correspondent à la relation entre saturation et humidité relative en partant d'un état initial complètement sec et les isothermes de désorption qui partent d'un état initial complètement saturé.

4.1.3 Confinement en cellule et dispositifs d'injection de gaz

Cellule de confinement Pour étudier l'effet de la contrainte hydrostatique sur les caractéristiques du matériau, un échantillon cylindrique est introduit dans une cellule de confinement (Fig. 4.3). Le diamètre d'échantillon usuel est 37 mm et la hauteur est comprise entre 10 et 70 mm. Le confinement est assuré par de l'huile hydraulique dont la pression est imposée par une pompe manuelle et contrôlée par un capteur de pression. La pression maximale supportable par la cellule utilisée est 60 MPa = 600 bar. La pression de l'huile de confinement P_c est mesurée avec une précision $\Delta P_c = 0,5$ bar. Les faces latérales de l'échantillon sont protégées de l'huile par une manchette en Vitton. Les faces supérieures et inférieures de l'échantillon sont chacune reliées à un dispositif d'injection ou de drainage de fluide. Des diffuseurs permettent de répartir uniformément le fluide sur ces deux faces. Dans ce travail, les fluides d'injection utilisés sont soit de l'Argon soit de l'eau.

Injection d'eau L'eau est injectée par l'intermédiaire d'une pompe automatique Gilson qui permet de réguler la pression d'injection et de mesurer le volume d'eau injecté. L'eau est drainée à pression atmosphérique.

Injection de gaz Suivant les expériences, le gaz Argon est injecté de deux façons.

Pour les mesures de perméabilité, le gaz est injecté sur la face aval par l'intermédiaire d'un tableau de contrôle du gaz. Le tableau gaz comprend au minimum un réservoir d'Argon à haute pression qui alimente un volume tampon via un détendeur. Un système de vanne permet soit d'injecter le gaz dans la cellule de confinement, soit de décharger le volume tampon. Un capteur de pression de précision $\Delta P_i = 0,02$ bar contrôle la pression d'injection P_i du gaz. Les pressions d'injection utilisées dans cette étude sont 5, 10 et 15 bar (relativement à la pression atmosphérique) pour les mesures de perméabilité.

Pour les mesures de porosité, le gaz est injecté sur les deux faces de l'échantillon à partir d'un petit volume tampon V_t d'environ 70 ml initialement en surpression, dont le volume est précisément étalonné. Un capteur de pression à haute résolution mesure la pression P_t dans le volume tampon avec une précision $\Delta P_t = 0,001$ bar.

Drainage du gaz Pour les mesures de perméabilité, la face aval de l'échantillon est en général drainée à pression atmosphérique ($P_d = P_{\text{atm}}$). Pour les débits de drainage q_d suffisamment élevés, le débit de drainage du gaz est mesuré par un débitmètre. Toute une gamme de débitmètres est disponible, et le choix de la capacité maximale du débitmètre doit être réalisé en sachant qu'un débitmètre est précis pour des débits de 10% à 100% de sa capacité maximale. Le débitmètre le plus fin, d'une capacité maximale de 1 ml/min, permet de mesurer des débits jusqu'à 0,1 ml/min avec une résolution Δq_d de 0,01 ml/min. Pour des débits de drainage inférieurs

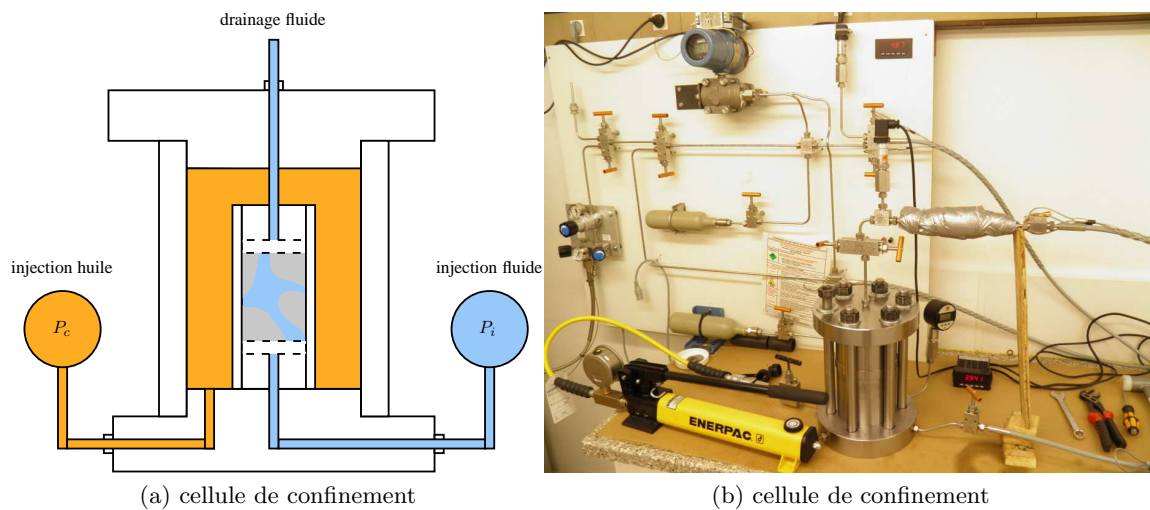


FIG. 4.3: Dispositifs expérimentaux (a) Schéma de la cellule de confinement. L'huile, en jaune, permet d'imposer un confinement hydrostatique P_c sur l'échantillon. Le fluide, en bleu, est injecté à la pression P_i et drainé à la pression P_d . (b) Cellule de confinement, tableau d'injection de gaz et système de mesure de la porosité au gaz avec petit volume tampon et capteur de pression fin additionnels.

à 0,1 ml/min, un dispositif basé sur un capteur de pression avec une précision $\Delta P_d = 0,001$ bar est utilisé (voir section 4.2.2).

4.1.4 Presse d'essais mécaniques et jauges de déformation

Presse Une presse Zwick est utilisée pour les essais de compression simple sur des échantillons cylindriques. La presse permet d'imposer une force uniaxiale sur les faces supérieure et inférieure de l'échantillon. Une rotule permet de corriger les défauts d'orientation des faces de l'échantillon par rapport à son axe. Comme les faces des échantillons n'ont pas été rectifiées, la source d'incertitude principale est le défaut de planéité des surfaces qui peut entraîner une inhomogénéité du champ de contrainte dans l'échantillon lors de l'essai. La valeur de cette incertitude est difficile à estimer.

Jauges de déformation Une jauge de déformation est utilisée pour mesurer localement la déformation de l'échantillon dans la direction de la jauge. Les jauges utilisées ont une longueur de 5 mm. La jauge doit être collée à la surface de l'échantillon. Un polissage à l'emplacement de la jauge est réalisé au préalable pour limiter les erreurs liées à la rugosité de la surface. Les jauges utilisées ont une précision d'environ 10^{-5} sur la déformation.

4.2 Méthodes expérimentales

4.2.1 Caractérisation du réseau poreux

Mesures du volume poreux

La mesure de la porosité des matériaux à grains fins ou argileux n'est pas triviale. Deux méthodes ont été utilisées et comparées au cours de ce travail.

À l'eau, sans pression de confinement La méthode la plus classique est une méthode gravimétrique. Dans un premier temps, l'échantillon est saturé en eau suivant le protocole décrit section 4.1.2. Après stabilisation de la masse (≈ 24 h), une pesée permet de déterminer la masse m_{sat} de l'échantillon. Ensuite, l'échantillon est séché plusieurs semaines dans une étuve à 65°C jusqu'à stabilisation à la masse m_{sec} . La masse d'eau dans un échantillon totalement saturé est calculée comme la différence $m_{\text{sat}} - m_{\text{sec}}$. Le volume d'eau correspondant en est déduit à partir de la masse volumique ρ_{eau} de l'eau pure à 20°C . Par ailleurs, le volume total V de l'échantillon est calculé à partir des mesures de son diamètre et de sa hauteur au pied à coulisse. Sous hypothèses que l'échantillon ait été entièrement saturé puis entièrement séché au cours du processus, la porosité ϕ est calculée comme le ratio du volume d'eau sur le volume total par

$$\phi = \frac{m_{\text{sat}} - m_{\text{sec}}}{V \rho_{\text{eau}}}.$$

L'incertitude relative sur la porosité liée aux précisions Δm sur les mesures de masse et ΔV sur la mesure de volume s'en déduit comme $\Delta\phi/\phi = 2\Delta m/(m_{\text{sat}} - m_{\text{sec}}) + \Delta V/V$.

Cependant, cette méthode présente un biais majeur : le protocole de saturation ne garantit pas en pratique une saturation complète de l'échantillon pour les matériaux considérés ici. Pour quantifier ce biais, une seconde méthode de mesure de la porosité est utilisée.

À l'argon, avec pression de confinement Au préalable, la hauteur et le diamètre d'un échantillon cylindrique sont mesurés au pied à coulisse et son volume total V avant essai déduit. L'échantillon est introduit dans une cellule de confinement. Les deux faces de l'échantillon sont connectées à un même petit volume tampon dont le volume V_t est précisément étalonné (Fig. 4.4a). Deux vannes permettent d'isoler initialement l'échantillon du volume tampon. Un capteur de pression à haute résolution permet de mesurer la pression dans le volume tampon. Les volumes morts qui sont les conduits entre le volume tampon et l'échantillon et les diffuseurs de gaz à la surface de l'échantillon sont étalonnés au préalable en suivant la même démarche que ci dessous mais en remplaçant l'échantillon par un cylindre non poreux en acier. Dans un premier temps, le volume tampon est rempli d'Argon à une pression P_t supérieure à la pression atmosphérique tandis que l'échantillon est drainé à pression atmosphérique P_a . Dans un second temps, les vannes sont ouvertes et le gaz du volume tampon investit l'espace poreux de l'échantillon (volume ϕV) et les volumes morts (volume V_m). Après équilibrage de la pression de gaz et de la température, la pression finale P_f est relevée. L'application la loi des gaz parfaits en condition isotherme permet alors de déduire la porosité par

$$P_t V_t + P_a (V_m + \phi V) = P_f (V_t + V_m + \phi V).$$

En pratique, le volume du tampon est de l'ordre de 70 ml, les volumes morts de l'ordre de 5 ml et le volume total de l'échantillon de l'ordre de 10 ml. Le capteur de pression utilisé a une précision de 0,001 bar et la pression initiale du volume tampon est 10 bars. L'incertitude absolue sur la porosité associée à la précision du capteur de pression est alors de 0,3% pour une porosité d'environ 15 %. De plus, l'incertitude absolue sur la porosité associée à la précision de la mesure du volume total est de 0,2% et celle à la précision sur le volume tampon de 0,3%.

L'intérêt de ce protocole réside aussi dans le fait qu'il permet de jouer sur la pression de confinement, ce qui est particulièrement utile en cas d'une dégradation des échantillons.

Isotherme de désorption

Le protocole de mesure de l'isotherme de désorption à l'eau à 20°C suit les étapes suivantes :

1. Saturation complète en eau par immersion et vide d'air pendant 24h. Pesée de la masse stabilisée m_{sat} de l'échantillon saturé.

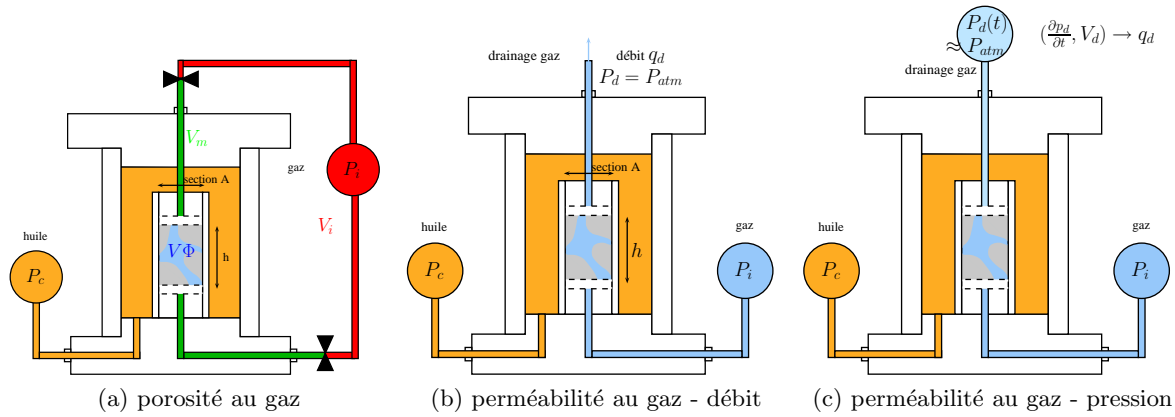


FIG. 4.4: Méthodes expérimentales en cellules de confinement (a) Mesure de porosité par volume tampon équipé d'un capteur de pression. (b) Mesure de perméabilité par débitmètre en sortie. (c) Mesure de très faible perméabilité par capteur de pression en sortie.

2. Saturation partielle par équilibre avec une humidité relative imposée. Les enceintes ont des humidités relatives imposées de 11, 43, 59, 73, 85, 92, 98 ou 100%. Pesée de la masse stabilisée m_{hr} de l'échantillon partiellement saturé.
3. Séchage à 60°C en étuve. Pesée de la masse m_{sec} après stabilisation.

La température des étapes 1 et 2 est de 20°C . Un isotherme de sorption est également obtenu pour chacun des 8 échantillons destinés aux mesures de perméabilités en reproduisant ces trois étapes dans l'ordre inverse.

La saturation partielle en eau S_w de chaque échantillon pour une humidité relative HR imposée se déduit comme

$$S_w = \frac{m_{hr} - m_{sec}}{m_{sat} - m_{sec}}.$$

L'incertitude sur S_w associée à l'incertitude Δ_m sur les masses mesurées s'en déduit comme $\Delta S_w = 2\Delta_m / (m_{sat} - m_{sec})$, si l'on admet que l'étape 1 assure bien la saturation totale de l'échantillon.

Suivant la taille et la porosité des échantillons utilisés, on estime que les incertitudes sur la saturation sont de l'ordre de 0,5 à 2 %, sous hypothèses que les états de référence sec et totalement saturé le soient effectivement.

4.2.2 Perméabilités intrinsèque et relative au gaz

Pour les mesures de perméabilité, les échantillons sont généralement des cylindres de diamètre $d = 37,70 \pm 0,05$ mm et hauteur $h = 10,0 \pm 0,5$ mm. Trois paramètres qui influent significativement la mesure de perméabilité au gaz sont étudiés : le degré de saturation, la pression de confinement et la pression d'injection de gaz. En effet, la saturation partielle en eau réduit la fraction poreuse disponible à l'écoulement du gaz, la pression de confinement modifie la structure poreuse en particulier en cas d'endommagement et la pression d'injection de gaz modifie le coefficient de glissement aux parois.

Mesure de perméabilité au gaz Les roches étudiées sont caractérisées par une perméabilité très faible. Les gaz, dont la viscosité est plus faible que les liquides, permettent d'effectuer des mesures dans un temps raisonnable. Par exemple, la viscosité de l'Argon est $\mu = 2,2 \cdot 10^{-5}$ Pa.s et celle de l'eau $1 \cdot 10^{-3}$ Pa.s.

Pour une pression de confinement P_c fixée, les mesures de perméabilité sont réalisées en injectant de l'Argon à la pression constante P_i sur la face amont de l'échantillon grâce au tableau de gaz. La face aval de l'échantillon est drainée à la pression constante P_d . En pratique, toutes les mesures de cette étude sont réalisées avec la pression de drainage égale à la pression atmosphérique. Les pressions d'injections sont de l'ordre de 5 à 25 bars relativement à la pression atmosphérique. Lorsque le régime stationnaire est atteint, le débit du gaz drainé q_d est mesuré en sortie de cellule par deux méthodes, suivant la gamme du débit.

La première méthode consiste à mesurer directement le débit par un débitmètre à Argon (Fig. 4.4b). Cette première méthode est utilisée tant que le débit est supérieur à environ $0,1 \text{ ml}\cdot\text{min}^{-1}$. L'incertitude relative sur le débit est de 0,1 à 1 %.

Lorsque le débit est inférieur à ce seuil, la résolution des débitmètres est insuffisante et la perméabilité est mesurée par le dispositif présenté Fig. 4.4c. Une vanne permet de relier momentanément la tige de drainage à un capteur de pression fin de précision 0,001 bar. Lorsque la vanne est activée, le gaz drainé est confiné au petit volume mort V_d (environ 5 ml) constitué de la tige de drainage, du volume de la chambre du capteur de pression, du diffuseur de gaz aval et des raccords. La pression de l'ensemble, initialement égale à la pression atmosphérique, augmente en fonction du débit de drainage. Le capteur de pression permet de suivre l'évolution temporelle de l'écart $P_d(t)$ à la pression atmosphérique. Le débit étant très faible, cet écart reste très inférieur à la pression atmosphérique pendant la mesure, de sorte que le débit de drainage reste quasiment constant. Le débit de drainage s'obtient comme

$$q_d = \frac{V_d}{P_{\text{atm}}} \frac{\partial P_d(t)}{\partial t}.$$

Dans la pratique, la méthode par débitmètre permet de mesurer des perméabilités jusqu'à $5 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$ ou 50 nD tandis que la méthode par capteur de pression permet de mesurer des perméabilité en dessous de 10^{-23} m^2 ou 0,01 nD.

Calcul de la perméabilité effective Pour un gaz parfait, la combinaison de la conservation de la masse et de la loi de Darcy permettent d'écrire l'équation de diffusivité dans un milieu perméable de porosité ϕ , perméabilité K (m^2) et un fluide de viscosité μ (*Pa.s*) pour un écoulement unidirectionnel dans la direction x [91] :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi p(x, t)) = \frac{\partial}{\partial x} \left(p(x, t) \frac{K}{\mu} \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \right).$$

En régime permanent et pour une perméabilité constante dans l'échantillon, la pression se met sous la forme

$$p(x) = \sqrt{P_i^2 - (P_i^2 - P_d^2) \frac{x}{h}},$$

de sorte que le gradient de pression vaut $(P_d^2 - P_i^2)/(2ph)$. En utilisant la loi de Darcy et la continuité du débit au niveau de la face de drainage de l'échantillon, la perméabilité se déduit du débit de drainage comme

$$K = \frac{2\mu h P_d}{A(P_i^2 - P_d^2)} q_d,$$

où $A = \pi d^2/4$ est l'aire de la section de l'échantillon. L'incertitude relative de mesure de la perméabilité associée aux incertitudes de mesures sur h , d , P_i et q_d est

$$\frac{\Delta K}{K} = \frac{\Delta h}{h} + \frac{2\Delta d}{d} + \frac{\Delta q_d}{q_d} + \frac{2P_i \Delta P_i}{P_i^2 - P_d^2}.$$

Les contributions des incertitudes sur la pression et le débit sont toutes deux inférieures à 1%. Dans la gamme de pression de confinement utilisée, les déformations de l'échantillon sont inférieures au millième et sont négligeables. Les incertitudes sur les dimensions de l'échantillon sont donc celles déjà discutées sur les mesures au pied à coulisse, et sont fixes.

Effet Klinkenberg Cependant, pour un gaz s'écoulant dans un milieu poreux sec, la perméabilité est sujette au glissement aux parois. Pour le modèle de Klinkenberg, la perméabilité effective en un point dépend en fait de la pression en ce point x selon la loi

$$K^{\text{eff}}(p(x)) = K^{\text{int}} \left(1 + \frac{\beta}{p(x)} \right),$$

où K^{int} est la perméabilité intrinsèque et β , homogène à une pression, est le coefficient de Klinkenberg. Remarquons qu'en posant $p'(x) = p(x) + \beta$ et en supposant β constant, la pression p' vérifie alors l'équation de diffusivité portant sur la perméabilité intrinsèque, c'est à dire :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi p'(x, t)) = \frac{\partial}{\partial x} \left(p'(x, t) \frac{K^{\text{int}}}{\mu} \frac{\partial p'(x, t)}{\partial x} \right).$$

En supposant la perméabilité intrinsèque constante dans l'échantillon et le régime permanent établi, le raisonnement précédent peut être appliqué à p' . Au final, le gradient de la véritable pression p en sortie d'échantillon, égal au gradient de la pression p' , vaut $(P_d'^2 - P_i'^2)/(2P_d'h)$. Le débit de drainage est relié à la perméabilité *effective* par la loi de Darcy, ce qui donne

$$q_d = \frac{AK^{\text{eff}}(x = h)(P_d'^2 - P_i'^2)}{2\mu h P_d'}.$$

En utilisant la loi de Klinkenberg sur la face aval de l'échantillon, $K^{\text{eff}}(x = h)/P_d'$ est égal à K^{int}/P_d' . Finalement, la formule pour le calcul de la perméabilité sans effet Klinkenberg peut être utilisée en toute rigueur pour calculer une perméabilité effective *moyenne* sur l'échantillon, définie comme

$$K_m^{\text{eff}} = K^{\text{int}} \left(1 + \frac{\beta}{P_m} \right) \text{ avec } P_m = \frac{P_i + P_d}{2},$$

de sorte que tous calculs faits

$$K_m^{\text{eff}} = \frac{2\mu h P_d}{A(P_i^2 - P_d^2)} q_d.$$

Ce résultat, remarquablement simple et pratique mais non évident a priori, tient à la forme particulière de la dépendance de la perméabilité effective en la pression. Le tracé de perméabilité effective moyenne en fonction de l'inverse de la pression moyenne $P_m = (P_i + P_d)/2$ permet de calculer la valeur de la perméabilité intrinsèque K^{int} et du coefficient de Klinkenberg β . Un coefficient de Klinkenberg élevé est indicatif d'un écoulement à travers des pores de petite taille.

Autre forme de glissement aux parois La loi de Klinkenberg n'est qu'une forme particulière de dépendance de la perméabilité effective au glissement aux parois. Au chapitre 3, le modèle de cellule perméable équivalente sphérique a permis de proposer en (3.31) une autre forme de dépendance de la perméabilité au glissement :

$$K(\zeta) = K(0) \left(1 + \frac{b \frac{\zeta}{r_0}}{1 + a \frac{\zeta}{r_0}} \right) \quad (4.3)$$

où le coefficient de glissement $\zeta(p_0)$, environ égal au libre parcours moyen d'une molécule de gaz, est proportionnel à l'inverse de la pression p_0 du gaz et $r_0 = R_{\text{ext}} - R = R(1 - X)/X$. En intégrant cette forme dans l'équation de diffusivité, lors d'un essai de perméabilité uniaxial avec pression d'injection P_i et pression de drainage P_d , la perméabilité effective mesurée est

$$K^{\text{eff}} = K^{\text{int}} \left(1 + b\eta \left[1 + \frac{a}{\tilde{p}_i - \tilde{p}_d} \ln \left(1 + \frac{\tilde{p}_d - \tilde{p}_i}{a\eta + \tilde{p}_i} \right) \eta \right] \right) \quad (4.4)$$

avec η représentant l'ordre de grandeur du nombre de Knudsen pour l'échantillon,

$$P_m = (P_i + P_d)/2 \quad ; \quad \tilde{p}_i = P_i/P_m \quad ; \quad \tilde{p}_d = P_d/P_m \quad (4.5)$$

$$\eta = \frac{\zeta(p_0)}{r_0} \frac{p_0}{P_m} = \frac{\pi \mu \bar{v}_{\text{mol}}}{4 r_0 P_m} \frac{2 - \vartheta}{\vartheta} \quad \text{avec } \bar{v}_{\text{mol}} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}}$$

en utilisant (1.93). Pour l'Argon à 25°C, l'application numérique donne $\eta \approx 8.10^{-3} \text{Pa.m}/(r_0 P_m)$.

Remarquons que dans la limite des faibles porosités de la cellule perméable équivalente sphérique (i.e. lorsque X tend vers 1) a_m défini par (3.32) tend vers 0. La perméabilité effective K_m^{eff} suit alors une forme de Klinkenberg. Ce résultat est attendu car l'écoulement dans le problème auxiliaire est alors très proche d'un écoulement de Poiseuille, le long de la surface du grain sphérique de rayon R . Plus précisément, lorsque R_{ext} tend vers R , en posant $r_0 = R_{\text{ext}} - R = R(1 - X)/X$ on trouve

$$K_m^{\text{eff}} = \frac{2h^3}{3R} (1 + 3\eta) \quad \text{avec } \eta = \frac{\zeta(p_0)p_0}{r_0 P_m}. \quad (4.6)$$

Ordre de grandeur : Pour un essai à l'Argon avec un drainage à pression atmosphérique et une pression d'injection relative de 10 bars, $\eta = 1$ correspond à un "rayon de pore" $r_0 = 13$ nm.

Les échantillons ont tout d'abord été séchés pour réaliser une mesure de référence de la perméabilité au gaz. Ensuite, tous les 8 échantillons sont partiellement saturés par équilibre avec des humidités relatives imposées de 43, puis 59, 73, 85, 92 et 98 %.

Perméabilité relative au gaz La mesure de perméabilité relative au gaz suit la procédure adoptée dans Chen *et al.* [23]. Il s'agit de comparer la perméabilité effective au gaz d'un échantillon partiellement saturé en eau à sa perméabilité à l'état sec. Pour obtenir une saturation partielle, un échantillon est placé dans une enceinte dont l'humidité relative est imposée par une solution saline. À chaque palier de saturation partielle, une série de mesures de perméabilité au gaz est réalisé. La série de mesures de perméabilité au gaz comprend la mesure de la perméabilité effective au gaz pour plusieurs paliers de pression de confinement (P_c) et de pression d'injection (P_i) de gaz. Le cycle de pression de confinement et les pressions d'injection de gaz à chaque palier de confinement sont présentés ci dessous :

P_c (MPa)	2	4	6	8	9	6	4	2
P_i (MPa)	0,5				0,5			
	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
	1,5				1,5			

Les échantillons de la roche cap1 testés proviennent en effet d'une profondeur d'environ 450 mètres. La pression de confinement de 9 MPa est supposée proche des contraintes in-situ. Le cycle de mesures proposé permet de suivre l'évolution de la perméabilité en fonction du confinement et de l'humidité relative tout en mesurant l'effet de glissement aux parois.

Durée des mesures L'adimensionalisation de l'équation de diffusivité permet de dégager un temps caractéristique $T = h^2 \phi \mu / K P_i$. Les échantillons testés ont une hauteur $h = 10$ mm. Dans les présentes conditions, avec K exprimé en m^2 , le temps caractéristique en secondes est $T \approx 10^{-16} / K$ pour $P_i = 15$ bar soit environ une demi-heure pour une perméabilité de $10^{-20} m^2 = 10$ nD. En pratique, on observe en fait une stabilisation du débit bien avant ce temps caractéristique. Pour fixer les idées, une série de mesures pour un échantillon de roche cap1 à un degré de saturation partielle fixé prend une demi journée, sans compter le temps de mise en place. L'ensemble des mesures de perméabilité relative présentées dans ce rapport a

nécessité 8 semaines complètes de mesures, sans compter le temps de stabilisation entre chaque palier d'humidité relative (environ 1 mois). Au total, une durée d'un an a été nécessaire pour l'ensemble des mesures de perméabilité relative sur la roche cap1.

4.2.3 Pression de percée

Un échantillon totalement saturé en eau, placé dans une cellule de confinement, est connecté à un dispositif d'injection de gaz sur sa face amont. La pression du gaz est progressivement augmentée, tandis que la face aval est en contact avec de l'eau à une pression fixée. On se base sur les définitions de la *pression d'entrée* ("entry pressure") et de la *pression de percée* ("threshold pressure") proposées par Dewhurst *et al.* [30] :

- la pression d'entrée est la différence entre la pression de gaz amont et la pression d'eau aval pour laquelle le gaz commence à pénétrer dans les pores de l'échantillon,
- la pression de percée est la différence entre la pression de gaz amont et la pression d'eau aval pour laquelle il existe un chemin continu à travers l'échantillon qui permet le passage du gaz jusqu'à la face aval de l'échantillon.

La pression de percée est une grandeur particulièrement importante pour les roches de couvertures utilisées dans les stockages géologiques de gaz naturel puisqu'elle conditionne la pression maximale admissible pour le gaz au sein d'un stockage.

Les mesures sont réalisées sous une pression de confinement supposée représentative du confinement in-situ de l'échantillon d'après sa profondeur. L'échantillon est initialement saturé par immersion dans l'eau pure dans une enceinte dont l'air est pompé à vide pendant 24h. En cellule de confinement, l'échantillon est de plus saturé par injection d'eau à l'aide d'une pompe Gilson avec pression imposée sur la face amont. Lorsque le débit d'injection d'eau est stabilisé, l'échantillon est considéré saturé et la perméabilité à l'eau calculée. Ensuite, l'injection d'eau est remplacée par un dispositif d'injection de gaz Argon. La face aval est à pression atmosphérique et directement connectée à un capteur de pression fin comme pour les mesures de très faibles perméabilités. La pression d'injection de gaz est augmentée par paliers de 24h (typiquement de 2 bar). Lorsque le capteur de pression détecte une augmentation de pression dans la chambre aval, celle-ci est ouverte vers un détecteur d'Argon. Si de l'Argon est détecté, le gaz a effectivement percé. Sinon, l'augmentation de pression est attribuée au déplacement d'eau sous l'effet de la poussée du gaz en amont et l'expérience est poursuivie, c'est à dire que l'on se situe entre la pression d'entrée et la pression de percée.

4.2.4 Élasticité : effet de la saturation

Il a été observé que l'augmentation de la saturation en eau diminue les modules élastiques d'une argilite [22]. Une étude est menée pour déterminer si cet effet est présent pour nos matériaux.

Six échantillons de roche de couverture cap1 de diamètre 20 mm et hauteur 40 mm ont été préparés et instrumentés avec deux jauges de déformation longitudinales, c'est à dire dans l'axe de l'échantillon. À l'aide d'une presse, un essai de compression simple est réalisé pour mesurer le module de Young. Comme pour les mesures de perméabilité relative, chaque échantillon est séché puis soumis à plusieurs paliers d'humidité relative pour obtenir des saturations partielles en eau croissantes. Une mesure est effectuée à chaque état de saturation de l'échantillon.

4.2.5 Poro-mécanique

Un échantillon cylindrique de diamètre 37 mm et hauteur entre 45 et 70 mm est séché puis instrumenté avec deux jauges de déformation longitudinales (suivant l'axe du cylindre) et deux jauges transversales (perpendiculaires aux précédentes). L'échantillon est placé dans une cellule

de confinement. Un dispositif permet d'injecter du gaz sur les deux faces de l'échantillon à une pression contrôlée. L'échantillon est soumis à un cycle de pression de confinement et de pression d'injection de gaz au cours duquel les déformations des jauges sont enregistrées. Les sollicitations sont de type drainées, c'est à dire que la pression de pore est pilotée. Les mesures peuvent aussi être conduites sur un échantillon partiellement saturé car sous réserve que l'humidité relative dans le réseau poreux ne varie pas au cours de l'essai, la loi de Kelvin impose que les variations de pression dans les phases gazeuse et liquide sont identiques.

L'objectif de l'essai poromécanique est de mesurer le coefficient de Biot. À partir d'une pression de confinement P_c fixée, un incrément $\Delta P_c = -\Delta P < 0$ de décharge de pression de confinement est appliqué alors que l'échantillon est drainé à la pression atmosphérique. La déformation volumique correspondante est notée $\Delta \varepsilon_v^c$. Le confinement est ensuite rétabli à la pression P_c . Un incrément $\Delta P_i = \Delta P$ de pression d'injection est appliqué tandis que la pression de confinement est maintenue à la valeur P_c . La déformation volumique correspondante est notée $\Delta \varepsilon_v^i$. Cette déformation n'est pas immédiate car la pression au sein du réseau poreux se stabilise à la pression d'injection avec une cinétique contrôlée par la perméabilité au gaz, qui est ici très faible.

Le coefficient de Biot est déduit comme $b = \Delta \varepsilon_v^i / \Delta \varepsilon_v^c$. De plus, la décharge de confinement permet de calculer le module de compression élastique $K^b = \Delta P / \Delta \varepsilon_v^c$.

En pratique, les incertitudes sont élevées car les sources d'incertitudes nombreuses, ce qui rend l'essai extrêmement délicat. D'une part, la pression de confinement est mesurée avec une précision de l'ordre du bar. D'autre part, la stabilisation de la pression au sein du réseau poreux est difficile à estimer pour les faibles perméabilités. Enfin, les jauges de déformations donnent une mesure parasitée et on observe parfois une déviation à long terme du signal d'origine inconnue, ce qui entre en conflit avec les temps de stabilisation de la pression qui sont longs. Ces difficultés sont aussi rencontrées et parfois exacerbées pour des essais poromécaniques à l'eau.

4.3 Résultats

4.3.1 Caractérisation du réseau poreux

Mesures du volume poreux

Les mesures de porosité à l'eau et au gaz sont consignées dans la table D.1. Pour tous les échantillons dont la porosité a été mesurée au gaz et à l'eau, on observe systématiquement que la mesure de porosité au gaz est nettement supérieure à celle à l'eau (de 2 à 10 points de porosité suivant les matériaux). Les pressions de gaz utilisées pour les mesures, comprises entre 0,3 et 1 MPa, ne peuvent être invoquées pour expliquer de telles disparités par un effet de gonflement poro-mécanique des pores car elles sont 3 à 4 ordres de grandeurs plus faibles que les modules élastiques. Sous hypothèse que tout le réseau poreux est envahi par l'eau par le protocole de saturation, l'incertitude absolue $\Delta \phi$ sur les mesures de porosité à l'eau est de l'ordre de 0,4%.

Pour expliquer ces différences, une hypothèse est que la procédure de saturation en eau n'assure pas une saturation totale de l'échantillon. Des poches de gaz peuvent en effet être emprisonnées par des effets capillaires. Cette hypothèse semble confortée par d'autres expériences qui ont été réalisées au laboratoire sur l'argilite de Bure dans le cadre de la thèse de Song [92]. Pour comprendre les importantes différences entre les mesures de porosité à l'eau et au gaz, [92] a en effet proposé une méthode alternative de saturation en eau. Dans cette méthode, l'échantillon préalablement saturé par la méthode classique d'immersion et vide d'air est placé dans une cellule de confinement, puis de l'eau sous pression est injectée sur une face jusqu'à stabilisation du débit. Par ce forçage de l'eau dans l'échantillon, la différence entre les mesures de porosité à l'eau et au gaz est partiellement recouverte. Dans l'idéal, il faudrait pouvoir faire ce test sur une longue durée.

À propos de l'homogénéité des matériaux, on observe pour la carotte de roches de couverture cap1 que plus les échantillons sont prélevés haut dans la carotte, plus leur porosité est élevée, signe d'un effet de la stratification à l'échelle de quelques centimètres.

D'autre part, pour le matériau cap1 à l'état sec, un confinement de 2, 9 puis 2 MPa referme légèrement la porosité, mais de façon quasi-réversible. Ce résultat laisse à supposer que les déformations sont principalement élastiques dans la gamme de pression de confinement explorée. On rappelle que pour cette carotte prélevée à 450 m de profondeur, un confinement de 9 MPa est supposé représentatif de la pression hydrostatique in-situ.

En revanche, les résultats de mesure de porosité au gaz sous divers confinements Fig. 4.8 montrent qu'une perte irréversible de porosité (et de perméabilité) est obtenue pour des confinements plus élevés, associée à un mécanisme de plasticité.

Isothermes de sorption et désorption

Les isothermes de désorption à l'eau à 20°C sont présentés Fig. 4.5 pour les carottes de roches mères LW2, LW6, LRS4, SK2-K5 et SK2-K11 et la partie haute de la carotte de roche de couverture cap1. L'état saturé de référence est celui obtenu par immersion partielle dans l'eau et vide d'air, bien que d'après la section précédente il ne corresponde pas nécessairement à une saturation totale en eau. Pour les isothermes de désorption, chaque échantillon ne suit qu'un palier d'humidité relative en plus des états sec et saturé. Une courbe d'isotherme de désorption est ainsi construite à partir de plusieurs échantillons, ce qui peut introduire un biais lorsque le matériau n'est pas homogène. Cependant, les mesures sont beaucoup plus rapides que si chaque échantillon devait suivre tous les paliers d'humidité relative puisque l'équilibrage prend plusieurs semaines. Au contraire, un isotherme de sorption à partir de l'état sec est présenté pour chaque échantillon (cap1-MIL-XX) du milieu de la carotte de roche de couverture cap1. Ces échantillons ont en effet aussi été utilisés pour des mesures de perméabilité relative à chaque palier. Pour comparaison est tracé un isotherme de désorption de l'argilite de Bure obtenu par ailleurs au laboratoire.

Pour la roche de couverture cap1, la différence entre la désorption et la sorption est relativement faible. En sorption, l'équilibre aux humidités relatives $HR = 98$ ou 100% conduit à une saturation de l'ordre de $70 \pm 5\%$ pour la roche cap1. Pour certains échantillons, la saturation en eau est plus élevée pour $HR=98\%$ que pour $HR=100\%$: cette inversion est probablement un artefact lié à la difficulté d'imposer précisément une humidité relative proche de $HR=100\%$. Il subsiste donc environ 30% de porosité qui n'est pas saturée par une humidité relative proche de 100% . De même en désorption pour les roches cap1, LW2 et LW6, la saturation chute brutalement à 70% dès $HR = 98$ ou 100% . Au contraire, la saturation est très élevée (95%) à $HR = 98$ ou 100% pour l'argilite de Bure, les roches mères de l'Alum SK2-K11 et de grande profondeur LRS4. Pour la roche de couverture cap1, la désaturation arrive pour des humidités relatives (et donc des pressions capillaires) plus élevées que pour l'argilite de Bure et les roches LRS4, SK2-K5 et SK2-K11, avec une saturation chutant de 70 à 30% pour HR de 98 à 85% .

Dans l'hypothèse d'une distribution ordonnée de pores plats, les isothermes de désorption sont traduits en terme de rayon d'accès aux pores par la loi de Kelvin-Laplace. Sous cette hypothèse, la roche cap1 possède 30% de pores de rayon d'accès supérieur à 25 nm , 30% entre 5 et 25 nm et 40% en dessous de 5 nm . Au regard des images obtenues par microscopie électronique Fig. 4.2, la fraction la plus grossière de la porosité de la roche cap1 est attribuée à l'espace entre les grains de carbonates (environ un tiers). La fraction la plus fine est attribuée à la porosité interne aux poches d'argiles (environ deux tiers). À titre de comparaison, dans le même cadre d'hypothèse, 80% des pores de l'argilite de Bure et 90% des pores de la roche mère SK2-K11 ont un rayon d'accès en dessous de 5 nm . Enfin, les roches mères SK2 de l'Alum se distinguent par une forme sigmoïde de la courbe de pression capillaire associée à un pic de distribution de tailles de pores : sous les hypothèses considérées, 70% des pores auraient un

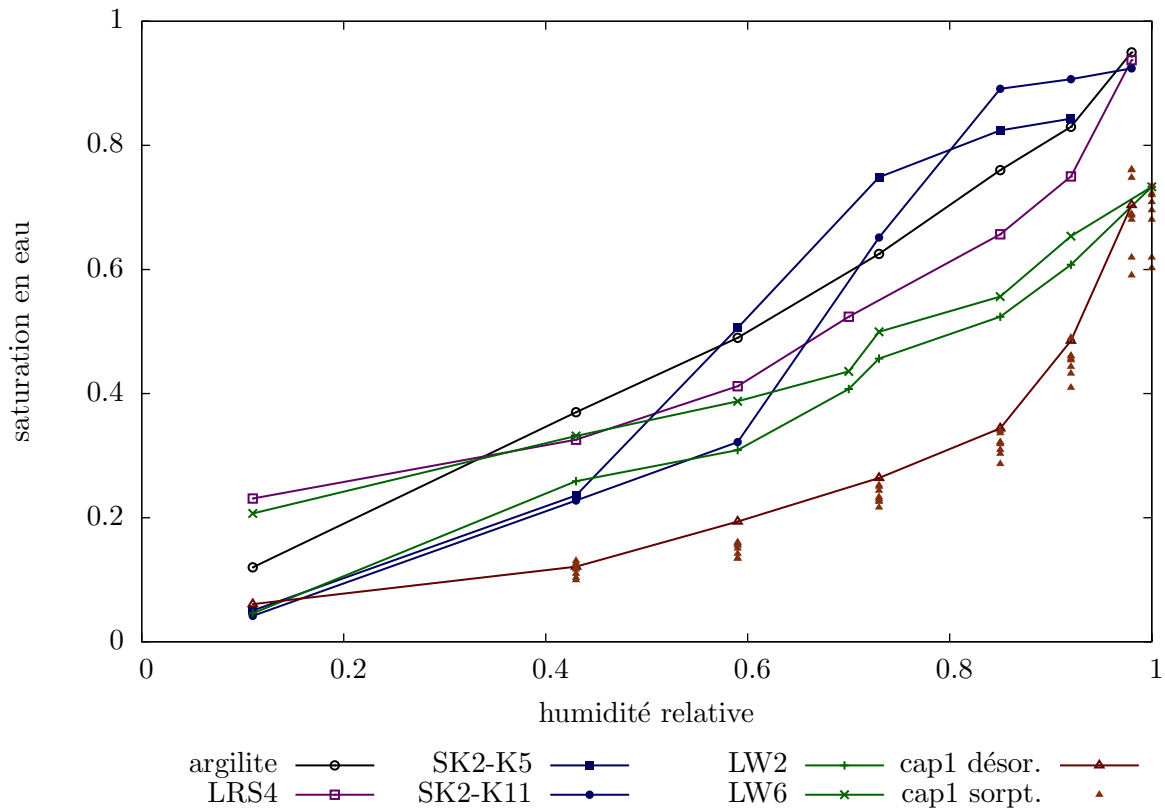


FIG. 4.5: Isothermes de désorption (sauf mention sorption) à 20°C.

rayon d'accès compris entre 1 et 4 nm. Les images obtenues au microscope électronique viennent renforcer cette interprétation puisqu'aucune porosité n'est visible avec une résolution de 10 nm/pixel : tous les espaces sont occupés par le kérogène dans cette roche très riche en matière organique. Un tel arrangement compact est attribué à une compaction diagénétique de la roche mère.

4.3.2 Perméabilités effective, intrinsèque et relative au gaz

Trois paramètres essentiels influent sur les mesures de perméabilité au gaz : la pression de confinement appliquée à l'échantillon, la pression du gaz qui influe sur le glissement aux parois et la saturation de l'échantillon.

Lorsque l'échantillon est sec, on utilise la terminologie *perméabilité effective* (ou *apparente*) K^{eff} pour la perméabilité mesurée à une pression de gaz et *perméabilité intrinsèque* K^{int} l'extrapolation à une pression de gaz infinie des mesures de K^{eff} pour différentes pressions de gaz. La perméabilité intrinsèque correspond à un écoulement pour lequel le glissement aux parois est négligeable et, sauf cas particuliers, ne dépend pas du fluide qui s'écoule.

Lorsque l'échantillon est partiellement saturé en eau, la perméabilité mesurée au gaz est normalisée par la perméabilité à sec : le ratio correspond à la *perméabilité relative* (au gaz). En présence d'eau, l'extrapolation des mesures de perméabilité effective au gaz à des pressions infinies n'a pas de sens puisque la pression de gaz influe sur la position de l'eau via les effets capillaires. La perméabilité relative correspond donc au ratio de deux perméabilités effectives mesurées à la même pression de gaz.

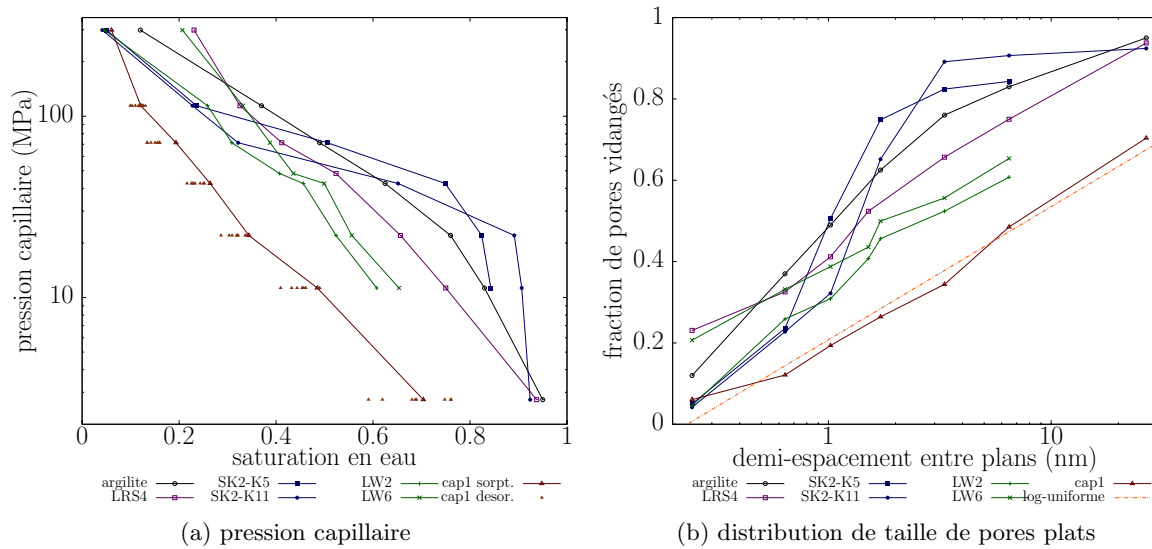


FIG. 4.6: Transposition des isothermes de désorption Fig. 4.5 en (a) courbe de pression capillaire par la loi de Kelvin (4.1) (b) fraction de pores plans avec un demi-espacement R entre leurs parois calculé par la loi de Laplace (4.2) vidangés pour une idéalisation plane et organisée des pores. Distribution de tailles de pores pour la loi log-uniforme $f(R) = \ln(R/R_1)/\ln(R_2/R_1)$ ajustée sur cap1 avec $R_1 = 0,232$ nm et $R_2 = 263$ nm.

Effet du confinement

Perméabilité effective D'une manière générale, les perméabilités mesurées sont extrêmement sensibles à la pression de confinement appliquée à l'échantillon. L'hypothèse que nous cherchons à confirmer pour expliquer cette sensibilité est la présence d'une micro-fissuration des matériaux étudiés. Pour chaque mesure de perméabilité, il convient donc de préciser systématiquement la valeur du confinement.

Les mesures de perméabilité effective au gaz à l'état sec des roches mères sont présentées Fig. D.1 celles de la roche de couverture cap1 table D.2 pour différentes pression de confinement. La diversité des échantillons étudiés est particulièrement évidente d'après les mesures de perméabilité qui sont comprises entre 10^{-15} et 10^{-21} m². De plus, de nombreux échantillons de roches mères parmi les forages LRS et SK2 ont une perméabilité non mesurable car trop faible, et ce malgré la mise en place de moyens de détection permettant en théorie de mesurer des perméabilités de l'ordre de 10^{-24} m².

Dans la gamme de confinement explorée, la perméabilité des roches mères est très sensible à la pression de confinement. La Fig. 4.7 présente les mesures de perméabilité effective normalisées par la perméabilité à faible confinement. Suivant l'origine des échantillons, trois grandes classes de comportement se dégagent. Les roches LW2 et LW6 présentent une sensibilité modérée, la perméabilité à $P_c = 40$ MPa est comprise entre 20 et 30 % de la perméabilité à $P_c = 2$ MPa. Pour la roche LB1, plus sensible, ce ratio est compris entre 3,5 et 7 %. Enfin, tous les échantillons de roches mères de l'Alum pour lesquels la perméabilité est mesurable présentent une sensibilité extrême avec une chute rapide de la perméabilité de plusieurs ordres de grandeur lors de l'augmentation du confinement, parfois même en dessous du seuil de détection. Une telle sensibilité est caractéristique d'un écoulement contrôlé par la fissuration du matériau. De même, la sensibilité de la roche LB1, plus grande que celle des roches LW2 et LW6, est cohérente avec les observations de micro-fissures dans la roche LB1, tandis que les roches LW2 et LW6 semblaient plus saines. Par ailleurs, les niveaux de confinement appliqués ont manifestement entraîné l'enclenchement de mécanismes non réversibles puisque, à un même faible niveau de

confinement, la perméabilité après cycle de confinement est comprise entre 10 et 50 % de la valeur avant cycle.

Pour la roche de couverture cap1, lors d'une montée modérée du confinement de 2 MPa à 9 MPa, la perméabilité effective de la plupart des échantillons ne diminue que de 10% (ce qui est aussi valable pour les roches mères LW2 et LW6). Lors de la décharge de 9 MPa à 2 MPa, l'écart entre la perméabilité à 2 MPa avant cycle n'est que de 5%. Vu la sensibilité usuelle de la perméabilité à toute modification de l'espace poreux, cette faible variation permet d'affirmer que pour la roche cap 1 les déformations sont essentiellement élastique dans cette gamme de confinement.

Cette observation est aussi valable en présence d'eau pour la plupart des échantillons de roche cap1 étudiés, aux différentes saturations jusqu'à la saturation correspondant à HR = 92 %. Toutefois, pour la saturation correspondant à HR = 98 %, l'irréversibilité lors du cycle de charge-décharge devient plus importante. La perméabilité à 9 MPa de confinement est 3 à 4 fois moindre que la perméabilité à 2 MPa de confinement en début de cycle. La perméabilité à 2 MPa de confinement en fin de cycle est 2 à 3 fois inférieure à celle du début de cycle de confinement. Deux hypothèses peuvent être avancées : soit la diminution de porosité due au confinement conduit à une réorganisation de l'eau dans l'espace poreux ; soit le cycle de saturation de l'état sec jusqu'à HR = 98 % a entraîné une microfissuration des échantillons. Pour étayer cette dernière hypothèse, un séchage de certains de ces échantillons a été réalisé afin d'observer l'effet du confinement sur la perméabilité à sec *après* un cycle de saturation-désaturation (voir section 4.3.2).

Deux échantillons de roche cap1 (sur huit) font l'exception par rapport aux observations précédentes. L'échantillon cap1-MIL-20 présente une perméabilité à sec 5 à 10 fois supérieure aux autres et une forte sensibilité au confinement (ratio de perméabilité à sec de 3 pour 1 entre 2 MPa et 9 MPa de confinement). Cet échantillon, pris le plus haut dans la carotte et plus proche de l'extrémité de la carotte reçue que les autres, présente certainement une micro-fissuration qui s'est développée au cours du chargement hydrique. L'échantillon cap1-MIL-21 présente aussi un comportement intermédiaire entre ces deux cas. De fait, il a aussi été pris dans la carotte reçue à une hauteur intermédiaire entre cap1-MIL-20 et les six autres échantillons.

Perméabilité, porosité et confinement La Fig. 4.8 montre le résultat de mesures combinées de perméabilité et de porosité au gaz avec variation du niveau de confinement. À titre de comparaison, un essai similaire conduit sur une craie de Haubourdin (voir [74]) est aussi présenté. La chute de perméabilité est associée à une diminution de volume poreux.

La mesure du volume poreux donne accès à la porosité lagrangienne $\Phi = V_{\text{pore}}^{\text{actuel}} / V_{\text{tot}}^{\text{ini}}$. Pour mesurer la porosité eulérienne $\phi = V_{\text{pore}}^{\text{actuel}} / V_{\text{tot}}^{\text{actuel}}$, il faudrait aussi suivre la déformation volumique totale de l'échantillon. En l'absence de telles mesures, sous hypothèse que toute la déformation volumique est due à une variation du volume poreux (soit un coefficient de Biot égal à 1 dans la phase élastique), la porosité lagrangienne Φ peut être reliée à la porosité eulérienne ϕ par $\phi = \Phi / (1 + \Phi - \Phi_0)$ où $\Phi_0 = \phi_0$ est la porosité dans l'état de référence.

Sous cette hypothèse, la Fig. 4.8 illustre l'existence d'une corrélation entre la perméabilité et la porosité (eulérienne) propre à chaque matériau. La craie Haubourdin, constituée de débris de squelettes carbonatés de micro-organismes appelés coccolithes, est un bon exemple de matériau granulaire dont les grains sont réguliers et tous de tailles similaires. Les observations au microscope électronique présentées dans [74] montrent que le diamètre des grains est de l'ordre de $1\mu\text{m}$. Le modèle de cellule perméable équivalente sphérique (3.28) avec des sphères de taille monodisperse semble donc approprié pour modéliser la perméabilité de la craie Haubourdin. L'ajustement de ce modèle sur les résultats expérimentaux Fig. 4.8 conduit à choisir un rayon de grains solides de $R = 0,6\mu\text{m}$, ce qui est en excellent accord avec les observations expérimentales. La corrélation expérimentale perméabilité/porosité est par ailleurs bien reproduite par le modèle.

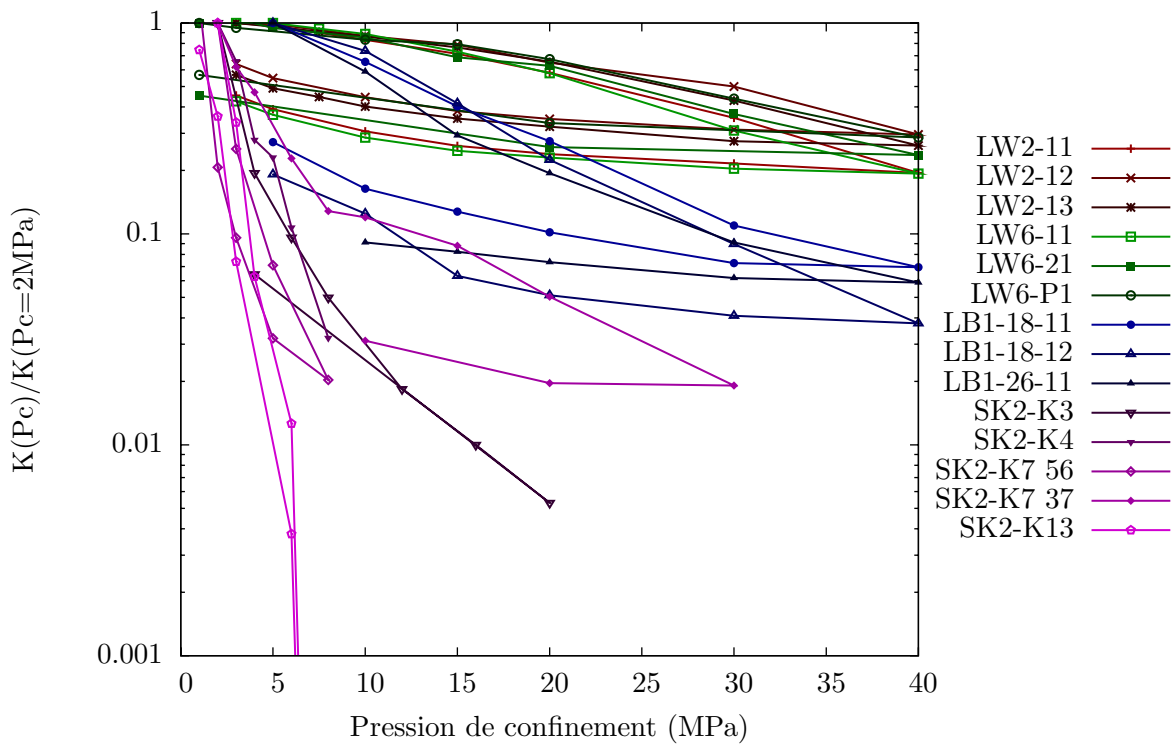


FIG. 4.7: Perméabilité au gaz à sec : effet du confinement.

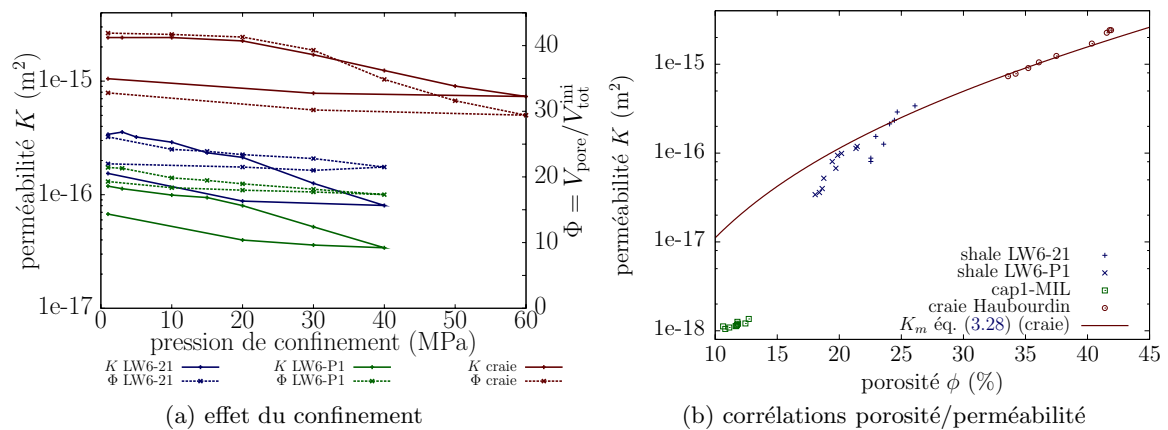


FIG. 4.8: (a) Mesures au gaz de volume poreux et de perméabilité sous confinement. (b) Corrélations entre les mesures au gaz de porosité et de perméabilité. Pour ajuster le modèle de cellule perméable équivalente sphérique (3.28) à la craie Haubourdin, un rayon de grain sphérique $R = 0,6 \mu\text{m}$ est utilisé et $X = (1 - \phi)^{1/3}$.

En revanche, nous n'avons pas été en mesure de proposer un modèle qui soit cohérent avec les corrélations perméabilité/porosité pour la roche de couverture cap1 ou la roche mère LW6. Par exemple, un ajustement du modèle de pores plans (3.71) conduit à un rayon de pore médian environ 10 fois trop faible pour LW6 et 20 fois trop grand pour cap1 en comparaison avec la distribution de tailles de pores Fig. 4.6. La structure du réseau poreux n'est donc pas capturée par ce modèle trop simpliste.

Effets du glissement aux parois

Pour les mesures de perméabilité à l'état sec, l'influence de la pression d'injection de gaz P_i sur la perméabilité effective est reportée Fig. D.2 pour quelques échantillons de roches mères. Dans ces essais, on rappelle que la pression de drainage P_d est systématiquement la pression atmosphérique et la pression moyenne P_m reportée en abscisse est définie par $P_m = (P_i + P_d)/2$.

Effet Klinkenberg Les perméabilités effectives de roches mères de l'Alum et de la roche de couverture cap1 diminuent proportionnellement à $1/P_m$ suivant la loi de Klinkenberg. L'ajustement d'une droite sur un tracé de la perméabilité effective K^{eff} en fonction de l'inverse de P_m permet de déduire la perméabilité intrinsèque K^{int} et le coefficient de Klinkenberg β .

Pour la roche de couverture cap1, les résultats sont résumés dans la table D.2 pour deux pressions de confinement $P_c = 2$ et 9 MPa. L'effet du glissement est significatif car la perméabilité intrinsèque est un ordre de grandeur plus faible que la perméabilité effective pour une pression d'injection $P_i = 11$ bar. Dans l'hypothèse de pores plans, le coefficient de Klinkenberg est proportionnel à l'inverse du rayon de pore R (voir (3.62) dans le cas monodisperse et (3.71) dans le cas d'une distribution log-uniforme de tailles de pores). Pour l'Argon à 25°C, (3.62) devient $\beta \times R \approx 24$ MPa.nm, de sorte que les coefficients de Klinkenberg reportés dans la table D.2 correspondent à un ordre de grandeur de R de 7 à 25 nm (hormis pour cap1-MIL-20 qui est micro-fissuré), ce qui est parfaitement cohérent avec les interprétations des isothermes de désorption par la loi de Kelvin-Laplace Fig. 4.6. La pression de confinement n'affecte pas significativement le coefficient de Klinkenberg entre $P_c = 2$ et 9 MPa.

En revanche, pour la roche mère de l'Alum, le coefficient de Klinkenberg est fortement impacté comme illustré Fig. D.2. Pour un faible confinement, la valeur du coefficient de Klinkenberg est associée à des fissures d'ouverture micrométrique. En revanche, pour $P_c = 10$ MPa on retrouve un coefficient de Klinkenberg d'environ 3 MPa pour l'échantillon SK2-K7, ce qui correspond à des rayons de pores de l'ordre de 8 nm plus en accord avec les interprétations des isothermes de désorption par la loi de Kelvin-Laplace Fig. 4.6. Par ailleurs, la mesure de perméabilité en fonction du confinement Fig. 4.7 montre que pour cet échantillon la perméabilité diminue très fortement jusqu'à atteindre un palier pour $P_c = 10$ MPa. Toutes ces observations sont cohérentes avec la présence de fissures d'ouverture micrométrique dans l'échantillon SK2-K7, qui sont refermées pour un confinement supérieur 10 MPa. La perméabilité au dessus de $P_c = 10$ MPa est supposée représentative du matériau non fissuré.

Enfin, pour la roche de couverture cap1, on observe que plus la saturation en eau de l'échantillon est importante, moins la perméabilité effective au gaz suit une loi de type Klinkenberg. Notamment, pour la saturation la plus forte étudiée (environ 70 %), si la perméabilité effective pour $P_i = 5$ bar est bien supérieure à celle pour $P_i = 10$ bar, la différence entre la perméabilité effective pour $P_i = 10$ bar et $P_i = 15$ bar est faible. Pour des saturations intermédiaires, un ajustement de la relation de Klinkenberg conduit à des valeurs du coefficient β inférieures à celles obtenues à sec (jusqu'à un facteur 3). Cette tendance est cohérente avec un remplissage de la porosité la plus fine par l'eau qui y bloque le passage du gaz.

Glissement décrit par le modèle de sphère perméable équivalente (3.31) La perméabilité effective des roches LW2 et LW6 présentée Fig. D.2 ne varie pas linéairement en

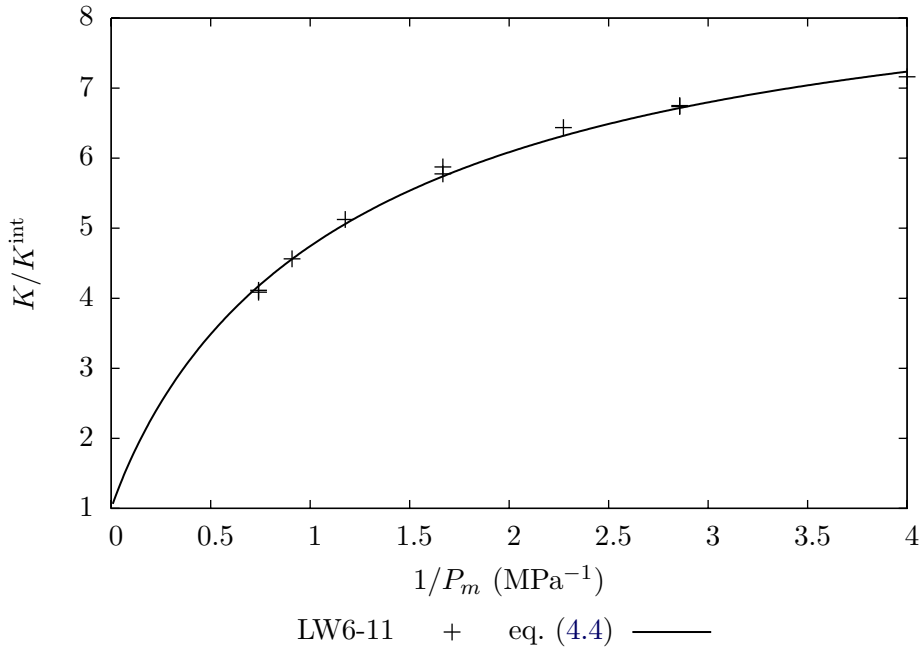


FIG. 4.9: Ajustement de (4.4) pour $r_0 = 3$ nm et $K^{\text{int}} = 8,0 \cdot 10^{-18} \text{m}^2$ avec a et b donnés par a_m et b_m dans (3.32) pour $X = 0,76$.

fonction de $1/P_m$. La loi de Klinkenberg n'est donc pas adaptée pour décrire l'effet du glissement aux parois. Une comparaison avec l'effet de glissement aux parois (4.4) obtenu pour le modèle de cellule perméable équivalente sphérique (3.31) est proposée Fig. 4.9. Les paramètres K^{int} , r_0 et X sont ajustés indépendamment.

Le modèle de cellule perméable équivalente sphérique reproduit bien la tendance expérimentale avec une courbure vers le bas. Remarquons que la valeur de $X = 0,76$ utilisée correspond à une porosité de 56% de la cellule perméable équivalente sphérique, ce qui est très loin des 20 à 25% de porosité mesurée pour les échantillons de cette carottes. En revanche, la taille de pore caractéristique $r_0 = 3$ nm est proche de la taille médiane des pores (2nm) estimée par les isothermes de désorption Fig. 4.6. En d'autres termes, on peut penser que l'effet du glissement est raisonnablement bien décrit par l'utilisation de la théorie cinétique des gaz combinée avec la prise en compte de la non uniformité des contraintes visqueuses tangentielles à l'interface solide-fluide par un modèle de cellule perméable équivalente. L'inadéquation sur la porosité serait alors simplement liée au seul effet de la morphologie sphérique utilisée dans le modèle, qui n'est assurément pas adaptée à la description de l'espace poreux. Un modèle de cellule perméable sphéroïdale oblate avec glissement serait peut être plus pertinent pour capturer la morphologie de ce matériau argileux.

Remarquons que si seules les 3 mesures à faible pression d'injection avaient été réalisées (les points pour les 3 plus grandes valeurs de $1/P_m$), l'application de la loi de Klinkenberg aurait conduit à une estimation de la perméabilité intrinsèque 5 fois plus élevée que l'estimation qui peut être proposée à l'aide du modèle de cellule perméable équivalente sphérique.

Effet de la saturation

Huit échantillons de la roche de couverture cap1 (cap1-MIL-XX) ont été séchés puis soumis à tous les paliers d'humidité relative, avec mesures de perméabilité à chaque étape. Toutes les valeurs de perméabilité relatives ont été calculées à partir de perméabilités effectives mesurées pour une pression d'injection $P_i = 11$ bar et une pression de drainage $P_d = 1$ bar.

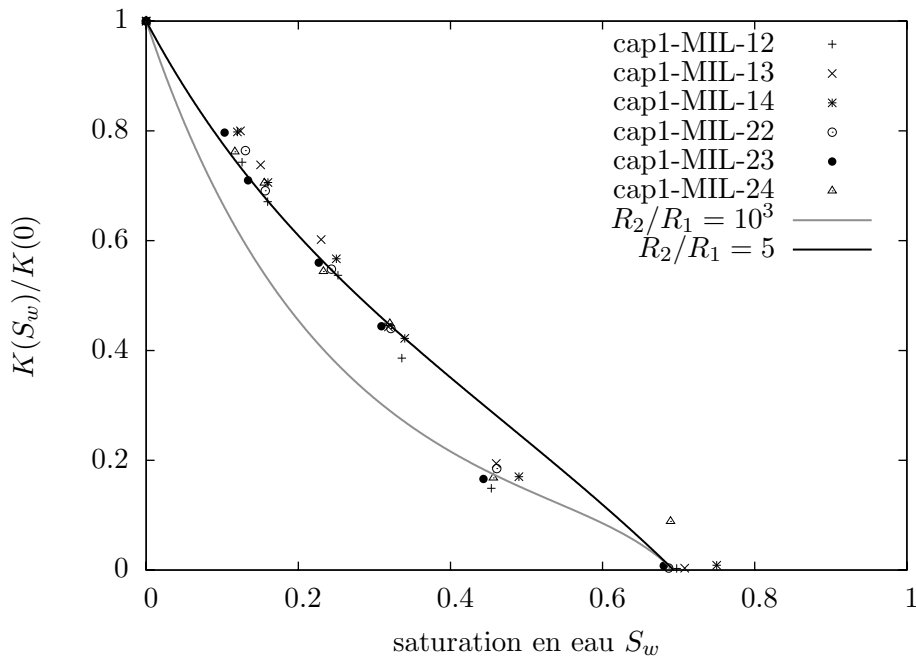


FIG. 4.10: Perméabilité relative au gaz de la roche de couverture cap1. Confrontation du modèle (3.80) aux données expérimentales Fig. D.3 avec $\omega = 1/120$ et $\phi = 12\%$ pour deux dispersions $\rho = R_2/R_1$ de la distribution de taille de pores log-uniforme.

Si la plupart des échantillons suivent la même tendance Fig. D.5, preuve d'une bonne homogénéité de la carotte reçue, deux échantillons ont comme précédemment un comportement différent. Le comportement de l'échantillon cap1-MIL-20 (carrés vides et traits doubles tirets Fig. D.5) est caractéristique d'une micro-fissuration qui se referme avec le confinement. Le comportement de l'échantillon cap1-MIL-21 (carrés pleins et traits mixtes Fig. D.5) est plus difficile à expliquer. Il semble que le cycle de saturation a progressivement induit un endommagement (micro-fissuration) de cet échantillon, notamment entre les humidités relatives 59% et 73%. L'effet de la micro-fissuration est très visible sur les mesures avec une pression de confinement de 2 MPa. En revanche, sur les mesures avec une pression de confinement de 9 MPa, la micro-fissuration est fermée et l'échantillon suit un comportement identique aux échantillons sains. Cette hypothèse est étayée par le fait que lors de la phase de saturation par immersion dans l'eau pendant 24h, des fissures macroscopiques traversant les échantillons cap1-MIL-20 et -21 sont apparues, tandis que les six autres échantillons sont restés en apparence sains.

Les courbes de perméabilité relatives pour les six échantillons sains sont présentées en détail pour deux pressions de confinement, 2 et 9 MPa, en échelle classique Fig. D.3 et logarithmique Fig. D.4. Une comparaison au modèle (3.80) est proposée Fig. 4.10.

Dégradation des propriétés de transfert

Les mesures de perméabilité relatives présentées Fig. D.5 suggèrent que certains échantillons subissent une dégradation (micro ou macro fissuration) au cours de la montée en saturation en eau.

D'autre part, aux plus fortes saturations en eau, le cycle de confinement 2-9-2 MPa s'accompagne d'une diminution de la perméabilité mesurée à 2 MPa de confinement, même sur les échantillons initialement sains à l'état sec (peu sensibles au confinement). Pour ces échantillons, cette dépendance de la perméabilité au cycle de confinement peut être attribuée soit à une légère micro-fissuration et plasticité, soit à une réorganisation de l'eau dans l'espace poreux lors du

échantillons	cap1-HAU-1	cap1-MIL-14	cap2//	cap2⊥
$K_{\text{gaz}}^{\text{eff}}(S_w \text{ init.}) \text{ (m}^2\text{)}$	$7,5 \cdot 10^{-19}$	-	$7,6 \cdot 10^{-21}$	$1,8 \cdot 10^{-19}$
$K_{\text{gaz}}^{\text{eff}}(S_w = 0) \text{ (m}^2\text{)}$	-	$1,2 \cdot 10^{-18}$	-	-
$K_{\text{eau}}^{\text{eff}}(S_w = 1) \text{ (m}^2\text{)}$	$7,2 \cdot 10^{-19}$	$5,9 \cdot 10^{-19}$	$5,5 \cdot 10^{-19}$	$5,4 \cdot 10^{-18}$
pression percée (MPa)	2,9	5,8	4,9	0,3-0,4
$K_{\text{gaz}}^{\text{eff}}(S_w \text{ percée}) \text{ (m}^2\text{)}$	-	$8,4 \cdot 10^{-23}$	$1,8 \cdot 10^{-21}$	$1,0 \cdot 10^{-19}$

TAB. 4.4: Propriétés de rétention de roches de couverture

confinement.

Pour gagner en compréhension, les échantillons cap1-MIL-13, cap1-MIL-14 (“sains”) et cap1-MIL-20, cap1-MIL-21 (“dégradés”) ont été re-séchés après l’étape de saturation totale en eau. Une mesure de perméabilité au gaz sous confinement est ensuite réalisée. Les résultats Fig. D.6 montrent la perméabilité effective au gaz à l’état sec, avant et après cycle de saturation, pour ces quatre échantillons.

Les échantillons sains ont la perméabilité la plus faible ; de plus, elle est peu sensible au confinement. Le cycle de saturation (et les cycles de confinement à chaque mesure) a fait perdre 5% de perméabilité à cap1-MIL-13. cap1-MIL-14 est devenu 1,5 à 2 fois plus perméable et montre une légère dépendance au confinement après le cycle de saturation. Au contraire, les deux autres échantillons sont clairement microfissurés. La perméabilité a été multipliée par 15 à 20 pour cap1-MIL-20 et par 2,5 à 5 pour cap1-MIL-21. Tous les deux montrent une dépendance beaucoup plus marquée au confinement.

Pour les 4 échantillons, la table D.3 montre que le coefficient de Klinkenberg a diminué après le cycle hydrique, ce qui est cohérent avec l’interprétation proposée de micro-fissuration partiellement refermée par le confinement.

Perméabilité à l’eau et pression de percée

Deux échantillons de la roche de couverture cap1 et deux de cap2 ont suivi le protocole de mesure de pression de percée. Les résultats sont présentés dans la table 4.4.

Pour la roche cap1, l’échantillon cap1-HAU-1 est prélevé dans la partie haute de la carotte, donc potentiellement légèrement micro-fissuré d’après les observations précédentes sur cette carotte. L’échantillon cap1-MIL-14 provient du milieu de la carotte, est moins poreux que cap1-HAU-1 et estimé sain car sa perméabilité au gaz est peu sensible au confinement (voir table D.2 et Fig. D.6). Il est donc logique que ses propriétés de rétention soit meilleures que celle de cap1-HAU-1 : la pression de percée est plus élevée et les perméabilités plus faibles. Pour l’échantillon cap1-MIL-14, il apparaît que la perméabilité à l’eau est 3 à 4 fois inférieure à la perméabilité intrinsèque mesurée au gaz. Ce phénomène est couramment observé sur les matériaux argileux mais difficile à expliquer. Pour les matériaux cimentaires, la différence peut atteindre deux à trois ordres de grandeur.

Pour la roche cap2, deux échantillons ont été prélevés. Les faces de l’échantillon cap2// sont parallèles aux plans de dépôt et celles de cap2⊥ y sont orthogonales. L’échantillon cap2⊥, traversé par un filet silteux, présente des capacités de rétention manifestement très inférieures à l’échantillon cap2//.

4.3.3 Propriétés poro-mécaniques

Effet de la saturation sur le module de Young Les résultats des essais de compression simple conduits sur la roche de couverture cap1 présentés 4.11 montrent que le module de Young à l’état sec a une grande variabilité. Cette variabilité est corrélée avec la position des

échantillons dans la carotte : les échantillons extraits dans le haut de la carotte sont les plus poreux et parfois micro-fissurés. Par ailleurs, un phénomène intéressant est que le module de Young diminue fortement lorsque que la saturation en eau augmente. L'argile observée Fig. 4.2, qui est à l'interface des amas de nodules de calcite, peut être à l'origine de ce comportement qui a aussi été identifié sur l'argilite.

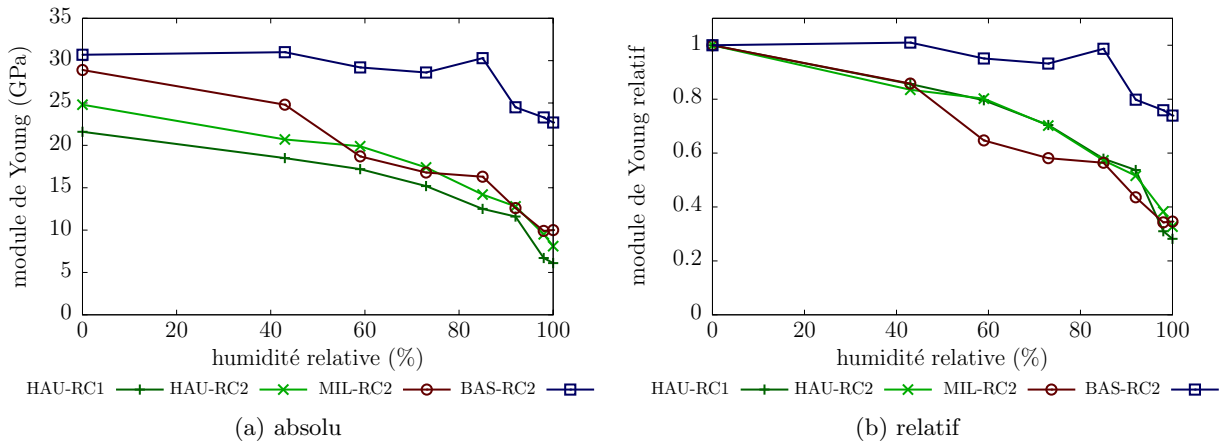


FIG. 4.11: Roche de couverture cap1 : module de Young en fonction de l'humidité relative utilisée pour imposer une saturation.

Porosité Des essais poromécaniques ont été conduits sur deux échantillons sec cap1-HAU-PM2 et LW2-21.

Pour la roche de couverture cap1-HAU-PM2 les pressions de confinement appliquées sont comprises entre 0,5 et 9 MPa afin de rester dans la phase élastique. Les incréments de pression de confinement et de pression d'injection de gaz utilisés sont de 1,5 MPa. Aux incertitudes de mesures près, le module de compression mesuré par des paliers de décharge apparaît indépendant du confinement pour P_c entre 0,5 et 9MPa, avec une moyenne de $K^b = 13,4$ GPa. Le coefficient de Biot a été mesuré pour $P_c = 3, 6$ et 9 MPa. Les valeurs obtenues sont comprises entre 0,94 et 1,24, ce qui prouve que les incertitudes de mesure sont effectivement élevées car le coefficient de Biot ne peut être supérieur à 1. Toutefois, ces résultats laissent à penser que le coefficient de Biot est proche de 1, comme pour l'argilite [22]. Une interprétation possible d'une mesure de coefficient de Biot supérieur à 1 est le signe d'une évolution du matériau au cours de la mesure. En particulier, la méthode suivie (voir section 4.2.5) peut entraîner la ré-ouverture de microfissures au palier d'injection de gaz. Dès lors, la déformation volumique due à un incrément de pression de gaz peut être supérieure à la déformation volumique due à la décharge de la pression de confinement par le même incrément, d'où une "mesure" d'un coefficient de Biot supérieur à 1.

Pour la roche mère LW2-21, des pressions de confinement beaucoup plus élevées (jusqu'à 60 MPa) sont appliquées. Le suivi des déformations indique que le comportement est élasto-plastique. Le module de compression élastique, mesuré à partir de paliers de décharge, augmente linéairement avec le confinement de $K^b = 4$ GPa pour $P_c = 5$ MPa à $K^b = 11$ GPa pour $P_c = 60$ MPa. Le coefficient de Biot, mesuré avec de grandes incertitudes, est proche de 1 et semble diminuer légèrement avec l'augmentation de la pression de confinement.

Concluons ce chapitre sur quelques traits saillants de cette étude. Tout d'abord, la mesure de porosité des roches argileuses se révèle délicate. Le dispositif de mesure de porosité au gaz avec contrôle de la pression de confinement nous paraît bien mieux adapté que la mesure gravimétrique

par immersion dans l'eau qui n'envahit pas tout le réseau poreux. Elle ouvre des perspectives intéressantes puisqu'elle permet d'envisager des essais dans lesquels la déformation volumique totale de l'échantillon ainsi que la variation de volume poreux accessible seraient simultanément mesurés en fonction de la pression de confinement appliquée. Ce type d'essai couplé à des mesures poromécaniques permettrait de gagner en compréhension sur différents phénomènes comme la fermeture de fissures, le blocage de l'accès à certains pores ou l'effondrement de pores sous l'effet du confinement.

La mesure de perméabilité au gaz permet non seulement des mesures plus rapides de la perméabilité qu'au liquide, mais aussi de récupérer une information supplémentaire par l'interprétation des effets de glissement aux parois. Sous réserve d'une modélisation micromécanique appropriée, l'effet du glissement peut être utilisé pour déduire l'ordre de grandeur de la taille médiane des pores. Par ailleurs, cette étude présente une interprétation tout à fait originale à notre connaissance d'une manifestation du glissement aux parois qui dévie de la loi de Klinkenberg. Cette interprétation est basée sur le modèle de cellule perméable équivalente développé au chapitre précédent et illustre la complémentarité entre modélisation et expérimentation.

L'aspect peut être le plus important de ce travail est d'illustrer comment la combinaison de multiples méthodes expérimentales permet d'étayer des hypothèses sur la microstructure comme la présence d'une micro-fissuration. Pour les roches mères étudiées, la présence d'une micro-fissuration a d'abord été suggérée par l'observation d'une chute de porosité accompagnée d'une chute drastique de la perméabilité avec le confinement. L'étude du glissement aux parois a ensuite permis de montrer que les tailles de pores impliquées dans l'écoulement diminuent fortement avec le confinement, jusqu'à atteindre les tailles de pores médianes déduites des interprétations par les lois de Kelvin et Laplace des isothermes de désorption. Cette observation a permis de conforter l'hypothèse selon laquelle à faible confinement l'écoulement est gouverné par la micro-fissuration, qu'un confinement important permet de fermer pour forcer le passage du gaz à travers la "matrice" du matériau. Enfin, l'hypothèse d'une micro-fissuration apporte une explication aux mesures d'un coefficient de Biot apparent supérieur à 1.

D'un point de vue industriel, les mesures de perméabilité relative sur les roches de couverture montrent un point important. Ces roches peuvent être légèrement désaturées sans faillir à leur mission de bloquer la perméation du gaz. Cet aspect rejoint le concept de saturation critique ou seuil de percolation de la perméabilité au gaz en milieu partiellement saturé illustré en fin de chapitre précédent.

Pour conclure cette partie centrée sur l'étude de la perméabilité, nous avons été confronté à la grande difficulté de modéliser la perméabilité à partir de la morphologie du réseau poreux. Si les modèles de cellules perméables équivalentes permettent de rendre compte quantitativement de la perméabilité d'un matériau granulaire relativement simple comme la craie Haubourdin, il n'a pas été possible de proposer un modèle qui concilie les distributions de tailles de pores et les perméabilités mesurées expérimentalement. Un important effort de modélisation pour capturer la morphologie de ces roches est requis. La morphologie doit être précisée au cas par cas, en fonction de chaque type de roche argileuse rencontrée. Enfin, la modélisation micromécanique précise de la perméabilité relative reste une question ouverte.

* *

*

Deuxième partie

Résistance

Chapitre 5

Critère de résistance : homogénéisation numérique

Résumé : *L'objet de ce chapitre est de proposer une méthode numérique pour le calcul du critère de résistance (ductile) macroscopique d'un matériau hétérogène dont la géométrie de la microstructure est complexe. La méthode est basée sur la formulation d'un problème non linéaire fictif pour la recherche des états de contraintes macroscopiques appartenant à la frontière du domaine de résistance homogénéisé. La résolution du problème est effectuée par une méthode type FFT et les résultats utilisés comme champs tests dans l'approche cinématique du Calcul à la Rupture pour quelques critères usuels (Von Mises et elliptique).*

Sommaire

5.1	Résistance d'un milieu hétérogène	118
5.1.1	Description des capacités de résistance	118
5.1.2	Homogénéisation des capacités de résistance	119
5.1.3	Détermination de la frontière du domaine de résistance macroscopique . . .	121
5.2	Approche cinématique par une méthode FFT non linéaire	123
5.2.1	Fonctionnelle Lagrangien augmenté	123
5.2.2	Discrétisation	124
5.2.3	Algorithme de résolution	125
5.2.4	Résolution l'équation non-linéaire	126
5.3	Résultats numériques	129
5.3.1	Critère de Von Mises	129
5.3.2	Critère elliptique	132
5.3.3	Critère de Drucker Prager	134

5.1 Résistance d'un milieu hétérogène

La présentation reprend les exposés de [5, 34, 37].

5.1.1 Description des capacités de résistance

Description statique Les capacités de résistance d'un matériau sont caractérisées par la donnée de l'ensemble G des états de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ admissibles. Le domaine G est convexe et contient l'état de contrainte nul. Il est usuellement caractérisé par un critère de résistance $f(\boldsymbol{\sigma})$:

$$\boldsymbol{\sigma} \in G \Leftrightarrow f(\boldsymbol{\sigma}) \leq 0. \quad (5.1)$$

La fonction f est convexe.

Description cinématique De façon duale et équivalente, le domaine G peut être décrit par sa fonction d'appui π définie pour toutes les directions \mathbf{d} par :

$$\pi(\mathbf{d}) = \sup_{\boldsymbol{\sigma} \in G} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}. \quad (5.2)$$

La variable \mathbf{d} est un tenseur d'ordre 2 auquel on confère le sens physique de taux de déformation. La fonction d'appui correspond alors à la puissance dissipée. La fonction d'appui π est à valeurs dans \mathbb{R}^+ et convexe par construction. De manière équivalente, l'admissibilité d'un état de contrainte est caractérisée par (5.1) ou

$$\boldsymbol{\sigma} \in G \Leftrightarrow \forall \mathbf{d}, \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d} \leq \pi(\mathbf{d}). \quad (5.3)$$

Géométriquement, le domaine convexe G est situé sous l'hyperplan $\mathcal{H}(\mathbf{d})$ d'équation $\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d} = \pi(\mathbf{d})$ pour toute direction \mathbf{d} telle que $\pi(\mathbf{d}) < +\infty$.

Frontière du domaine de résistance Si un état de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ appartient au domaine G et à l'hyperplan $\mathcal{H}(\mathbf{d})$, alors il appartient à la frontière ∂G de G en un point où \mathbf{d} est la normale extérieure à ∂G :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma} \in G \\ \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d} = \pi(\mathbf{d}) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \boldsymbol{\sigma} \in \partial G \\ \exists \lambda > 0, \mathbf{d} = \lambda \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\sigma}) \end{cases} \quad (5.4)$$

Par ailleurs, la fonction d'appui π est positivement homogène de degré 1, c'est à dire

$$\forall t > 0, \forall \mathbf{d}, \pi(t\mathbf{d}) = t\pi(\mathbf{d}). \quad (5.5)$$

Si π est suffisamment régulière, la dérivation de (5.5) par rapport à t en $t = 1$ fournit l'identité d'Euler :

$$\frac{\partial \pi}{\partial \mathbf{d}}(\mathbf{d}) : \mathbf{d} = \pi(\mathbf{d}). \quad (5.6)$$

Montrons que $\partial\pi/\partial\mathbf{d}(\mathbf{d})$ appartient à ∂G . L'identité (5.6) implique que $\partial\pi/\partial\mathbf{d}(\mathbf{d})$ appartient à l'hyperplan $\mathcal{H}(\mathbf{d})$. Par ailleurs, pour toute direction \mathbf{d}' , la convexité de π s'écrit :

$$\pi(\mathbf{d}') - \pi(\mathbf{d}) \geq \frac{\partial \pi}{\partial \mathbf{d}}(\mathbf{d}) : (\mathbf{d}' - \mathbf{d}). \quad (5.7)$$

L'utilisation de (5.6) dans (5.7) fournit

$$\forall \mathbf{d}', \frac{\partial \pi}{\partial \mathbf{d}}(\mathbf{d}) : \mathbf{d}' \leq \pi(\mathbf{d}'). \quad (5.8)$$

D'après la définition duale (5.3) d'un état de contrainte admissible, on en déduit que $\partial\pi/\partial\mathbf{d}(\mathbf{d})$ appartient à G . Ainsi, l'implication (5.4) permet d'affirmer que $\partial\pi/\partial\mathbf{d}(\mathbf{d})$ appartient à la frontière de G :

$$\frac{\partial\pi}{\partial\mathbf{d}}(\mathbf{d}) \in \partial G. \quad (5.9)$$

Cette propriété s'avèrera particulièrement intéressante pour déterminer les capacités de résistance macroscopiques d'un milieu hétérogène.

5.1.2 Homogénéisation des capacités de résistance

Définitions statique et cinématique du domaine de résistance macroscopique

Problème de calcul à la rupture On considère un VER Ω d'un matériau hétérogène, représentatif de ses capacités de résistance. En chaque point \mathbf{z} de Ω les capacités de résistance sont décrites par un domaine de résistance $G(\mathbf{z})$, qui est caractérisé de façon équivalente par le critère $f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{z})$ ou la fonction d'appui $\pi(\mathbf{d}, \mathbf{z})$. La capacité de résistance macroscopique est définie par l'intermédiaire d'un problème de calcul à la rupture posé sur le VER Ω . Dans ce chapitre, on considère un mode de chargement piloté en taux de déformation avec conditions aux limites périodiques :

$$\forall \mathbf{z} \in \partial\Omega, \begin{cases} \mathbf{v}(\mathbf{z}) = \mathbf{D} \cdot \mathbf{z} + \mathbf{v}^{\text{per}}(\mathbf{z}) \text{ avec } \mathbf{v}^{\text{per}}(\mathbf{z}) \text{ périodique} \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{z}) \text{ anti-périodique} \end{cases} \quad (5.10)$$

où \mathbf{D} est le taux de déformation macroscopique, $\mathbf{v}(\mathbf{z})$ un champ de vitesse cinématiquement admissible avec \mathbf{D} , $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z})$ un champ de contrainte et $\mathbf{n}(\mathbf{z})$ la normale unitaire extérieure à $\partial\Omega$. L'ensemble des champs de vitesse microscopiques cinématiquement admissibles avec \mathbf{D} est :

$$\mathcal{C}(\mathbf{D}) = \{ \mathbf{u} \mid \mathcal{C}^1 \text{ par morceaux, } \forall \mathbf{z} \in \partial\Omega \mathbf{u}(\mathbf{z}) - \mathbf{D} \cdot \mathbf{z} \text{ périodique} \}. \quad (5.11)$$

La grandeur duale de \mathbf{D} est identifiée par considération de la puissance des efforts extérieurs \mathcal{P}^{ext} et application du lemme de Hill :

$$\mathcal{P}^{\text{ext}} = \int_{\partial\Omega} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \, dS = \int_{\partial\Omega} \mathbf{z} \cdot \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \, dS = |\Omega| \mathbf{D} : \bar{\boldsymbol{\sigma}} \quad (5.12)$$

où l'on a utilisé la périodicité de \mathbf{v}^{per} , l'anti-périodicité de $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ et $\text{div} \boldsymbol{\sigma} = 0$. La grandeur duale de \mathbf{D} est donc la contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma} = \bar{\boldsymbol{\sigma}}$. L'ensemble des champs de contrainte microscopiques statiquement admissibles avec $\boldsymbol{\Sigma}$ est :

$$\mathcal{S}(\boldsymbol{\Sigma}) = \{ \boldsymbol{\sigma} \mid \text{div} \boldsymbol{\sigma} = 0, \bar{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{\Sigma}, \forall \mathbf{z} \in \partial\Omega \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{n} \text{ anti-périodique} \}. \quad (5.13)$$

De manière plus générale, l'ensemble des champs statiquement admissibles est $\mathcal{S} = \cup_{\boldsymbol{\Sigma}} \mathcal{S}(\boldsymbol{\Sigma})$.

Définition statique de G^{hom} Un état de contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma}$ est dit admissible si il existe un champ de contrainte microscopique $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z})$ statiquement admissible avec $\boldsymbol{\Sigma}$ et compatible en tout point \mathbf{z} de Ω avec le domaine de résistance local $G(\mathbf{z})$. Le domaine G^{hom} des états de contrainte macroscopiques admissibles est donc défini par :

$$\boldsymbol{\Sigma} \in G^{\text{hom}} \Leftrightarrow \exists \boldsymbol{\sigma}, \begin{cases} \boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}(\boldsymbol{\Sigma}) \\ \forall \mathbf{z} \in \Omega, \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}) \in G(\mathbf{z}) \end{cases} \quad (5.14)$$

Définition cinématique de G^{hom} Soit Σ un état de contrainte macroscopique admissible et $\sigma(\mathbf{z})$ un champ de contrainte microscopique qui possède les propriétés de (5.14). D'après l'application du lemme de Hill (5.12) et la définition de la fonction d'appui (5.2), il vient :

$$\Sigma \in G^{\text{hom}} \Rightarrow \forall \mathbf{D}, \forall \mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{D}), \Sigma : \mathbf{D} \leq \overline{\pi(\mathbf{d}(\mathbf{u}), \mathbf{z})} \quad (5.15)$$

Puis, le minimum sur tous les champs cinématiquement admissibles donne :

$$\Sigma \in G^{\text{hom}} \Rightarrow \forall \mathbf{D}, \Sigma : \mathbf{D} \leq \Pi^{\text{hom}}(\mathbf{D}), \quad (5.16)$$

où l'on a introduit

$$\Pi^{\text{hom}}(\mathbf{D}) = \inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{D})} \overline{\pi(\mathbf{d}(\mathbf{u}), \mathbf{z})}. \quad (5.17)$$

En vertu d'un théorème général d'analyse limite [40] qui énonce l'équivalence des approches statique et cinématique, la réciproque de (5.16) est valable :

$$\Sigma \in G^{\text{hom}} \Leftrightarrow \forall \mathbf{D}, \Sigma : \mathbf{D} \leq \Pi^{\text{hom}}(\mathbf{D}) \quad (5.18)$$

L'application de (5.3) montre alors que $\Pi^{\text{hom}}(\mathbf{D})$ peut effectivement être interprétée comme la fonction d'appui de G^{hom} . Les champs de vitesse candidats *pertinents* pour réaliser le minimum de (5.17) dans $\mathcal{C}(\mathbf{D})$ doivent correspondre à une valeur finie de π . L'optimisation de (5.17) se fait donc en pratique sur le sous espace de $\mathcal{C}(\mathbf{D})$ de champs cinématiquement admissibles qui vérifient les conditions de pertinence assurant $\pi(\mathbf{d}) < \infty$.

Remarquons que l'ensemble $\mathcal{C}(\mathbf{D})$ contient des champs de vitesse avec discontinuités. Si un champ $\mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{D})$ présente un saut $\llbracket \mathbf{u} \rrbracket$ à travers une surface \mathcal{S} de normale unitaire \mathbf{n} , alors \mathbf{d} est singulier sur \mathcal{S} . Le taux de déformation doit alors être exprimé au sens des distributions

$$\mathbf{d} = \{\mathbf{d}\} + \llbracket \mathbf{u} \rrbracket \overset{s}{\otimes} \mathbf{n} \delta_{\mathcal{S}} \quad (5.19)$$

où $\{\mathbf{d}\}$ est la partie régulière de \mathbf{d} et $\delta_{\mathcal{S}}$ la distribution de Dirac de la surface de discontinuité \mathcal{S} . La moyenne de la fonction d'appui intervenant dans (5.17) fait alors apparaître une contribution volumique de la partie régulière $\{\mathbf{d}\}$ et une contribution surfacique de la discontinuité $\llbracket \mathbf{u} \rrbracket \otimes \mathbf{n}$:

$$\overline{\pi(\mathbf{d}(\mathbf{u}), \mathbf{z})} = \frac{1}{|\Omega|} \left(\int_{\Omega} \pi(\{\mathbf{d}(\mathbf{u})\}, \mathbf{z}) \, dV + \int_{\mathcal{S}} \pi(\llbracket \mathbf{u} \rrbracket \overset{s}{\otimes} \mathbf{n}, \mathbf{z}) \, dS \right) \quad (5.20)$$

Les approches statiques et cinématiques du calcul à la rupture permettent alors de construire des encadrements des capacités de résistance macroscopiques :

– *Approche statique par l'intérieur*

La construction d'un champ de contrainte microscopique compatible en tout point avec le critère de résistance local et statiquement admissible avec un état de contrainte macroscopique Σ implique que $\Sigma \in G^{\text{hom}}$. Si cette opération est répétée pour plusieurs états de contrainte macroscopiques admissibles, l'enveloppe convexe de ces états de contrainte est un domaine nécessairement inclus dans G^{hom} .

– *Approche cinématique par l'extérieur*

La construction d'un champ de vitesse cinématiquement admissible avec un taux de déformation macroscopique \mathbf{D} permet de déterminer un majorant $\Pi^{\text{hom}}(\mathbf{D})$ et donc un demi-espace qui contient nécessairement l'intégralité de G^{hom} . Si cette opération est répétée pour différentes directions \mathbf{D} , l'intersection des demi-espaces correspondants est un domaine convexe qui contient entièrement G^{hom} .

Une mise en oeuvre numérique efficace des approches statique et cinématique basée sur le formalisme de la programmation conique a été proposée et illustrée notamment par [16, 45, 57, 76]. Dans la section suivante, une approche alternative est présentée.

5.1.3 Détermination de la frontière du domaine de résistance macroscopique

L'objet de cette section est de caractériser chaque état de contrainte macroscopique de la frontière ∂G^{hom} comme la moyenne d'un champ de contrainte solution d'un problème aux limites [60].

Définition du problème visqueux non-linéaire fictif

La définition de la fonction d'appui macroscopique présentée dans (5.17) montre que $\Pi^{\text{hom}}(\mathbf{D})$ s'obtient par la résolution d'un problème de minimisation de $\pi(\mathbf{d}(\mathbf{u}), \mathbf{z})$ sur les champs de vitesse cinématiquement admissibles $\mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{D})$. Ce problème de minimisation a formellement la même structure qu'un problème d'élasticité non linéaire dans lequel la fonction d'appui joue le rôle de l'énergie libre volumique locale et la vitesse celui du déplacement. Supposons que la fonction d'appui π soit suffisamment régulière. Il est alors légitime de s'intéresser au problème visqueux fictif suivant dont les inconnues sont le champ de vitesse \mathbf{v} et le champ de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$:

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S} \\ \mathbf{v} \in \mathcal{C}(\mathbf{D}) \text{ et } \mathbf{d} = \mathbf{grad}^s \mathbf{v} \\ \forall \mathbf{z} \in \Omega, \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}) = \frac{\partial \pi(\mathbf{d}, \mathbf{z})}{\partial \mathbf{d}} \end{cases} \quad (5.21)$$

Signalons qu'en $\mathbf{d} = 0$ la fonction π n'est pas différentiable. La condition $\boldsymbol{\sigma} = \partial \pi / \partial \mathbf{d}(\mathbf{d})$ doit alors être remplacée par $\boldsymbol{\sigma} \in G$ en tout point où \mathbf{d} s'annule [5].

Cherchons à établir que le champ de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ solution de (5.21) est statiquement admissible avec un état de contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma}$ situé sur la frontière ∂G^{hom} . Tout d'abord, la propriété (5.9) et la définition statique (5.14) de G^{hom} indiquent que $\boldsymbol{\Sigma} = \overline{\partial \pi / \partial \mathbf{d}} \in G^{\text{hom}}$. En second lieu, l'intégration de l'identité d'Euler (5.6) et le fait que \mathbf{v} est un champ cinématiquement admissible avec \mathbf{D} conduisent à :

$$\overline{\frac{\partial \pi}{\partial \mathbf{d}}(\mathbf{d})} : \mathbf{d} = \overline{\pi(\mathbf{d})} \geq \Pi^{\text{hom}}(\mathbf{D}). \quad (5.22)$$

Puis, l'application du lemme de Hill au membre de gauche fournit l'inégalité :

$$\overline{\frac{\partial \pi}{\partial \mathbf{d}}(\mathbf{d})} : \mathbf{d} = \overline{\frac{\partial \pi}{\partial \mathbf{d}}(\mathbf{d})} : \bar{\mathbf{d}} = \boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{D} \geq \Pi^{\text{hom}}(\mathbf{D}). \quad (5.23)$$

Or $\boldsymbol{\Sigma} \in G^{\text{hom}}$ donc $\boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{D} \leq \Pi^{\text{hom}}(\mathbf{D})$ d'après (5.3), de sorte que $\boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{D} = \Pi^{\text{hom}}(\mathbf{D})$. La propriété (5.4) permet de conclure que

$$\begin{cases} \boldsymbol{\Sigma} = \overline{\frac{\partial \pi}{\partial \mathbf{d}}(\mathbf{d})} \in \partial G^{\text{hom}} \\ \mathbf{D} \text{ est la normale extérieure à } \partial G^{\text{hom}} \text{ au point } \boldsymbol{\Sigma} \end{cases} \quad (5.24)$$

Ainsi, la résolution du problème visqueux fictif (5.21) fournit une stratégie pour construire la surface ∂G^{hom} .

Notons que la définition du problème (5.21) est aussi motivée par le théorème d'association [84]. En effet, soit un état de contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma}$ qui appartient à ∂G^{hom} en un point où \mathbf{D} est normale extérieure. Supposons avoir trouvé un couple $(\mathbf{v}, \boldsymbol{\sigma})$ tel que $\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}(\boldsymbol{\Sigma})$ soit compatible avec les critères de résistance locaux et $\mathbf{v} \in \mathcal{C}(\mathbf{D})$ réalise le minimum dans (5.17). Le théorème d'association stipule alors qu'en tout point où $\mathbf{d}(\mathbf{v}) \neq 0$, $\boldsymbol{\sigma}$ appartient à la frontière ∂G en un point où $\mathbf{d}(\mathbf{v})$ est normale extérieure. En revanche, en tout point où $\mathbf{d}(\mathbf{v}) = 0$, $\boldsymbol{\sigma}$ peut être situé n'importe où dans G .

Critères de résistance locaux fonction des deux premiers invariants

Considérons le cas où le critère de résistance local $f(\boldsymbol{\sigma})$ est régi par les deux premiers invariants du tenseur des contraintes :

$$f(\boldsymbol{\sigma}) = f(\sigma_m, \sigma_d) \text{ avec } \sigma_m = \text{tr } \boldsymbol{\sigma} / 3 \quad ; \quad \sigma_d = \boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\sigma}_d, \quad (5.25)$$

où $\boldsymbol{\sigma}_d = \boldsymbol{\sigma} - \sigma_m \mathbf{1}$ est la partie déviatorique du tenseur des contraintes. Par définition (5.2), la fonction d'appui s'écrit

$$\pi(\mathbf{d}) = \sup\{\sigma_m d_v + \boldsymbol{\sigma}_d : \mathbf{d}_d \mid f(\sigma_m, \sigma_d) \leq 0\}. \quad (5.26)$$

Or, à σ_d fixé, $\boldsymbol{\sigma}_d : \mathbf{d}_d$ est maximal pour $\boldsymbol{\sigma}_d$ colinéaire à \mathbf{d}_d . Finalement, la fonction d'appui n'est elle aussi fonction que des deux premiers invariants de \mathbf{d} :

$$\pi(\mathbf{d}) = \sup\{\sigma_m d_v + \sigma_d d_d \mid f(\sigma_m, \sigma_d) \leq 0\} = \pi(d_v, d_d). \quad (5.27)$$

La loi de comportement fictive non linéaire peut s'écrire sous la forme

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \pi}{\partial \mathbf{d}}(d_v, d_d) = \frac{\partial \pi}{\partial d_v}(d_v, d_d) \mathbf{1} + \frac{\partial \pi}{\partial d_d}(d_v, d_d) \frac{\mathbf{d}_d}{d_d} = \mathbb{C}(d_v, d_d) : \mathbf{d} \quad (5.28)$$

où le tenseur de rigidité sécant $\mathbb{C}(d_v, d_d)$ est isotrope et défini par

$$\mathbb{C}(d_v, d_d) = 3k(d_v, d_d)\mathbb{J} + 2\mu(d_v, d_d)\mathbb{K} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} k(d_v, d_d) = \frac{1}{d_v} \frac{\partial \pi(d_v, d_d)}{\partial d_v} \\ 2\mu(d_v, d_d) = \frac{1}{d_d} \frac{\partial \pi(d_v, d_d)}{\partial d_d} \end{cases} \quad (5.29)$$

Cette forme de loi de comportement n'est pas unique. Par exemple, la loi de comportement peut être écrite sous une forme précontrainte $\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}(\mathbf{d}) : \mathbf{d} + \boldsymbol{\sigma}^p(\mathbf{d})$. Pour conserver l'isotropie de la formulation, il faut de plus choisir une précontrainte sphérique : $\boldsymbol{\sigma}^p(\mathbf{d}) = \sigma^p(\mathbf{d}) \mathbf{1}$. Le choix d'une formulation précontrainte peut par exemple être motivé par la conservation du caractère défini positif du tenseur $\mathbb{C}(\mathbf{d})$.

Régularisation du critère de résistance

Les raisonnements précédents ont été développés sous l'hypothèse que la fonction d'appui π du domaine G est suffisamment régulière. Cependant, pour de nombreux critères usuels (Von Mises, Tresca, Drucker-Prager, Mohr-Coulomb), la fonction d'appui n'est pas différentiable. Afin de se ramener à la formulation d'un problème visqueux fictif (5.21), la fonction d'appui doit être régularisée. À cet effet, [5] propose de construire une suite de critères $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ qui correspond à une suite de domaines $(G_n)_{n \in \mathbb{N}}$ qui vérifient les propriétés :

1. $\forall n \in \mathbb{N}$, G_n est borné et strictement convexe,
2. la suite $(G_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est croissante : $\forall n \in \mathbb{N}$, $G_n \subset G_{n+1} \subset G$,
3. la limite de la suite $(G_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est G au sens : l'adhérence de $\overline{\cup_{n \in \mathbb{N}} G_n}$ est égale à G .

Pour tout $n \in \mathbb{N}$, le caractère borné strictement convexe de G_n assure la différentiabilité de fonction d'appui π_n correspondante, hormis aux points anguleux pour lesquels il faut faire intervenir le sous-différentiel de π_n [5].

Supposons qu'une suite de critères $(f_n(\mathbf{z}))_{n \in \mathbb{N}}$ est construite suivant les propriétés requises ci-dessus en chaque point \mathbf{z} de Ω où $\pi(\mathbf{z})$ n'est pas suffisamment régulière. Alors, pour toute valeur de n , la frontière du domaine de résistance homogénéisé correspondant G_n^{hom} peut être obtenue théoriquement par la résolution de (5.21). D'après la définition statique (5.14) de G_n^{hom} , on vérifie aisément que $G_n^{\text{hom}} \subset G_{n+1}^{\text{hom}} \subset G^{\text{hom}}$. On admettra que la suite $(G_n^{\text{hom}})_{n \in \mathbb{N}}$ tend vers G^{hom} au sens : l'adhérence de $\overline{\cup_{n \in \mathbb{N}} G_n^{\text{hom}}}$ est égale à G^{hom} .

Régularisation de la fonction d'appui

Une stratégie alternative est de régulariser directement la fonction d'appui π par une suite de potentiels $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ qui vérifient les propriétés :

1. $\forall n \in \mathbb{N}$, ψ_n est une fonction de \mathbf{d} convexe de classe \mathcal{C}^1 à valeurs dans \mathbb{R}^+ ,
2. $\forall \mathbf{d}$, $\lim_{n \rightarrow \infty} \psi_n(\mathbf{d}) = \pi(\mathbf{d})$.

Lors de l'utilisation de cette méthode, il faut garder à l'esprit que la fonction ψ_n n'est pas nécessairement positivement homogène de degré 1. Le cas échéant, elle n'est pas la fonction d'appui d'un domaine.

Supposons qu'en chaque point \mathbf{z} de Ω où $\pi(\mathbf{z})$ n'est pas suffisamment régulière une suite de potentiels $(\psi_n(\mathbf{z}))_{n \in \mathbb{N}}$ est construite suivant les propriétés requises ci-dessus. En chaque point où $\pi(\mathbf{z})$ est régulière, le potentiel $\psi_n(\mathbf{z})$ est pris égal à $\pi(\mathbf{z})$. Supposons par ailleurs que ces suites de potentiels vérifient $\forall n \in \mathbb{N}$ et $\forall \mathbf{d}$ la propriété additionnelle $\psi_n(\mathbf{d}, \mathbf{z}) \geq \psi_{n+1}(\mathbf{d}, \mathbf{z}) \geq \psi(\mathbf{d}, \mathbf{z})$. Pour toute valeur de n , notons \mathbf{v}_n le champ qui réalise le minimum :

$$\Psi_n^{\text{hom}}(\mathbf{D}) = \inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{D})} \overline{\psi_n(\mathbf{d}(\mathbf{u}), \mathbf{z})} = \overline{\psi_n(\mathbf{d}(\mathbf{v}_n), \mathbf{z})}, \quad (5.30)$$

sous réserve que ce minimum existe. Alors

$$\Psi_{n+1}^{\text{hom}}(\mathbf{D}) = \inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{C}(\mathbf{D})} \overline{\psi_{n+1}(\mathbf{d}(\mathbf{u}), \mathbf{z})} \leq \overline{\psi_{n+1}(\mathbf{d}(\mathbf{v}_n), \mathbf{z})} \leq \overline{\psi_n(\mathbf{d}(\mathbf{v}_n), \mathbf{z})} = \Psi_n^{\text{hom}}(\mathbf{D}) \quad (5.31)$$

et la suite $(\Psi_n^{\text{hom}}(\mathbf{D}))_{n \in \mathbb{N}}$ vérifie

$$\forall n \in \mathbb{N} \quad \Pi^{\text{hom}}(\mathbf{D}) \leq \Psi_{n+1}^{\text{hom}}(\mathbf{D}) \leq \Psi_n^{\text{hom}}(\mathbf{D}). \quad (5.32)$$

On supposera que $\lim_{n \rightarrow \infty} \Psi_n^{\text{hom}}(\mathbf{D}) = \Pi^{\text{hom}}(\mathbf{D})$.

5.2 Approche cinématique par une méthode FFT non linéaire

L'idée proposée est de résoudre de façon approchée le problème non linéaire fictif (5.21) par une méthode numérique. La cinématique obtenue sera alors utilisée dans l'approche cinématique du calcul à la rupture pour fournir un majorant de la fonction d'appui macroscopique.

La présentation se base ici sur le schéma itératif proposé par Michel *et al.* [66] pour la résolution des problèmes non linéaires par FFT. Néanmoins, la méthode proposée n'est a priori pas restreinte à ce schéma de résolution. Le schéma étudié ici repose sur la stationarité d'une fonctionnelle appelée Lagrangien augmenté et la résolution du problème discrétisé non linéaire par un algorithme de Uzawa. L'exposé de Michel *et al.* [66] est ici adapté au problème d'homogénéisation du critère de résistance qui nous intéresse.

5.2.1 Fonctionnelle Lagrangien augmenté

Le problème de minimisation à résoudre est (5.17) :

$$\Pi^{\text{hom}}(\mathbf{D}) = \inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{K}(\mathbf{D})} \overline{\pi(\mathbf{d}(\mathbf{u}))}. \quad (5.33)$$

Dans notre cas, π a le sens d'une fonction d'appui du critère de résistance local. En tout point \mathbf{z} , la loi de comportement dérive du potentiel $\pi(\mathbf{d}, \mathbf{z})$:

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{z}) = \frac{\partial \pi}{\partial \mathbf{d}}(\mathbf{d}, \mathbf{z}). \quad (5.34)$$

Le problème de minimisation peut être reformulé par introduction d'une liaison $\mathbf{e}(\mathbf{z}) - \mathbf{d}(\mathbf{u}(\mathbf{z})) = 0$ en tout point de Ω . Le multiplicateur de Lagrange associé à cette liaison est noté $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{z})$. Le Lagrangien usuel serait alors

$$\mathcal{L}(\mathbf{d}(\mathbf{u}), \mathbf{e}, \boldsymbol{\lambda}) = \overline{\pi(\mathbf{e})} + \overline{\boldsymbol{\lambda} : (\mathbf{d}(\mathbf{u}) - \mathbf{e})} \quad (5.35)$$

Cependant, dans un soucis de stabilité numérique, de nombreux auteurs ont recours à une autre fonctionnelle appelée Lagrangien augmenté et définie comme

$$\mathcal{L}_0(\mathbf{d}(\mathbf{u}), \mathbf{e}, \boldsymbol{\lambda}) = \overline{\pi(\mathbf{e})} + \overline{\boldsymbol{\lambda} : (\mathbf{d}(\mathbf{u}) - \mathbf{e})} + \frac{1}{2} \overline{(\mathbf{d}(\mathbf{u}) - \mathbf{e}) : \mathbb{C}_0 : (\mathbf{d}(\mathbf{u}) - \mathbf{e})}, \quad (5.36)$$

où la raideur homogène \mathbb{C}_0 , associée à une forme quadratique définie positive, a été introduite. Le problème initial est retrouvé en écrivant la stationnarité du Lagrangien augmenté \mathcal{L}_0

$$\inf_{\mathbf{e}} \inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{K}(\mathbf{D})} \sup_{\boldsymbol{\lambda}} \mathcal{L}_0(\mathbf{d}(\mathbf{u}), \mathbf{e}, \boldsymbol{\lambda}) = \sup_{\boldsymbol{\lambda}} \inf_{\mathbf{e}} \inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{K}(\mathbf{D})} \mathcal{L}_0(\mathbf{d}(\mathbf{u}), \mathbf{e}, \boldsymbol{\lambda}). \quad (5.37)$$

L'échange entre inf et sup est justifié dans le cas où $\pi(\mathbf{d})$ est convexe et a une croissance suffisante à l'infini. La deuxième écriture est intéressante puisqu'elle fait apparaître un problème linéaire avec une raideur uniforme \mathbb{C}_0 et une précontrainte $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\lambda} - \mathbb{C}_0 : \mathbf{e}$. La solution de ce problème est connue et fait appel à l'opérateur de Green $\boldsymbol{\Gamma}_0$ du milieu uniforme de raideur \mathbb{C}_0 . Le taux de déformation solution est $\mathbf{d} = \mathbf{D} - \boldsymbol{\Gamma}_0 * \boldsymbol{\tau}$.

Le système non linéaire qui résulte de l'écriture de la stationnarité du Lagrangien augmenté (5.36) est alors

$$\forall \mathbf{z} \in \Omega, \begin{cases} \mathbf{d}(\mathbf{u}(\mathbf{z})) = \mathbf{D} - [\boldsymbol{\Gamma}_0 * (\boldsymbol{\lambda} - \mathbb{C}_0 : \mathbf{e})](\mathbf{z}) \\ \mathbf{d}(\mathbf{u}(\mathbf{z})) - \mathbf{e}(\mathbf{z}) = 0 \\ \frac{\partial \pi(\mathbf{e}, \mathbf{z})}{\partial \mathbf{e}} - \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{z}) + \mathbb{C}_0 : (\mathbf{e}(\mathbf{z}) - \mathbf{d}(\mathbf{u}(\mathbf{z}))) = 0 \end{cases} \quad (5.38)$$

Lorsque ce système est résolu exactement, \mathbf{e} est égal au champ de taux de déformation et $\boldsymbol{\lambda}$ est égal au champ de contrainte.

5.2.2 Discrétisation

Revenons maintenant dans l'optique d'une résolution numérique du problème (5.33) par une méthode FFT. Dans un premier temps, une grille régulière de taille $N = N_1 \times \dots \times N_d$ divisant la cellule de périodicité Ω est introduite ($d = 2$: problème plan, $d = 3$: problème tridimensionnel). La grille est constituée de voxels Ω_β indexés par le multi-index $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_d)$ avec $\beta_i \in \{0, 1, \dots, N_i - 1\}$. Le sous-ensemble de \mathbb{N}^d parcouru par le multi-index $\boldsymbol{\beta}$ est noté \mathcal{I} . Les champs \mathbf{e} et $\boldsymbol{\lambda}$ intervenant dans (5.36) sont discrétisés en champs constants sur chaque voxel :

$$\mathbf{e}(\mathbf{z}) = \sum_{\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{I}} \mathbf{e}_\beta \chi_\beta(\mathbf{z}) \quad ; \quad \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{z}) = \sum_{\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{I}} \boldsymbol{\lambda}_\beta \chi_\beta(\mathbf{z}) \quad (5.39)$$

où χ_β est la fonction indicatrice du voxel Ω_β .

La stationnarité de la fonctionnelle (5.36) est écrite sur les deux séries discrètes $(\boldsymbol{\lambda}_\beta)_{\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{I}}$ et $(\mathbf{e}_\beta)_{\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{I}}$ ainsi que sur l'espace des champs de vitesse cinématiquement admissibles $\mathcal{K}(\mathbf{D})$. Le système discrétisé résultant est

$$\forall \boldsymbol{\beta} \in \mathcal{I}, \begin{cases} \mathbf{d}_\beta = \mathbf{D} - \overline{\boldsymbol{\Gamma}_0 * (\boldsymbol{\lambda} - \mathbb{C}_0 : \mathbf{e})}^\beta \\ \mathbf{d}_\beta = \mathbf{e}_\beta \\ \frac{\partial \pi_\beta(\mathbf{e}_\beta)}{\partial \mathbf{e}} + \mathbb{C}_0 : \mathbf{e}_\beta = \boldsymbol{\lambda}_\beta + \mathbb{C}_0 : \mathbf{d}_\beta \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \mathbf{d}_\beta = \overline{\mathbf{d}(\mathbf{u})}^\beta \\ \pi_\beta(\mathbf{e}) = \overline{\pi(\mathbf{e}, \mathbf{z})}^\beta \end{cases} \quad (5.40)$$

Dès ce stade, on peut anticiper que la discrétisation proposée ne permet pas de rendre compte de mécanismes avec discontinuité de vitesse. Cependant, un enrichissement de l'espace de discrétisation résulterait en une complexité mathématique et numérique néfaste aux intérêts de la méthode que sont la relative simplicité de sa mise en oeuvre et sa rapidité d'exécution.

5.2.3 Algorithme de résolution

Le système discrétisé non linéaire (5.40) peut être résolu par l'algorithme itératif de Uzawa. Chaque itération de l'algorithme de Uzawa suit les trois étapes décrites ci-dessous :

itération i : $(\lambda_\beta^{i-1})_{\beta \in \mathcal{I}}$ et $(e_\beta^{i-1})_{\beta \in \mathcal{I}}$ connus

1. calculer \mathbf{d}^i pour la précontrainte $\lambda^{i-1} - \mathbb{C}_0 : e^{i-1}$

$$\mathbf{d}(\mathbf{u}^i) = \mathbf{D} - \Gamma_0 * (\lambda^{i-1} - \mathbb{C}_0 : e^{i-1}) \text{ et } \mathbf{d}_\beta^i = \overline{\mathbf{d}(\mathbf{u}^i)}^\beta \quad (5.41)$$

2. $\forall \beta \in \mathcal{I}$ calculer e_β^i solution de l'équation non linéaire

$$\frac{\partial \pi_\beta(e_\beta^i)}{\partial e} + \mathbb{C}_0 : e_\beta^i = \mathbb{C}_0 : \mathbf{d}_\beta^i + \lambda_\beta^{i-1} \quad (5.42)$$

3. $\forall \beta \in \mathcal{I}$ mettre à jour λ_β^i

$$\lambda_\beta^i = \lambda_\beta^{i-1} + \mathbb{C}_0 : (\mathbf{d}_\beta^i - e_\beta^i) = \frac{\partial \pi_\beta(e_\beta^i)}{\partial e} \quad (5.43)$$

Taux de déformation À chaque itération i , le champ $\mathbf{d}(\mathbf{u}^i)$ calculé à l'étape 1 est cinématiquement admissible avec \mathbf{D} par construction. Par conséquent, un majorant $\Pi^{\text{maj}}(\mathbf{D})$ de $\Pi^{\text{hom}}(\mathbf{D})$ est obtenu à chaque itération :

$$\Pi^{\text{hom}}(\mathbf{D}) \leq \Pi^{\text{maj}}(\mathbf{D}) = \overline{\pi(\mathbf{d}(\mathbf{u}^i))}. \quad (5.44)$$

Cependant, numériquement, l'opérateur de Green discrétisé (B.37) ne permet que d'accéder à la moyenne par voxel du taux de déformation $\mathbf{d}_\beta^i = \overline{\mathbf{d}(\mathbf{u}^i(\mathbf{z}))}^\beta$. Sous réserve que la discrétisation soit suffisamment fine, l'approximation suivante est utilisée :

$$\overline{\pi(\mathbf{d}(\mathbf{u}^i))} \approx \frac{1}{N} \sum_{\beta \in \mathcal{I}} \pi_\beta(\mathbf{d}_\beta^i). \quad (5.45)$$

Cette approximation ne conserve malheureusement pas rigoureusement le statut de borne supérieure de l'approche cinématique du calcul à la rupture. Dans la suite, on supposera cependant que l'erreur commise est négligeable.

Le résultat d'un calcul est donc un hyperplan de l'espace des contraintes, de normale \mathbf{D} et de distance $\Pi^{\text{maj}}(\mathbf{D})$ à l'origine. L'approche cinématique du calcul à la rupture assure qu'aucun état de contrainte macroscopique Σ appartenant au demi-espace défini par $\Sigma : \mathbf{D} > \Pi^{\text{maj}}(\mathbf{D})$ n'appartient au domaine de résistance macroscopique. Par conséquent, l'exploration d'un nombre fini de directions \mathbf{D}^k de \mathbb{R}^6 permet de définir une série de demi-espaces $\Sigma : \mathbf{D}^k \leq \Pi^{\text{maj}}(\mathbf{D}^k)$ dont l'intersection contient assurément le domaine de résistance macroscopique. Le contour de cette intersection correspond à l'enveloppe convexe de l'ensemble des hyperplans $\Sigma : \mathbf{D}^k = \Pi^{\text{maj}}(\mathbf{D}^k)$.

Contraintes À chaque itération i et en chaque voxel β , le multiplicateur de Lagrange $\lambda_\beta^i = \partial\pi_\beta(\mathbf{e}_\beta^i)/\partial\mathbf{e}$ appartient à la frontière du critère de résistance dont π_β est la fonction d'appui. Toutefois le champ de contrainte constant par voxel correspondant n'est a priori pas statiquement admissible : il ne peut donc pas être directement utilisé dans une approche statique du calcul à la rupture.

En revanche, le champ $\boldsymbol{\sigma}^* = \mathbb{C}_0 : \mathbf{d}(\mathbf{u}^i) + \boldsymbol{\tau}^{i-1}$ avec $\boldsymbol{\tau}^{i-1} = \boldsymbol{\lambda}^{i-1} - \mathbb{C}_0 : \mathbf{e}^{i-1}$ est statiquement admissible par construction de $\mathbf{d}(\mathbf{u}^i)$. Sa moyenne est connue exactement et vaut $\boldsymbol{\Sigma}^* = \mathbb{C}_0 : \mathbf{D} + \overline{\boldsymbol{\tau}^{i-1}}$. Ce champ n'a plus la garantie de vérifier le critère de résistance local en tout point. Pour palier ce problème, le champ $\boldsymbol{\sigma}^*$ peut être multiplié par une constante de sorte à être compatible avec le critère en tout point. Bien entendu, cette procédure ne peut se faire que de façon approchée car on ne peut accéder numériquement qu'à la moyenne par voxel des champs. À cette approximation près, la démarche permettrait de construire un minorant de la contrainte macroscopique supportable dans la direction donnée par $\boldsymbol{\Sigma}^*$. Malheureusement, la stratégie proposée n'est pas efficace en pratique. En effet, en tout point où \mathbf{d} est nul, la contrainte est indéterminée par la loi de comportement et $\boldsymbol{\lambda}$ est très perturbé.

Ainsi, la méthode proposée dans ce chapitre ne permet donc malheureusement pas de réaliser une approche par l'intérieur du domaine de résistance. Or un encadrement est toujours souhaitable pour quantifier les écarts au domaine exact induits par la discrétisation et la résolution itérative. Toutefois, si l'on souhaite réaliser un encadrement du domaine de résistance homogénéisé, on peut se tourner vers la méthode FFT proposée par Vincent *et al.* [103] qui correspond à une approche statique par l'intérieur. Cette méthode, complémentaire, n'a pas été implémentée car elle est plus lourde numériquement.

5.2.4 Résolution l'équation non-linéaire

À l'étape 2 de l'algorithme de Uzawa, l'équation tensorielle non linéaire (5.42) peut être résolue numériquement dans le cas général, ou analytiquement dans certains cas particuliers présentés ci-après.

Inclusions rigides et pores

La situation où un voxel Ω_β est constitué d'une phase infiniment rigide peut être traitée en imposant que \mathbf{e}_β^i solution de (5.42) est nul. Dans le cas où un voxel Ω_β correspond à un pore, \mathbf{e}_β^i solution de (5.42) est $\mathbf{e}_\beta^i = \mathbf{d}_\beta^i + \mathbb{C}_0^{-1} : \boldsymbol{\lambda}_\beta^{i-1}$.

Ces situations qui peuvent paraître triviales sont d'une grande importance : l'algorithme du Lagrangien augmenté proposé par Michel *et al.* [66] permet de gérer les deux types de contrastes infini (voir la démonstration en Annexe E).

Critère de résistance fonction des deux premiers invariants

L'équation (5.42) devient

$$(\mathbb{C}(e_v, e_d) + \mathbb{C}_0) : \mathbf{e} = \mathbf{s} \text{ avec } \mathbf{s} = \mathbb{C}_0 : \mathbf{d}(\mathbf{u}^i) + \boldsymbol{\lambda}^{i-1}. \quad (5.46)$$

Lorsque le milieu de référence est isotrope, l'équation tensorielle peut se projeter sur les composantes volumique et déviatorique

$$(k(e_v, e_d) + k_0)e_v = s_m \quad ; \quad (2\mu(e_v, e_d) + 2\mu_0)e_d = s_d^* \quad (5.47)$$

où s_d^* est le scalaire positif ou négatif tel que $\mathbf{e}_d = e_d \mathbf{s}_d / s_d^*$ et $s_d = |s_d^*|$. Examinons maintenant quelques cas particuliers d'intérêt pratique.

Critère de résistance elliptique

À titre d'exemple, prenons le cas d'un critère de résistance elliptique uniforme sur le voxel considéré

$$f(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\sigma_m^2}{a} + \frac{\sigma_d^2}{b} - 1. \quad (5.48)$$

Dans le plan (σ_m, σ_d) , la frontière du domaine G est une ellipse centrée en 0 et d'axes \sqrt{a} suivant σ_m , \sqrt{b} suivant σ_d . Sa fonction d'appui est

$$\pi(\mathbf{d}) = \sqrt{ad_v^2 + bd_d^2}. \quad (5.49)$$

Les modules sécants isotropes vérifient

$$\frac{k(d_v, d_d)}{a} = \frac{2\mu(d_v, d_d)}{b} = \frac{1}{\sqrt{ad_v^2 + bd_d^2}}. \quad (5.50)$$

Le système (5.47) conduit à une unique équation polynomiale d'ordre quatre en chaque point.

Le degré de cette équation polynomiale est réduit à deux à la condition de choisir le milieu de référence tel que $k_0/a = 2\mu_0/b$. Dans ce cas, la solution est

$$e_d = \frac{s_d}{2\mu_0} \left(1 - \sqrt{a^{-1}s_m^2 + b^{-1}s_d^2}^{-1} \right) \quad ; \quad e_v = e_d \frac{bs_m}{as_d} \quad \left(\text{si } \frac{k_0}{a} = \frac{2\mu_0}{b} \right) \quad (5.51)$$

Le signe de e_d est généralement bien positif car \mathbf{s} est la somme d'un terme $\boldsymbol{\lambda}$ qui est sur la frontière de G et d'un terme $\mathbb{C}_0 : \mathbf{d}$ qui doit pointer vers l'extérieur de G à convergence. L'étape 2 de l'algorithme de Uzawa (5.42) devient très simple numériquement puisqu'elle se réduit alors à calculer \mathbf{e}_i à partir de $\mathbf{s} = \mathbb{C}_0 : \mathbf{d}(\mathbf{u}^i) + \boldsymbol{\lambda}^{i-1}$ comme suit

$$\begin{aligned} e_i &= \frac{1}{2\mu_0} \left(1 - \sqrt{a^{-1}s_m^2 + b^{-1}s_d^2}^{-1} \right) \left(\frac{b}{3a} s_m \mathbf{1} + \mathbf{s}_d \right) \\ &= \frac{1}{2\mu_0} \left(1 - \sqrt{(1/a - 3/b)s_m^2 + b^{-1}s_d^2}^{-1} \right) \left(\left(\frac{b}{3a} - 1 \right) s_m \mathbf{1} + \mathbf{s} \right) \end{aligned} \quad (5.52)$$

Cette restriction sur le choix du milieu de référence présente un intérêt particulier si toutes les phases, hormis les éventuels pores ou inclusions rigides, ont des critères de résistance elliptiques homothétiques. Si le critère elliptique est décalé, de fonction d'appui $\pi(\mathbf{d}) = \sqrt{ad_v^2 + bd_d^2} - ce_v$, il suffit de remplacer s_m par $s_m + c$ dans (5.51).

Critère de résistance de Von Mises

Le critère de Von Mises peut être décrit asymptotiquement comme un critère elliptique dans la limite où $a/b \rightarrow \infty$ [5]. La résistance en traction simple est alors $\sigma_0 = \sqrt{3b/2}$. Le critère de Von Mises s'écrit

$$f(\boldsymbol{\sigma}) = \sigma_d - \sqrt{b}. \quad (5.53)$$

La fonction d'appui du critère de Von Mises est

$$\pi(\mathbf{d}) = \begin{cases} +\infty & \text{si } d_v \neq 0 \\ \sqrt{bd_d} & \text{si } d_v = 0. \end{cases} \quad (5.54)$$

La condition de pertinence implique $d_v = 0$. Sans restriction sur le milieu de référence, le système (5.42) admet pour solution

$$e_i(\mathbf{z}) = \begin{cases} \frac{1}{2\mu_0} \left(1 - \frac{\sqrt{b}}{s_d} \right) \mathbf{s}_d & \text{si } s_d \geq \sqrt{b} \\ \mathbf{0} & \text{si } s_d \leq \sqrt{b} \end{cases} \quad (5.55)$$

Régularisation du critère de résistance de Drucker-Prager

Le critère de Drucker-Prager est

$$f(\boldsymbol{\sigma}) = \sigma_d + \alpha(\sigma_m - h) \quad (5.56)$$

où α est l'angle de frottement et h la résistance en traction isotrope. La fonction d'appui du critère de Drucker-Prager est singulière :

$$\pi(\mathbf{d}) = \begin{cases} +\infty & \text{si } d_v < \alpha d_d \\ hd_v & \text{si } d_v \geq \alpha d_d. \end{cases} \quad (5.57)$$

La fonction d'appui est régularisée par une suite de potentiels

$$\psi_a(d_v, d_d) = f_a(X) + hd_v \text{ avec } X = d_v - \alpha d_d \quad (5.58)$$

avec a un scalaire positif et f_a une fonction convexe de classe C^2 définie sur $] -a; +\infty[$, strictement décroissante sur $] -a; 0[$, nulle sur $[0; +\infty[$, de limite $+\infty$ en $-a^+$. La loi de comportement fictive du potentiel régularisé est alors

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \psi_a(d_v, d_d)}{\partial \mathbf{d}} = f'_a(X) \left(\mathbf{1} - \alpha \frac{\mathbf{d}_d}{d_d} \right) + h\mathbf{1} \quad (5.59)$$

Après passage à la limite $a \rightarrow 0^+$ ([5] p. 133), $f'_a(X)$ tend vers une valeur indéterminée $\mathcal{F} \leq 0$. \mathcal{F} est le multiplicateur de Lagrange de la liaison $d_v - \alpha d_d \geq 0$. La loi de comportement est alors indéterminée :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathcal{F} \left(\mathbf{1} - \alpha \frac{\mathbf{d}_d}{d_d} \right) + h\mathbf{1} \quad (5.60)$$

Deux situations doivent être considérées :

- Si $\boldsymbol{\sigma}$ est sur le sommet du critère ($\boldsymbol{\sigma} = h\mathbf{1}$), alors \mathbf{d} appartient au cône $d_v > \alpha d_d$ et $\mathcal{F} = 0$.
- Si $\boldsymbol{\sigma}$ n'est pas sur le sommet du critère, alors \mathbf{d} vérifie la liaison $d_v = \alpha d_d$ et $\mathcal{F} < 0$.

Le système d'équation (5.42) se sépare donc en deux cas

$$\text{si } \mathcal{F} < 0 \quad \begin{cases} e_v = \alpha e_d \\ h + \mathcal{F} + k_0 e_v = s_m \\ -\alpha \mathcal{F} + 2\mu_0 e_d = s_d^* \end{cases} \quad ; \quad \text{si } e_v > \alpha e_d \quad \begin{cases} \mathcal{F} = 0 \\ h + \mathcal{F} + k_0 e_v = s_m \\ -\alpha \mathcal{F} + 2\mu_0 e_d = s_d^* \end{cases} \quad (5.61)$$

La solution est

$$\begin{cases} \text{si } 2\mu_0(s_m - h) \leq \alpha k_0 s_d^* : \\ \begin{cases} e_v = \alpha \frac{s_d^* + \alpha(s_m - h)}{\alpha^2 k_0 + 2\mu_0} \\ e_d = \frac{s_d^* + \alpha(s_m - h)}{\alpha^2 k_0 + 2\mu_0} \\ \mathcal{F} = \frac{2\mu_0(s_m - h) - \alpha k_0 s_d^*}{\alpha^2 k_0 + 2\mu_0} \end{cases} \quad ; \quad \begin{cases} \text{si } 2\mu_0(s_m - h) \geq \alpha k_0 s_d^* : \\ \begin{cases} e_v = \frac{s_m - h}{k_0} \\ e_d = \frac{s_d^*}{2\mu_0} \\ \mathcal{F} = 0 \end{cases} \end{cases} \end{cases} \quad (5.62)$$

Dans le premier cas, le signe de e_d est généralement bien positif car le numérateur fait apparaître le critère de Drucker Prager appliqué à \mathbf{s} . Or \mathbf{s} est la somme d'un terme $\boldsymbol{\lambda}$ qui est sur la frontière de G à chaque itération et d'un terme $\mathbb{C}_0 : \mathbf{d}$ qui doit pointer vers l'extérieur de G à convergence. Si, lors d'une itération avant convergence, la formule conduit à $e_d < 0$, on impose numériquement $e_d = e_v = 0$ pour l'itération.

Le problème de cette formulation est que la contrainte moyenne est de signe variable tandis que d_v est toujours positif d'après la règle de pertinence, ce qui revient à travailler avec un module de compression sécant parfois négatif. Alternativement, (5.60) peut être réécrit sous une forme précontrainte $\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}(\mathbf{d}) : \mathbf{d} + \sigma^p(\mathbf{d})\mathbf{1}$ suivant [5], où $\mathbb{C}(\mathbf{d})$ est un tenseur de raideur isotrope de modules strictement positifs et $\sigma^p(\mathbf{d})$ une précontrainte isotrope.

5.3 Résultats numériques

5.3.1 Critère de Von Mises

Bien que le critère de Von Mises soit généralement mieux adapté à la description des métaux que des géomatériaux, il fait l'objet d'une littérature plus abondante et sera donc utilisé pour valider la méthode.

Pore carré en déformations planes

Dans un premier temps, la résistance macroscopique d'un pore carré dans une matrice suivant un critère de Von Mises est étudiée en conditions aux limites périodiques et déformations planes.

Dans le cas où la porosité de ce matériau est supérieure à 25%, le critère de résistance macroscopique exact a été déterminé par Maghous [65]. Le mécanisme cinématique optimal fait intervenir une discontinuité du champ vitesse. Cet exemple est intéressant car il réunit trois difficultés numériques majeures qui peuvent limiter les performances de la méthode FFT proposée

1. localisation du taux de déformation,
2. raideur nulle pour rendre compte de la porosité (contraste infini),
3. module de compression infini pour vérifier l'incompressibilité (contraste infini).

Les directions de recherche explorées sont données par

$$\mathbf{D} = \frac{\cos(\theta)}{2} \mathbf{1} + \frac{\sin(\theta)}{2} (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2) \quad (5.63)$$

La frontière exacte du domaine de résistance macroscopique et son approche par l'extérieur par la méthode FFT sont présentées Fig. 5.1 pour une porosité de 25%. Deux grilles de discrétisation sont comparées, une grossière de 32^2 pixels et une fine de 512^2 pixels. La direction du taux de déformation macroscopique est incrémentée avec un pas angulaire de $\pi/64$ sur θ . Pour la discrétisation de 512^2 pixels, chaque direction requiert un calcul d'environ deux minutes sur un ordinateur de bureau basique, contre une seconde pour la discrétisation de 32^2 pixels. Pour les deux discrétisations, l'enveloppe numérique reproduit convenablement la forme anguleuse du critère. Pour la discrétisation de 32^2 (resp. 512^2) pixels, la surestimation de la résistance est inférieure à 11% (resp. 5%). La surestimation pour la grille de 512^2 pixels, bien que modérée, est un peu décevante au vu de la finesse de la discrétisation utilisée. Elle est attribuée à l'impossibilité de prendre en compte efficacement la discontinuité de vitesse du mécanisme de ruine. La localisation du taux de déformation est illustrée Fig. 5.2 pour un taux de déformation macroscopique $\mathbf{D} = 1/2(\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2)$ qui correspond à une traction dans le plan.

Pore sphérique

Dans un second temps, la méthode est testée en 3D pour la détermination de la résistance macroscopique d'un réseau cubique de pores sphériques dans une matrice suivant un critère de Von Mises.

Les directions explorées sont données par le taux de déformation macroscopique suivant :

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \frac{\cos(\theta_d)}{3} \mathbf{1} + \sqrt{\frac{2}{3}} \sin(\theta_d) \left(-\cos(\omega_d + \frac{\pi}{3}) \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 - \cos(\omega_d - \frac{\pi}{3}) \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \cos(\omega_d) \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 \right) \\ &= \frac{\cos(\theta_d)}{3} \mathbf{1} + \sin(\theta_d) (\cos(\omega_d) \mathbf{s}_1 + \sin(\omega_d) \mathbf{s}_2) \end{aligned} \quad (5.64)$$

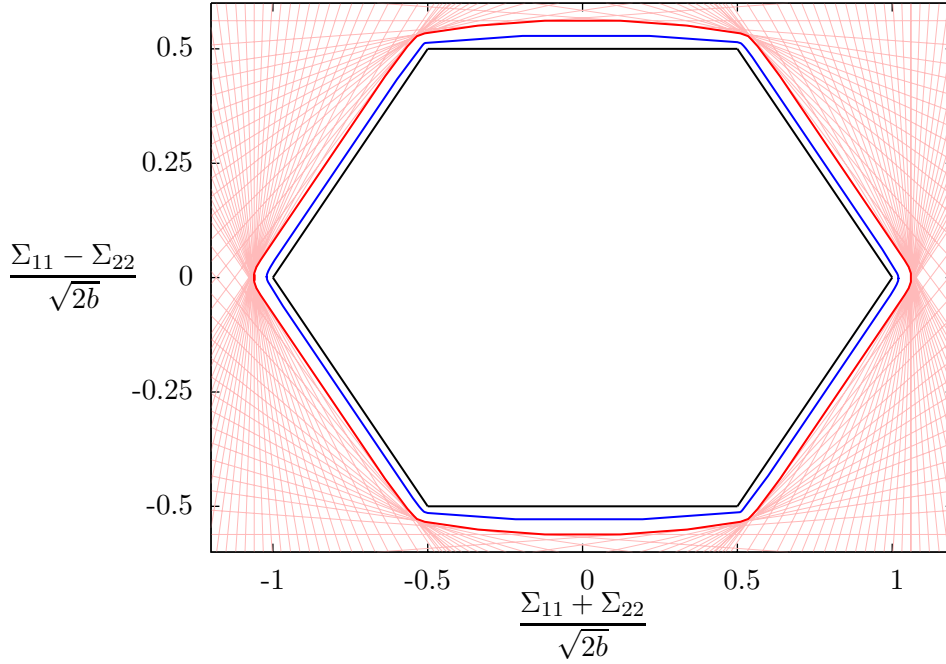


FIG. 5.1: Pore carré : Critère exact (noir) et enveloppes par FFT (32^2 : rouge, 512^2 : bleu).

avec la notation

$$\mathbf{s}_1 = \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 - \frac{\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2}{2} \right) \quad ; \quad \mathbf{s}_2 = \frac{\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2}{\sqrt{2}} \quad (5.65)$$

Les tenseurs $(\mathbf{1}/3, \mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$ forment une base de l'espace $(\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3)$, orthonormée pour le produit doublement contracté.

Cette forme de \mathbf{D} est choisie de sorte que $D_v = \cos(\theta_d)$ et $D_d = |\sin(\theta_d)|$. L'angle θ_d permet donc de contrôler le taux de triaxialité du taux de déformation macroscopique. L'angle ω_d est l'angle de Lode du taux de déformation¹, qui varie entre 0 et $\pi/3$. L'angle de Lode est ici relié au troisième invariant $J_3(\mathbf{D})$ du déviateur du taux de déformation par

$$J_3(\mathbf{D}) = I_3(\mathbf{D}_d) = \det(\mathbf{D}_d) = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{D_d^3}{9} \cos(3\omega_d) \quad (5.66)$$

Par symétrie du problème pour le chargement (5.64), le tenseur des contraintes macroscopique Σ sur le point de la frontière du domaine de résistance macroscopique dont la normale est \mathbf{D} est diagonal dans la même base que le taux de déformation. Le tenseur des contraintes macroscopique peut donc se mettre sous la forme

$$\Sigma = \Sigma_m \mathbf{1} + \Sigma_{d1} \mathbf{s}_1 + \Sigma_{d2} \mathbf{s}_2$$

avec $\Sigma_{d1} = \Sigma : \mathbf{s}_1 = \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\Sigma_{33} - \frac{\Sigma_{11} + \Sigma_{22}}{2} \right) \quad ; \quad \Sigma_{d2} = \Sigma : \mathbf{s}_2 = \frac{\Sigma_{11} - \Sigma_{22}}{\sqrt{2}} \quad (5.67)$

Le tenseur des contraintes peut aussi être exprimé à l'aide du paramétrage suivant :

$$\begin{aligned} \Sigma &= \Sigma_m \mathbf{1} + \sqrt{\frac{2}{3}} \Sigma_d \left(-\cos\left(\omega + \frac{\pi}{3}\right) \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 - \cos\left(\omega - \frac{\pi}{3}\right) \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \cos(\omega) \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 \right) \\ &= \Sigma_m \mathbf{1} + \Sigma_d (\cos(\omega) \mathbf{s}_1 + \sin(\omega) \mathbf{s}_2) \end{aligned} \quad (5.68)$$

¹L'angle de Lode est usuellement réservé à la description des contraintes dans l'espace des contraintes principales.

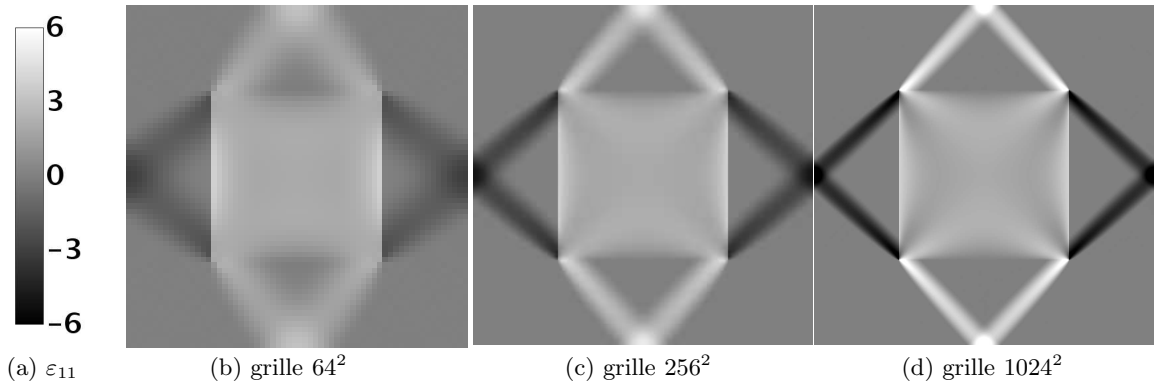


FIG. 5.2: Pore carré : localisation du mécanisme de ruine avec discontinuité de vitesse.

où ω est l'angle de Lode *des contraintes*. L'angle de Lode permet donc d'avoir une représentation polaire des contraintes dans un plan déviateur de normale $\mathbf{1}$. Pour les paramétrages (5.64) et (5.68) :

$$\boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{D} = \Sigma_m \cos(\theta_d) + \Sigma_d \sin(\theta_d) \cos(\omega - \omega_d) \quad (5.69)$$

Une grille de discrétisation de $64^3 \approx 2,6 \cdot 10^5$ voxels est utilisée. Dans un premier temps, pour $\omega_d = 0$ et $\omega_d = \pi/6$ seulement, la direction du taux de déformation macroscopique est incrémentée avec un pas angulaire de $\pi/128$ sur θ . Pour chaque direction \mathbf{D} , un calcul sur une grille 64^3 prend environ une minute.

Les résultats obtenus pour une porosité de 4% sont comparés Fig. 5.3 aux résultats numériques établis par Richelsen et Tvergaard [80] et Vincent *et al.* [103]. Pour mailler la cellule de périodicité, les simulations par éléments finis de [80] utilisent $\approx 3,3 \cdot 10^5$ éléments tétraédriques avec une interpolation linéaire. Les simulations par méthode FFT de [103] sont réalisées sur une grille de $128^3 \approx 2,1 \cdot 10^6$ voxels. La méthode FFT de [103] est complémentaire de la méthode proposée dans ce chapitre car elle est basée sur une approche statique par trajets de contraintes radiaux. Aux erreurs de discrétisation près, elle fournit un minorant de la résistance macroscopique. Cependant, elle est plus lourde à mettre en oeuvre et les calculs sont allongées par rapport à la méthode proposée ici car elle requiert des incréments de chargement.

Signalons que le paramétrage (5.64) ne permet qu'une détection indirecte de l'effet de l'angle de Lode des contraintes, puisque l'on impose en fait l'angle de Lode du taux de déformation. Toutefois, les résultats Fig. 5.3 attirent l'attention sur la dépendance du critère de résistance macroscopique au troisième invariant des contraintes, de même que les résultats de [80, 103]. Dans le cas $\omega_d = 0$, on montre par la suite que $\omega = 0$ donc une comparaison aux résultats de [80, 103] est possible. L'écart est modéré dans ce cas, et les résultats de la méthode cinématique contiennent bien ceux de la méthode statique. Pour $\omega_d = \pi/6$, la courbe est parfaitement symétrique en traction/compression, tandis qu'une légère asymétrie apparaît pour $\omega_d = 0$. Signalons qu'il a été remarqué dans Vincent *et al.* [103] que les mécanismes de ruine sont plus localisés pour $\omega = \pi/6$ (donc $J_3 = 0$) que dans le cas axisymétrique ($\omega = 0$). Comme remarqué par Richelsen et Tvergaard [80], le modèle de sphère creuse proposé par Gurson [46] surestime le domaine de résistance du milieu périodique avec pores sphériques. Notamment, la résistance en traction/compression isotrope est surestimée par le modèle de Gurson d'environ 20% pour une porosité de 4%. Par ailleurs, le modèle de Gurson ne fait pas intervenir de dépendance au troisième invariant des contraintes.

Pour étudier de façon plus systématique l'effet de l'angle de Lode, une série de calculs est réalisée pour balayer toutes les directions dans l'espace (D_{11}, D_{22}, D_{33}) avec un pas angulaire de $\pi/60$ sur θ_d et ω_d . Le système d'inégalités résultant permet de définir un polyèdre convexe qui approche le critère de résistance macroscopique par l'extérieur. Ce polyèdre possède une

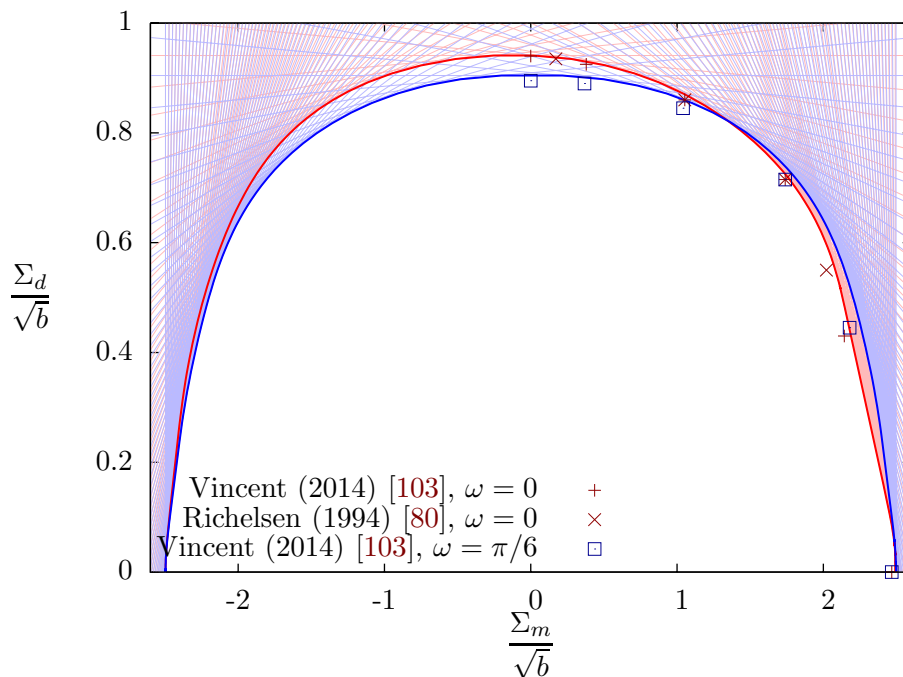


FIG. 5.3: Pore sphérique, coupes dans le plan contrainte/moyenne déviateur pour les angles Lode $\omega_d = 0$ (bleu) ou $\pi/6$ (rouge).

symétrie centrale par rapport à l'état de contrainte nul et une symétrie ternaire (période $2\pi/3$ sur ω_d) car les directions e_1 , e_2 et e_3 jouent le même rôle. Les coupes de ce polyèdre par des plans Σ_m constant Fig. 5.4 montrent que la résistance déviatorique dépend de J_3 . Il est intéressant de remarquer la transition d'un critère sur Σ_d avec une symétrie hexagonale pour $\Sigma_m = 0$ à un critère avec symétrie ternaire pour $|\Sigma_m|$ élevé. Il serait intéressant de réaliser la même étude pour une porosité plus faible (1 ou 2 %) pour déterminer si l'effet du troisième invariant des contraintes n'est pas induit par les conditions aux limites périodiques. Cependant, l'effet du troisième invariant a aussi été observé sur le modèle de sphère creuse, notamment par Revil-Baudard et Cazacu [79], ce qui laisse à penser qu'il est inhérent aux matériaux poreux avec une matrice de Von Mises et non la seule conséquence des conditions aux limites périodiques.

5.3.2 Critère elliptique

Le critère elliptique (5.48) est d'un intérêt particulier car il sera adopté au chapitre 6 pour décrire la résistance de la matrice argileuse (à un décalage près suivant σ_m). Dans cette partie, on s'intéresse à un matériau constitué d'une matrice argileuse caractérisé par un domaine de résistance elliptique, renforcé par des inclusions de silts (silice, carbonates, pyrite) supposés infiniment plus résistants. Dans un premier temps, les inclusions et la matrice sont supposés en adhérence parfaite. Le chapitre 6 sera dédié à la prise en compte d'interfaces imparfaites.

En vertu de cette adhérence parfaite et du caractère infiniment résistant des inclusions, si le domaine de résistance elliptique de la matrice est décentré d'une valeur c le long de l'axe σ_m , alors il en est de même pour G^{hom} . Autrement dit, il suffit de considérer le cas où le domaine de résistance elliptique de la matrice est centré à l'origine (comme dans (5.48)), de réaliser l'homogénéisation, puis de décaler G^{hom} de c le long de l'axe Σ_m .

Pour simplifier, les inclusions sont supposées sphériques et disjointes. Afin de balayer une grande gamme de fraction volumique d'inclusions ρ , les sphères sont disposées suivant un réseau cubique faces centrées (CFC). Sauf mention, les calculs sont réalisés sur une grille de discrétisation de 64^3 voxels. Le chargement est effectué suivant le paramétrage défini par (5.64)

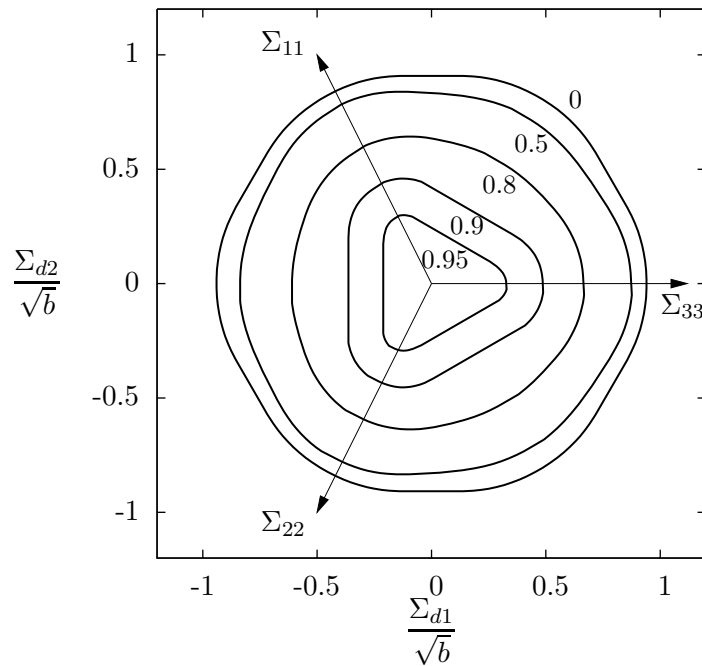


FIG. 5.4: Pore sphérique dans matrice de Von Mises (porosité 4%), coupes dans des plans Σ_m constant (en compression) : effet de l'angle de Lode des contraintes ω pour différentes valeurs de $-\Sigma_m/\Sigma_m^{\max}$.

avec un pas angulaire de $\pi/60$ sur θ et ω .

Dans un premier temps, un calcul préliminaire a été conduit pour une densité élevée d'inclusions de 51,2% et les valeurs $a=53,4$; $b=33,4$ (MPa) pour le domaine de résistance de la matrice argileuse. Ces valeurs sont supposées représentatives pour une argilite d'après les comparaisons avec des données expérimentales (voir Chapitre 8). L'enveloppe obtenue par l'approche cinématique est représentée Fig. 5.5 dans l'espace $(\Sigma_{11}, \Sigma_{22}, \Sigma_{33})$. Elle présente une allure ellipsoïdale mais tronquée aux extrémités pour $|\Sigma_m|$ élevé. Des coupes de cette enveloppe par des plans $\Sigma_m=\text{constante}$ ont été réalisées pour étudier l'effet de l'angle de Lode, pour des valeurs de Σ_m/Σ_m^{\max} comprises entre 0 et 0,95.

Dans un second temps, une étude paramétrique plus détaillée est réalisée. Les mêmes types de calculs sont menés pour des rapports d'aspect du domaine de résistance de la matrice argileuse $a/b = 1, 10$ et 100. Deux fractions volumiques d'inclusions sont étudiées : 10% et 40% de renforcement. Par souci de lisibilité, seules des coupes par des plans $\Sigma_m=\text{constante}$ sont présentées Fig. 5.6. Cette étude indique que le domaine de résistance macroscopique présente une dépendance accrue vis à vis de l'angle de Lode lorsque le rapport d'aspect a/b du domaine de résistance de la matrice argileuse est faible, ainsi qu'aux fortes fractions volumiques ρ d'inclusions. En revanche, lorsque le critère de la matrice se rapproche du critère de Von Mises (a/b élevé), l'angle de Lode ne joue pas un rôle significatif. Si l'on en juge d'après la fraction volumique, on peut noter que les inclusions rigides induisent un effet du troisième invariant nettement moins marqué que les pores.

Par ailleurs, une étude de l'évolution des contraintes moyenne et déviatorique maximales en fonction de ρ et de a/b est présentée Fig. 6.8 au chapitre 6, en comparaison avec les résultats analytiques établis au chapitre 6.

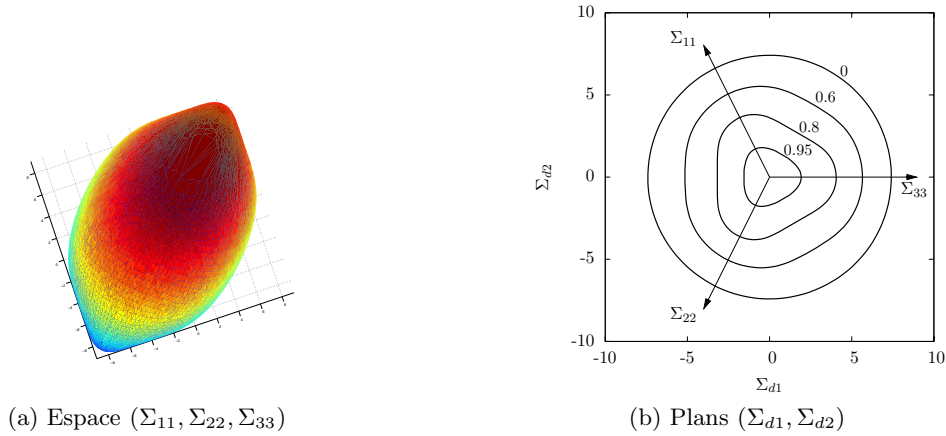


FIG. 5.5: G^{hom} pour un réseau CFC d'inclusions rigides sphériques dans matrice elliptique ($a=53,4$; $b=33,4$; $\rho=0,512$). (a) Approche par l'extérieur dans l'espace $(\Sigma_{11}, \Sigma_{22}, \Sigma_{33})$. (b) Coupes de G^{hom} par des plans Σ_m constant (en traction) : effet de l'angle de Lode pour différentes valeurs de $\Sigma_m/\Sigma_m^{\text{max}}$.

5.3.3 Critère de Drucker Prager

La méthode proposée rencontre des difficultés lors de son application au critère de Drucker-Prager. L'algorithme de Uzawa ne converge pas toujours ou converge très lentement, en particulier lorsque l'angle de frottement est élevé. Des résultats cohérents avec les calculs de [76] en présence d'un pore sphérique n'ont été obtenus que dans le cas d'un angle de frottement faible.

Ce constat d'échec numérique s'explique par les résultats établis en annexe E sur les valeurs propres de l'opérateur de récurrence associé au solveur itératif utilisé. Pour le solveur itératif de Uzawa appliqué au schéma basé sur le lagrangien augmenté, la convergence n'est assurée que si les modules sécants sont du même signe que ceux du milieu de référence. Cependant, le module de compression associé au critère de Drucker-Prager est de signe variable. En effet, la règle de normalité impose que d_v soit positif, tandis que la contrainte moyenne peut être positive ou négative suivant la valeur de \mathcal{F} dans (5.60). Au contraire, pour le critère elliptique, les modules sécants sont toujours positifs. Il serait intéressant d'étudier un schéma de résolution alternatif basé sur la formulation précontrainte de (5.60) avec une raideur non linéaire définie positive.

Ce chapitre a permis de rappeler les principes de l'homogénéisation des propriétés de résistance et une stratégie de caractérisation de la frontière du domaine de résistance macroscopique via la résolution d'un problème visqueux non linéaire fictif. Cette stratégie a été mise à profit pour proposer une méthode numérique originale pour l'homogénéisation des propriétés de résistance en conditions aux limites périodiques. La méthode, basée sur les schémas de type FFT en élasticité non linéaire, présente l'avantage d'être très efficace en comparaison avec des calculs élasto-plastiques et surtout adaptée aux géométries complexes puisqu'elle ne nécessite pas de maillage. L'efficacité de la méthode a rapidement permis de déterminer les frontières de domaines de résistances macroscopiques pour des sollicitations triaxiales vraies sur des cellules périodiques composées de pores ou d'inclusions infiniment résistantes plongées dans une matrice avec un critère de Von Mises ou elliptique. Cette étude a permis d'exhiber un net effet du troisième invariant du tenseur des contraintes macroscopique dans certaines situations.

Pour continuer cette étude, nous envisageons d'effectuer des calculs par FFT directement sur la microstructure de l'argilite obtenue au microtomographe par Robinet *et al.* [81]. L'absence de maillage sera alors particulièrement utile. La seule limitation est la taille de la grille de discrétisation, qui est conditionnée par la mémoire vive disponible. À titre indicatif, seuls

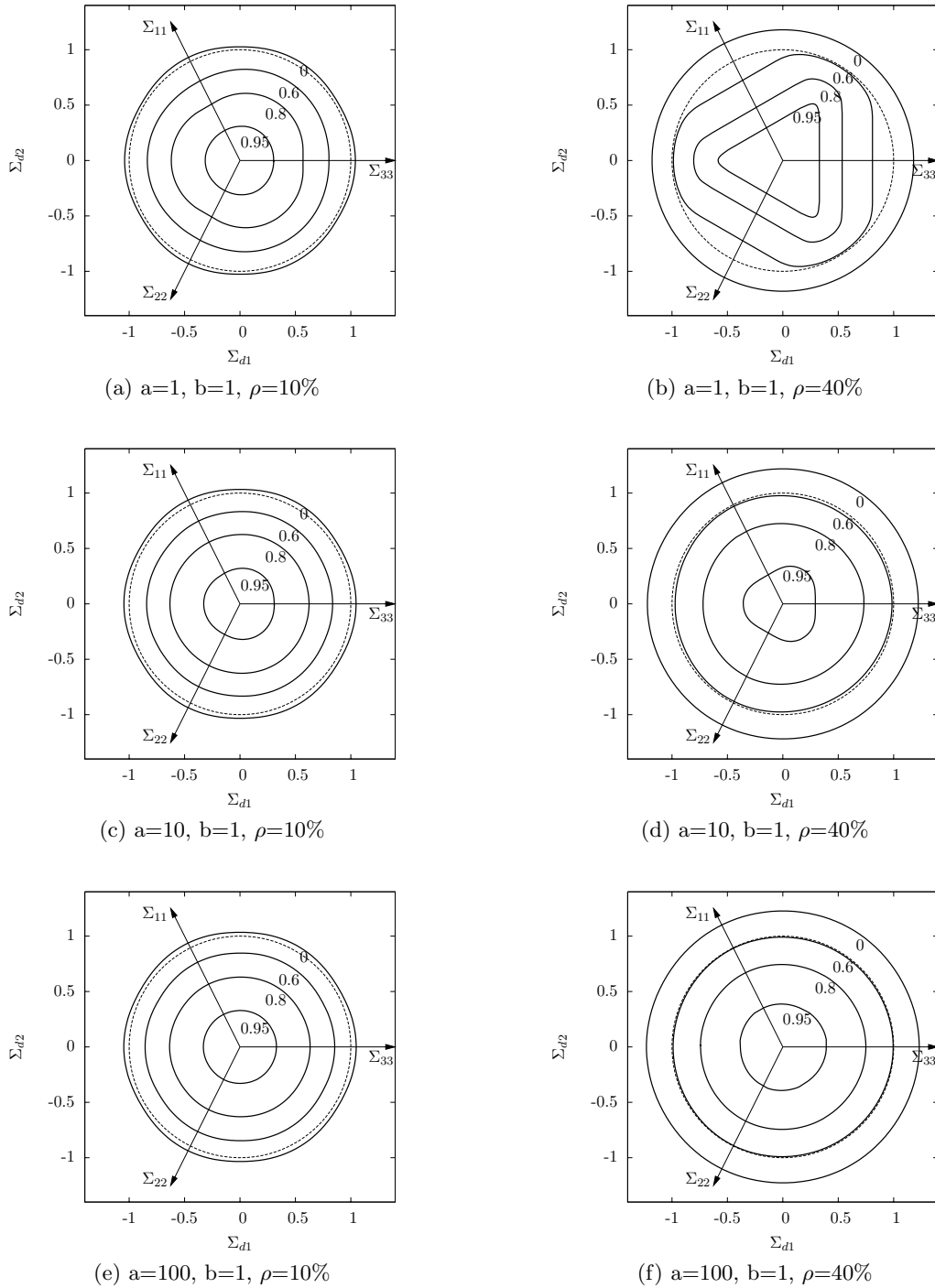


FIG. 5.6: Coupes de ∂G^{hom} par des plans Σ_m constant (traction) : effet de l'angle de Lode pour différentes valeurs de $\Sigma_m/\Sigma_m^{\text{max}}$. Pointillés : cercle unité

3 Go de mémoire vive sont nécessaires pour un calcul sur une grille 256^3 voxels. Pour une telle discrétisation les calculs sont bien entendu aussi plus longs, de l'ordre de quelques heures pour une direction de chargement sur un ordinateur basique actuel, ce qui limite le nombre de directions de chargement que l'on peut explorer.

Citons quelques limitations majeures de la méthode et pistes de recherche à explorer. Comme toute méthode numérique type FFT en mécanique, l'utilisation d'une grille régulière ne permet pas de raffiner localement la discrétisation ni d'explorer efficacement des mécanismes cinématiques avec discontinuités, qui sont pourtant essentiels. En outre, elle n'a été appliquée qu'à des critères suffisamment réguliers. Il serait intéressant de voir si la méthode permet aussi de traiter des domaines de résistance micro dont la frontière présente des points anguleux (Tresca, Mohr-Coulomb). Enfin, les critères de type frottant soulèvent des difficultés numériques liées au signe du module de compression sécant fictif.

* *

*

Chapitre 6

Critère de résistance avec effets d'interfaces

Résumé : *L'objet de ce chapitre est de proposer une modélisation micromécanique du critère de résistance (ductile) d'une roche argileuse. Le modèle retenu pour l'argile (transition micro→méso) est un polycristal de pores et de grains rigides dont l'interface grain-grain est régie par un critère de résistance de Mohr-Coulomb. À l'échelle supérieure, le renforcement de la matrice argileuse par des inclusions (transition méso→macro) est étudié dans le cas où les inclusions sont considérées rigides. Afin de déterminer l'impact sur le critère de résistance macroscopique de propriétés d'interfaces dégradées entre inclusion et matrice, trois cas sont considérés : les interfaces matrice-inclusion sont considérées soit parfaites, soit régies par un critère de résistance de Tresca ou de Mohr-Coulomb.*

Sommaire

6.1	Modèle micromécanique de la résistance d'une roche argileuse	138
6.1.1	Morphologie retenue	138
6.1.2	Propriétés des constituants	138
6.2	Équations d'état limite	142
6.2.1	Méthodologie	142
6.2.2	Lois de comportement visqueux non linéaire fictives	143
6.3	Homogénéisation linéaire et non linéaire	145
6.3.1	Homogénéisation linéaire	146
6.3.2	Homogénéisation non linéaire	150
6.4	Critères de résistance macroscopiques	151
6.4.1	Interfaces parfaites	151
6.4.2	Interfaces de Tresca	152
6.4.3	Interfaces de Mohr-Coulomb	154
6.5	Effet d'une pression de fluide dans les pores de la matrice	163
6.5.1	Existence d'une contrainte effective pour la résistance de la matrice	163
6.5.2	Résistance du matériau argileux renforcé en présence d'un fluide	165

6.1 Modèle micromécanique de la résistance d'une roche argileuse

6.1.1 Morphologie retenue

Le modèle morphologique retenu pour décrire la résistance de certaines roches argileuses est le modèle à trois échelles (micro, méso, macro) présenté Fig. 6.1. Ce chapitre se concentre sur la détermination du critère de résistance macroscopique par transition méso→macro (voir Fig. 6.1), mettant à profit pour la matrice argileuse les résultats de la transition micro→méso établis par He *et al.* [51].

Dans les travaux précédents de He *et al.* [51], la matrice argileuse est décrite à l'échelle micro comme un assemblage poly-cristallin de grains - qui représentent les paquets de feuillets d'argile - et de pores. La particularité de ce modèle est de proposer que la résistance de la matrice argileuse est contrôlée par la résistance des interfaces entre grains, tandis que les grains sont supposés infiniment plus résistants.

L'effet de renforcement du critère de résistance d'un matériau argileux occasionné par la présence d'inclusions (carbonates, quartz, pyrite) fortement plus rigides est maintenant étudié. Une attention particulière est portée sur l'effet d'une imperfection des interfaces entre les inclusions et la matrice.

À l'échelle micro, un volume élémentaire représentatif (VER) Ω_m de la matrice est introduit (voir Fig. 6.1). Il comporte des pores occupant l'espace Ω_p et des grains rigides occupant l'espace Ω_g . La porosité de la matrice argileuse est $\phi = |\Omega_p|/|\Omega_m|$. Les grains sont jointifs et on note Γ_g l'union de toutes les interfaces entre grains. La surface spécifique des interfaces entre grains, homogène à l'inverse d'une longueur, est $\gamma_g = |\Gamma_g|/|\Omega_m|$.

À l'échelle méso, un VER Ω de matériau argileux renforcé est considéré. Le matériau renforcé est constitué de la matrice argileuse qui occupe le domaine Ω_m et d'inclusions. Les inclusions occupent le domaine Ω_i , de fraction volumique $\rho = |\Omega_i|/|\Omega|$. L'union de toutes les interfaces entre inclusions et matrice est notée Γ_i . La surface spécifique des interfaces entre inclusions et matrice est $\gamma_i = |\Gamma_i|/|\Omega|$. La porosité du matériau argileux renforcé est $\Phi = (1 - \rho)\phi$.

6.1.2 Propriétés des constituants

Matrice argileuse

Le critère de résistance déterminé par He *et al.* [51] est adopté pour la matrice argileuse à l'échelle méso. Il repose sur le choix d'un critère de résistance d'interface f_{Γ_g} frottant de Mohr-Coulomb avec cohésion portant sur le vecteur contrainte appliqué à l'interface entre les grains à l'échelle micro :

$$f_{\Gamma_g}(\mathbf{T}) = T_t + \alpha_g(T_n - h_g) \leq 0, \quad (6.1)$$

où h_g est la résistance en traction isotrope des interfaces entre grains et α_g l'angle de frottement.

Le caractère granulaire de la matrice est rendu compte par un assemblage auto-cohérent de grains sphériques rigides de rayon r_0 et de pores sphériques.

La surface spécifique des interfaces entre grains, tous identiques, est caractérisée par

$$\gamma_g = \frac{3\lambda}{2r_0}, \quad (6.2)$$

où λ est la fraction de contact grain à grain. Dans la suite, suivant [62] sous certaines hypothèses de répartition spatiale des grains, la fraction de contact grain à grain est supposée caractérisée par :

$$\lambda = (1 - \phi)^2(1 - 2\phi). \quad (6.3)$$

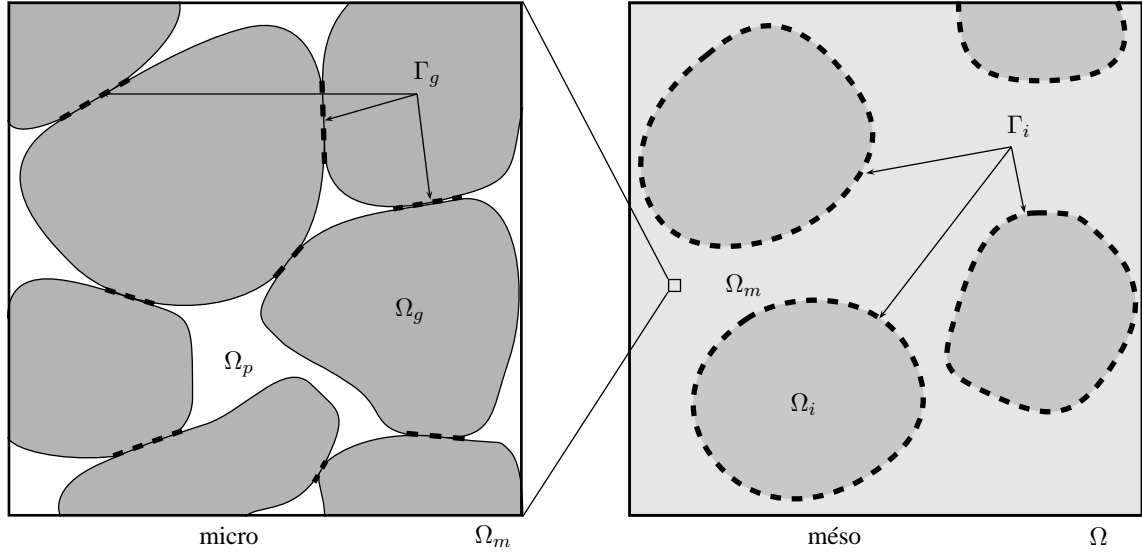


FIG. 6.1: Représentation aux échelles micro et méso du modèle micromécanique retenu d'une roche argileuse. Du point de vue de la résistance, à l'échelle micro, les grains (Ω_g) sont supposés rigides et les interfaces grain-grain (Γ_g) régies par un critère de résistance de Mohr-Coulomb. Le matériau granulaire résultant forme la matrice argileuse (Ω_m) à l'échelle méso. À l'échelle méso, la matrice argileuse est renforcée par des inclusions (Ω_i) supposées rigides. Trois types de critères de résistance aux interfaces matrice-inclusion (Γ_i) sont étudiés : parfait, Tresca ou Mohr-Coulomb.

La forme du critère de résistance homogénéisé de la matrice argileuse dépend de la porosité. Les résultats font appel aux modules normalisés :

$$\mathcal{M} = \frac{1-2\phi}{3\phi-1} \quad ; \quad \mathcal{K} = 4\mathcal{M} \frac{1-\phi}{3\phi}. \quad (6.4)$$

Régime de porosité $1/3 < \phi < 1/2$:

La forme du critère de résistance homogénéisé de la matrice argileuse dépend du paramètre adimensionnel

$$\delta = \frac{3\alpha_g^2 \mathcal{K}}{2\lambda}. \quad (6.5)$$

– cas $\delta < 1$:

Le domaine de résistance de la matrice argileuse est compris dans une ellipse dans le plan (σ_m, σ_d) décrite par le critère de résistance f_m

$$f_m(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{(\sigma_m + c)^2}{a} + \frac{\sigma_d^2}{b} - 1 \leq 0 \quad (6.6)$$

avec

$$a = \left(\frac{h_g \lambda}{1-\delta} \right)^2 \delta \quad ; \quad b = (h_g \lambda)^2 \frac{2\delta \mathcal{M}}{(1-\delta)\mathcal{K}} \quad ; \quad c = h_g \lambda \frac{\delta}{1-\delta} \quad (6.7)$$

– cas $\delta > 1$:

La frontière du domaine de résistance est définie dans le plan (σ_m, σ_d) par l'hyperbole

$$f_m(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{(\sigma_m + c)^2}{a} - \frac{\sigma_d^2}{b} - 1 \leq 0 \quad (6.8)$$

Dans ce cas, $-c$ représente la résistance en traction isotrope. Asymptotiquement, ce critère tend vers un critère de Drucker-Prager

$$f_m(\boldsymbol{\sigma}) = \sigma_d + \sqrt{\frac{b}{a}}(\sigma_m + c) \leq 0 \quad (6.9)$$

– cas $\delta = 1$:

Pour une valeur d'angle de frottement α_g donnée, la transition d'un critère de résistance elliptique à hyperbolique se fait pour une valeur de porosité critique ϕ^{crit} telle que $\delta = 1$. Si $\phi > \phi^{\text{crit}}$, le critère est elliptique ; si $\phi < \phi^{\text{crit}}$, le critère est hyperbolique. Lorsque la relation (6.3) est utilisée, la porosité critique vérifie

$$\phi^{\text{crit}}(1 - \phi^{\text{crit}})(3\phi^{\text{crit}} - 1) = 2\alpha_g^2. \quad (6.10)$$

Dans le cas $\delta = 1$, le critère est parabolique :

$$f_m(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\sigma_m}{a^*} + \frac{\sigma_d^2}{b^*} - 1 \leq 0 \text{ avec } a^* = \frac{h\lambda}{2} \quad ; \quad b^* = \frac{(h\lambda)^2 2\delta\mathcal{M}}{\mathcal{K}} \quad (6.11)$$

Régime de porosité $0 < \phi < 1/3$:

Le critère de résistance est toujours

$$f_m(\boldsymbol{\sigma}) = \sigma_m - \lambda h \leq 0 \quad (6.12)$$

Notons qu'il est remarquable que ce critère adopté pour la matrice argileuse présente une telle diversité de formes (voir Fig. 6.2) pour un nombre extrêmement restreint de paramètres physiques :

- la porosité ϕ ,
- la résistance en traction h_g des interfaces,
- l'angle de frottement α_g des interfaces.

L'existence d'une porosité critique ϕ^{crit} définie par (6.10) entraîne une grande sensibilité du critère elliptique (6.6) aux valeurs de porosité très légèrement supérieures à ϕ^{crit} (voir Fig. 6.3). Le rapport d'aspect de l'ellipse diverge à l'infini lorsque la porosité tend vers ϕ^{crit} par valeurs positives, tandis qu'il est de l'ordre de 0,5 à 2 pour une porosité de seulement 1 à 2 % au dessus de ϕ^{crit} .

Dans la suite, les propriétés de la matrice argileuse seront toujours supposées telles que le critère de résistance f_m soit elliptique, décrit par (6.6). Ce choix permet d'une part de rendre compte d'une résistance en compression isotrope. D'autre part, en anticipant la relecture plastique du critère au chapitre 7, seul ce cas elliptique permettra de rendre compte de taux de déformation dilatants et contractants.

Inclusions

Dans cette étude, les inclusions sont supposées infiniment rigides, ce qui revient à dire qu'elles peuvent supporter un état de contrainte arbitrairement élevé en comparaison avec la matrice argileuse. Le critère de résistance des inclusions peut être vu comme la limite

$$f_i(\boldsymbol{\sigma}) = \lim_{R \rightarrow \infty} (\sigma_m^2 + \sigma_d^2 - R^2) \leq 0. \quad (6.13)$$

Interfaces entre matrice et inclusions

Les interfaces entre matrice et inclusions jouent un rôle critique sur le critère de résistance macroscopique, en modulant l'effet de renfort apporté par les inclusions rigides. Les interfaces

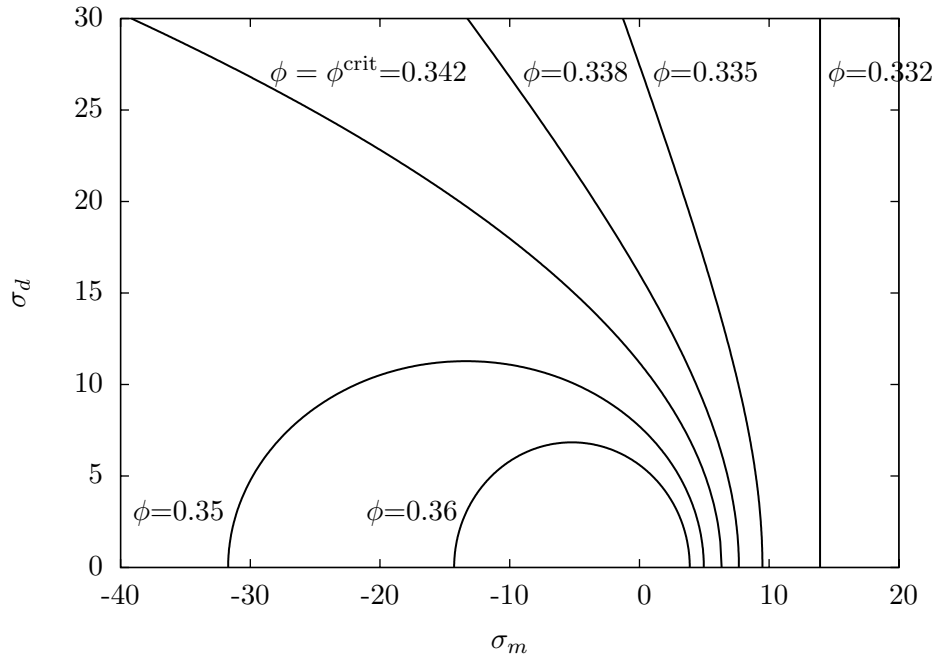


FIG. 6.2: Évolution du critère de résistance de la matrice argileuse en fonction de la porosité ϕ pour $h_g = 92,86$ et $\alpha_g = 0,055$ (soit $\phi^{\text{crit}} \approx 0,342$ d'après (6.10)). Le critère est : elliptique (6.6) pour $\phi^{\text{crit}} < \phi < 1/2$, parabolique (6.11) pour $\phi = \phi^{\text{crit}}$, hyperbolique (6.8) pour $1/3 < \phi < \phi^{\text{crit}}$ et une limite uniforme sur la traction isotrope (6.12) pour $0 < \phi < 1/3$.

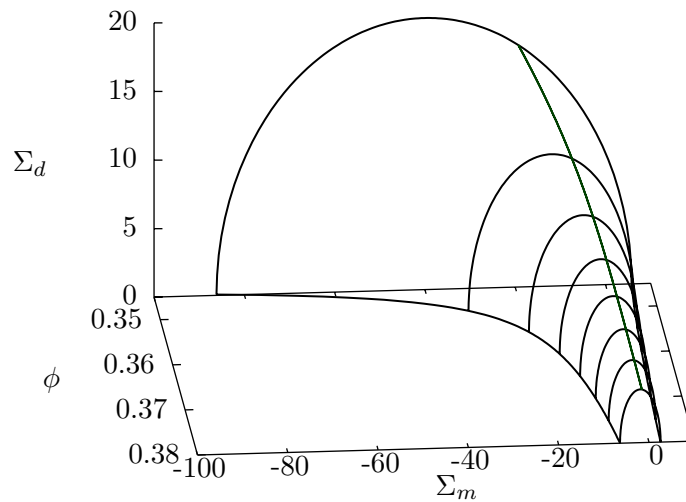


FIG. 6.3: Évolution du critère de résistance de la matrice argileuse dans le régime elliptique (6.7) en fonction de la porosité ϕ pour $h_g = 92,86$ et $\alpha_g = 0,055$ (soit $\phi^{\text{crit}} = 0,342$ d'après (6.10)). À l'approche de la porosité critique, le critère de résistance devient extrêmement sensible à la porosité.

imparfaites peuvent être caractérisées par un critère de résistance d'interface portant sur le vecteur contrainte appliqué sur l'interface. Trois types de critères de résistance d'interface f_{Γ_i} sont ici considérés : interfaces parfaites (f_{pa}), critère de Tresca (f_{tr}) ou critère de Mohr-Coulomb (f_{mc}).

Interfaces parfaites Dans le cas où les interfaces entre matrice et inclusions sont supposées parfaites, le vecteur contrainte appliqué à l'interface n'est soumis à aucune restriction :

$$f_{\text{pa}}(\mathbf{T}) = \lim_{R \rightarrow \infty} (T_n^2 + T_t^2 - R^2) \leq 0. \quad (6.14)$$

Cette situation idéale correspond à une adhérence parfaite entre la matrice et les inclusions.

Interfaces Tresca Le critère d'interface de Tresca suppose que la composante tangentielle du vecteur contrainte \mathbf{T} appliqué à l'interface est bornée par une résistance tangentielle k :

$$f_{\text{tr}}(\mathbf{T}) = T_t - k \leq 0. \quad (6.15)$$

Le critère d'interface de Tresca n'introduit pas de différence entre les états de compression et les états de traction.

Interfaces Mohr-Coulomb Le critère d'interface de Mohr-Coulomb introduit une sensibilité en la composante normale du vecteur contrainte. Il permet de rendre compte d'un contact frottant avec cohésion. De même que pour les interfaces entre grains à l'échelle micro, le critère de Mohr-Coulomb des interfaces entre matrice et inclusions est caractérisé par un angle de frottement α_i et une résistance en traction h_i :

$$f_{\text{mc}}(\mathbf{T}) = T_t + \alpha_i(T_n - h_i) \leq 0, \quad (6.16)$$

6.2 Équations d'état limite

6.2.1 Méthodologie

L'objectif est de déterminer le critère de résistance macroscopique de la roche argileuse renforcée. La méthodologie présentée au chapitre 5 est brièvement résumée afin d'inclure le cas d'une imperfection des interfaces entre les constituants.

Définition statique Un état de contrainte macroscopique Σ appliqué au VER Ω est dit admissible pourvu qu'il existe un champ de contrainte microscopique $\sigma(\mathbf{z})$ (à l'échelle méso) défini sur le VER Ω remplissant les conditions suivantes [28, 93] :

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \sigma &= 0 & (\forall \mathbf{z} \in \Omega) \\ \sigma(\mathbf{z}) &\in G(\mathbf{z}) & (\forall \mathbf{z} \in \Omega) \\ \bar{\sigma} &= \Sigma \end{aligned} \quad (6.17)$$

où $G(\mathbf{z})$ est le domaine des états de contrainte microscopiques admissibles en un point \mathbf{z} du VER Ω . L'ensemble des états de contrainte macroscopiques admissibles est noté G^{hom} .

Le domaine G_m des états de contrainte admissibles de la matrice argileuse est défini par le critère de résistance $f_m(\sigma)$ (6.6) tel que :

$$\sigma \in G_m \Leftrightarrow f_m(\sigma) \leq 0.$$

Rappelons que les inclusions sont supposées infiniment résistantes. Suivant le passage à la limite proposé dans (6.13), le domaine G_i des états de contraintes admissibles des inclusions peut être

vu dans l'espace des contraintes principales comme la limite d'une sphère de rayon $R \rightarrow \infty$ centrée à l'origine. Le domaine G_{Γ_i} des vecteurs contraintes appliqués à l'interface matrice-inclusion admissibles est défini par

$$\mathbf{T} \in G_{\Gamma_i} \Leftrightarrow f_{\Gamma_i}(\mathbf{T}) \leq 0.$$

Définition duale De façon équivalente, les domaines G_m , G_i et G_{Γ_i} peuvent être caractérisés par leur fonctions d'appui [34, 83]. Cette représentation est appelée formulation duale.

La fonction d'appui $\pi_m(\mathbf{d})$ du critère de résistance de la matrice est définie par

$$\pi_m(\mathbf{d}) = \sup\{\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}, f_m(\boldsymbol{\sigma}) \leq 0\},$$

où l'interprétation physique de \mathbf{d} et $\pi_m(\mathbf{d})$ est un taux de déformation virtuel et la dissipation associée.

De façon similaire, la fonction d'appui $\pi_{\Gamma_i}(\llbracket \mathbf{v} \rrbracket)$ du critère de résistance d'interface est définie par

$$\pi_{\Gamma_i}(\llbracket \mathbf{v} \rrbracket) = \sup\{\mathbf{T} : \llbracket \mathbf{v} \rrbracket, f_{\Gamma_i}(\mathbf{T}) \leq 0\},$$

où l'interprétation physique de $\llbracket \mathbf{v} \rrbracket$ et $\pi_{\Gamma_i}(\llbracket \mathbf{v} \rrbracket)$ est un saut de vitesse à travers l'interface et la dissipation associée.

Du point de vue pratique, l'utilisation directe de la définition (6.17) pour la détermination de G^{hom} est délicate. Alternativement, la frontière ∂G^{hom} du domaine des états de contrainte macroscopiques admissibles peut être obtenue en résolvant le problème suivant défini sur le VER Ω [6, 60] :

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} &= 0 & (\Omega) \\ \boldsymbol{\sigma} &= \frac{\partial \pi_m}{\partial \mathbf{d}} & (\Omega_m) \\ \mathbf{T} &= \frac{\partial \pi_{\Gamma_i}}{\partial \llbracket \mathbf{v} \rrbracket} & (\Gamma_i) \\ \boldsymbol{\sigma} &= \mathbb{C}_i : \mathbf{d} & (\Omega_i) \text{ with } \mathbb{C}_i \rightarrow \infty \\ \mathbf{v}(\mathbf{z}) &= \mathbf{D} \cdot \mathbf{z} & (\partial\Omega) \\ \mathbf{d} &= \operatorname{grad}^s \mathbf{v} & (\Omega) \end{aligned} \tag{6.18}$$

Ce problème peut être interprété comme un problème visqueux non linéaire fictif où $\boldsymbol{\sigma}$ est le champ de contrainte local et \mathbf{v} le champ de vitesse local. Le résultat théorique important est que l'état de contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma}$, relié à $\boldsymbol{\sigma}$ par la règle de moyenne des contraintes $\boldsymbol{\Sigma} = \overline{\boldsymbol{\sigma}}$, appartient à la frontière ∂G^{hom} du domaine des états de contrainte macroscopiques admissibles. Plus précisément, il est situé au point de ∂G^{hom} dont la normale extérieure est colinéaire au taux de déformation macroscopique \mathbf{D} .

Ainsi, la détermination de la frontière ∂G^{hom} du domaine des états de contrainte macroscopiques admissibles revient à la résolution du problème visqueux non linéaire fictif (6.18). Les lois de comportement visqueux non linéaire fictives de chaque phase sont définies à partir des dérivées de leur fonction d'appui.

6.2.2 Lois de comportement visqueux non linéaire fictives

Cette section est dédiée à l'établissement des lois de comportement visqueux non linéaire fictives de la matrice argileuse et des interfaces.

Matrice argileuse

Dans le plan (σ_m, σ_d) , la frontière de G_m est une ellipse de demi-axes \sqrt{a} suivant σ_m et \sqrt{b} suivant σ_d centrée en $(-c, 0)$, où a et b sont définis par (6.7). La fonction d'appui du critère de résistance f_m (6.6) de la matrice argileuse est la fonction de la variable tensorielle \mathbf{d}

$$\pi_m(\mathbf{d}) = \sqrt{ad_v^2 + bd_d^2} - cd_v \quad (6.19)$$

où seuls interviennent les deux premiers invariants du taux de déformation : les taux de déformation volumique d_v et déviatorique d_d .

Par dérivation de la fonction d'appui π_m (6.19), la loi de comportement fictive de la matrice argileuse est écrite suivant une formulation sécante avec précontrainte

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \pi_m}{\partial \mathbf{d}} = \mathbb{C}_m : \mathbf{d} + \boldsymbol{\sigma}^p, \quad (6.20)$$

avec

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_m &= 3k_m \mathbb{J} + 2\mu_m \mathbb{K} \quad ; \quad \boldsymbol{\sigma}^p = -c\mathbf{1}, \\ k_m &= \frac{a}{\sqrt{ad_v^2 + bd_d^2}} \quad ; \quad 2\mu_m = \frac{b}{\sqrt{ad_v^2 + bd_d^2}}. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Interfaces de Tresca

La fonction d'appui du critère de Tresca (6.15) est [83]

$$\pi_{\text{tr}}(\llbracket \mathbf{v} \rrbracket) = \begin{cases} +\infty & \text{si } \llbracket v_n \rrbracket \neq 0, \\ k \llbracket v_t \rrbracket & \text{si } \llbracket v_n \rrbracket = 0. \end{cases} \quad (6.22)$$

Cette fonction d'appui est fortement singulière et non dérivable. Elle n'est donc pas adaptée pour une implémentation directe de la définition de la loi de comportement fictive par dérivation. En suivant [5, 86], la frontière du domaine des vecteurs contraintes admissibles pour le critère de Tresca peut être vue comme la limite d'une suite d'ellipses dans le plan (T_n, T_t) qui correspondent aux critères de résistance d'interface

$$f_{\text{tr}}(\mathbf{T}, L) = \left(\frac{T_n}{L}\right)^2 + \left(\frac{T_t}{k}\right)^2 - 1 \leq 0, \quad (6.23)$$

dans la limite où L/k tend vers l'infini. La fonction d'appui du critère régularisé $f_{\text{tr}}(\mathbf{T}, L)$ (6.23) est

$$\pi_{\text{tr}}(\llbracket \mathbf{v} \rrbracket, L) = \sqrt{(L \llbracket v_n \rrbracket)^2 + (k \llbracket v_t \rrbracket)^2}. \quad (6.24)$$

Les fonctions d'appui de cette suite sont dérivables en tout point. La loi de comportement fictive associée s'écrit sous la forme sécante

$$\mathbf{T} = \frac{\partial \pi_{\text{tr}}(\llbracket \mathbf{v} \rrbracket, L)}{\partial \llbracket \mathbf{v} \rrbracket} = \mathbf{K}(\llbracket \mathbf{v} \rrbracket, L) \cdot \llbracket \mathbf{v} \rrbracket = K_n(\llbracket \mathbf{v} \rrbracket, L) \llbracket v_n \rrbracket \mathbf{n} + K_t(\llbracket \mathbf{v} \rrbracket, L) \llbracket v_t \rrbracket, \quad (6.25)$$

où $\llbracket v_n \rrbracket$ et $\llbracket v_t \rrbracket$ sont les composantes normales et tangentielles du saut de vitesse virtuel à travers l'interface. Les modules sécants normal K_n et tangentiel K_t qui apparaissent dans (6.25) sont :

$$K_n(\llbracket \mathbf{v} \rrbracket, L) = \frac{L^2}{\sqrt{(L \llbracket v_n \rrbracket)^2 + (k \llbracket v_t \rrbracket)^2}} \quad ; \quad K_t(\llbracket \mathbf{v} \rrbracket, L) = \frac{k^2}{\sqrt{(L \llbracket v_n \rrbracket)^2 + (k \llbracket v_t \rrbracket)^2}}. \quad (6.26)$$

Dans la limite $L/k \rightarrow \infty$:

- les composantes de la raideur d'interface vérifient $K_n/K_t \rightarrow \infty$,
- le saut de vitesse normal $\llbracket v_n \rrbracket \rightarrow 0$,
- un saut de vitesse tangentiel $\llbracket v_t \rrbracket$ est autorisé,
- la raideur d'interface tangentielle $K_t \rightarrow k/\llbracket v_t \rrbracket$.

Ainsi, la règle de normalité $\llbracket v_n \rrbracket = 0$ est vérifiée asymptotiquement.

Interfaces de Mohr-Coulomb

La fonction d'appui du critère de Mohr-Coulomb (6.16) est [83]

$$\pi_{\text{mc}}(\llbracket \mathbf{v} \rrbracket) = \begin{cases} +\infty & \text{si } \llbracket v_n \rrbracket < \alpha \llbracket v_t \rrbracket \\ h \llbracket v_n \rrbracket & \text{si } \llbracket v_n \rrbracket \geq \alpha \llbracket v_t \rrbracket. \end{cases} \quad (6.27)$$

Cette fonction d'appui est fortement singulière. De nouveau, l'application de la définition de la loi de comportement fictive par une dérivation directe n'est pas possible. À cet effet, suivant [51, 64], la fonction d'appui (6.27) peut être régularisée par une suite de potentiels

$$\psi_j(\llbracket \mathbf{v} \rrbracket) = f_j(Y) + h \llbracket v_n \rrbracket \text{ avec } Y = \llbracket v_n \rrbracket - \alpha \llbracket v_t \rrbracket. \quad (6.28)$$

Le scalaire positif j va être amené à tendre vers 0. f_j est une suite de fonctions convexes de classe C^2 définies sur $] -j, +\infty[$ telles que

- $f_j(Y) = 0$ si $Y \geq 0$,
- f_j décroissante sur $] -j, 0]$,
- $\lim_{Y \rightarrow -j^+} f_j(Y) = +\infty$.

Ainsi, lorsque j tend vers 0, la suite de potentiels ψ_j tend vers la fonction d'appui π_{mc} du critère d'interface de Mohr-Coulomb. La loi de comportement fictive associée au potentiel régularisé est

$$\mathbf{T} = \frac{\partial \psi_j}{\partial \llbracket \mathbf{v} \rrbracket} = \frac{\partial \psi_j}{\partial \llbracket v_n \rrbracket} \mathbf{n} + \frac{\partial \psi_j}{\partial \llbracket v_t \rrbracket} \mathbf{t}. \quad (6.29)$$

En introduisant la fonction $\mathcal{F}(Y) = \frac{\partial \psi_j}{\partial Y}$, qui est négative ou nulle, la loi de comportement se réécrit

$$\mathbf{T} = \mathcal{F}(Y)(\mathbf{n} - \alpha \mathbf{t}) + h \mathbf{n}. \quad (6.30)$$

Par conséquent, pour $\mathbf{T} \neq h \mathbf{n}$, l'inégalité stricte $\mathcal{F}(Y) < 0$ est nécessairement vérifiée et donc $Y \in] -j; 0[$. Asymptotiquement, la règle de normalité $\llbracket v_n \rrbracket = \alpha \llbracket v_t \rrbracket$ est vérifiée lorsque j tend vers 0. Ce résultat est un point important de la technique de régularisation décrite car il indique que la règle de normalité dans les interfaces est correctement prise en compte.

Afin d'utiliser des raideurs d'interfaces tangentielle et normale positive, la loi de comportement est écrite sous une forme affine :

$$\mathbf{T} = \mathbf{K}(\llbracket v_n \rrbracket, \llbracket v_t \rrbracket) \cdot \llbracket \mathbf{v} \rrbracket + \mathbf{T}^p(\llbracket v_n \rrbracket, \llbracket v_t \rrbracket). \quad (6.31)$$

où

$$K_n = \frac{\mathcal{F}}{Y} \quad ; \quad K_t = -\frac{\alpha \mathcal{F}}{\llbracket v_t \rrbracket} \quad ; \quad \mathbf{T}^p = \left(h - \frac{\alpha \mathcal{F}}{Y} \llbracket v_t \rrbracket \right) \mathbf{n}. \quad (6.32)$$

Asymptotiquement, les raideurs d'interfaces vérifient

$$\lim_{j \rightarrow 0} \frac{K_t}{K_n} = \lim_{j \rightarrow 0} -\frac{\alpha Y}{v_t} = 0 \text{ et } \lim_{j \rightarrow 0} \frac{T^p}{K_n} = -\alpha v_t. \quad (6.33)$$

6.3 Homogénéisation linéaire et non linéaire

Comme rappelé dans la section 6.2.1, l'approche duale pour l'analyse limite amène à la définition d'un problème fictif visqueux non linéaire (6.18). Une estimation de la solution de ce problème est maintenant recherchée par le biais des méthodes d'homogénéisation basées sur la solution de problèmes d'Eshelby. Dans ce cadre, la méthode sécante modifiée (voir par ex. [94]) fournit une technique efficace pour gérer la non linéarité. La méthode repose sur la solution d'un problème d'homogénéisation linéaire ainsi que sur le calcul d'estimateurs moyens par phase appropriés.

6.3.1 Homogénéisation linéaire

Cette section est dédiée à la résolution du problème d'homogénéisation linéaire requis pour la méthode sécante modifiée. De plus, des estimateurs moyens par phase du taux de déformation dans la matrice et du saut de vitesse à travers les interfaces matrice-inclusions sont établis. Il convient de noter que, bien qu'il y ressemble formellement, le problème linéaire défini ci-après ne représente pas un modèle pour l'homogénéisation des propriétés élastiques ou visqueuses linéaires réelles d'un matériau argileux renforcé par inclusions.

Définition du problème linéaire

Afin de prendre en compte la formulation précontrainte des lois de comportements fictives de la matrice et des interfaces, le problème linéaire doit inclure trois paramètres de chargement :

- le taux de déformation macroscopique \mathbf{D} ,
- la précontrainte isotrope uniforme de la matrice p ,
- la précontrainte normale uniforme des interfaces ϖ .

Le problème linéaire est donc défini comme

$$\begin{aligned}
 \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} &= \mathbf{0} & (\Omega) \\
 \boldsymbol{\sigma} &= \mathbb{C}_m : \mathbf{d} - p \mathbf{1} & (\Omega_m) \\
 \mathbf{T} &= \mathbf{K} \cdot \llbracket \mathbf{v} \rrbracket + \varpi \mathbf{n} & (\Gamma_i) \\
 \boldsymbol{\sigma} &= \mathbb{C}_i : \mathbf{d} & (\Omega_i) \text{ avec } \mathbb{C}_i \rightarrow \infty \\
 \mathbf{v}(\mathbf{z}) &= \mathbf{D} \cdot \mathbf{z} & (\partial\Omega) \\
 \mathbf{d} &= \operatorname{grad}^s \mathbf{v} & (\Omega)
 \end{aligned} \tag{6.34}$$

Le problème linéaire (6.34) est résolu par superposition des modes de chargement suivant

- (P1) : aucune précontrainte, taux de déformation macroscopique \mathbf{D} à la frontière $\partial\Omega$.
- (P2) : précontrainte $-(p+\varpi)\mathbf{1}$ dans la matrice Ω_m , pas de précontrainte dans les interfaces Γ_i , taux de déformation macroscopique $\mathbf{0}$ à la frontière $\partial\Omega$.
- (P3) : précontrainte $\varpi\mathbf{1}$ dans la matrice Ω_m , précontrainte $\varpi\mathbf{n}$ dans les interfaces Γ_i , taux de déformation macroscopique $\mathbf{0}$ à la frontière $\partial\Omega$.

Pour $i = 1, 2, 3$, la solution locale du problème (Pi) est notée $(\mathbf{v}_i, \boldsymbol{\sigma}_i)$. Le taux de déformation associé est \mathbf{d}_i et la contrainte macroscopique est $\boldsymbol{\Sigma}_i$. La solution de (P3) est le couple uniforme $\boldsymbol{\sigma}_3 = \varpi\mathbf{1}$ et $\mathbf{v}_3 = \mathbf{0}$. La résolution de (P1) permettra de déterminer la raideur homogénéisée \mathbb{C}^{hom} telle que $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \mathbb{C}^{\text{hom}} : \mathbf{D}$.

La densité macroscopique d'énergie potentielle Ψ du problème linéaire (6.34) comporte les termes d'énergie élastique et le travail des précontraintes

$$\begin{aligned}
 |\Omega| \Psi(\mathbf{D}, p, \varpi) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega_m} \mathbf{d} : \mathbb{C} : \mathbf{d} \, dV + \frac{1}{2} \int_{\Gamma} \llbracket \mathbf{v} \rrbracket : \mathbf{K} : \llbracket \mathbf{v} \rrbracket \, dS \\
 &\quad - (p + \varpi) \int_{\Omega_m} \operatorname{tr}(\mathbf{d}) \, dV + \varpi \int_{\Omega} \operatorname{tr}(\mathbf{d}) \, dV.
 \end{aligned} \tag{6.35}$$

En procédant comme en poroélasticité où le changement de fraction volumique de pore est la variable d'état macroscopique duale de la pression de fluide dans les pores, introduisons ici une variable d'état macroscopique additionnelle, définie comme la quantité duale de la précontrainte dans la matrice. Cette quantité duale est le changement de volume de la matrice normalisé par le volume initial du VER. Pour chaque problème (Pi), elle est définie par :

$$v_{i_m} = (1 - \rho) \operatorname{tr}(\bar{\mathbf{d}}_i^m) \quad (i = 1, 2) \tag{6.36}$$

et par superposition, pour le problème (6.34) :

$$v_m = (1 - \rho) \operatorname{tr}(\bar{\mathbf{d}}^m) \tag{6.37}$$

En utilisant les règles de superposition $\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2$ et $\mathbf{d} = \mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_2$, la densité macroscopique d'énergie potentielle $\Psi(\mathbf{D}, p, \varpi)$ s'écrit

$$\begin{aligned} |\Omega| \Psi(\mathbf{D}, p, \varpi) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega_m} \mathbf{d}_1 : \mathbb{C} : \mathbf{d}_1 \, dV + \frac{1}{2} \int_{\Gamma} \llbracket \mathbf{v}_1 \rrbracket \cdot \mathbf{K} \cdot \llbracket \mathbf{v}_1 \rrbracket \, dS \\ &+ \frac{1}{2} \int_{\Omega_m} \mathbf{d}_2 : (\boldsymbol{\sigma}_2 + (p + \varpi) \mathbf{1}) \, dV + \frac{1}{2} \int_{\Gamma} \llbracket \mathbf{v}_2 \rrbracket \cdot (\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{n}) \, dS \\ &+ \int_{\Omega_m} \mathbf{d}_2 : \boldsymbol{\sigma}_1 \, dV + \int_{\Gamma} \llbracket \mathbf{v}_2 \rrbracket \cdot (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{n}) \, dS \\ &+ |\Omega| (-(p + \varpi)v_m + \varpi \operatorname{tr} \mathbf{D}). \end{aligned}$$

D'après la définition énergétique de \mathbb{C}^{hom} , la somme des deux premières intégrales du membre de droite est égale à

$$\frac{|\Omega|}{2} \mathbf{D} : \mathbb{C}^{\text{hom}} : \mathbf{D}.$$

La deuxième et la troisième ligne peuvent être simplifiées par application du lemme de Hill étendu à la présence d'interfaces [63] aux couples de champs de vitesse cinématiquement (resp. contrainte statiquement) admissibles $(\mathbf{v}_2, \boldsymbol{\sigma}_2)$ et $(\mathbf{v}_2, \boldsymbol{\sigma}_1)$. Finalement, la densité macroscopique d'énergie potentielle est

$$\Psi(\mathbf{D}, p, \varpi) = \frac{1}{2} \mathbf{D} : \mathbb{C}^{\text{hom}} : \mathbf{D} - (p + \varpi) \left(v_{1_m} + \frac{1}{2} v_{2_m} \right) + \varpi \operatorname{tr} \mathbf{D}. \quad (6.38)$$

Estimateurs quadratiques effectifs

En vue de l'application de la méthode sécante modifiée à la résolution du problème non linéaire (6.18), des estimateurs des taux de déformation volumique et déviatorique sont requis. Dans la méthode sécante modifiée, ces grandeurs effectives sont définies comme les moyennes quadratiques sur la phase matricielle

$$d_v^{\text{eff}} = \sqrt{d_v^{2m}} \quad ; \quad d_d^{\text{eff}} = \sqrt{d_d^{2m}}. \quad (6.39)$$

D'après [35, 51], adapté de [58] pour la poroélasticité, ces estimations sont obtenues par dérivation de la densité macroscopique d'énergie potentielle par rapport aux modules adéquats :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} (1 - \rho) \left(d_v^{\text{eff}} \right)^2 &= \frac{\partial \Psi(\mathbf{D}, p, \varpi)}{\partial k_m}, \\ \frac{1}{2} (1 - \rho) \left(d_d^{\text{eff}} \right)^2 &= \frac{\partial \Psi(\mathbf{D}, p, \varpi)}{\partial 2\mu_m}. \end{aligned} \quad (6.40)$$

De même, les sauts de vitesse effectifs à l'interface sont définis par

$$\llbracket v_n \rrbracket^{\text{eff}} = \sqrt{\llbracket v_n \rrbracket^{2\Gamma}} \quad ; \quad \llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}} = \sqrt{\llbracket v_t \rrbracket^{2\Gamma}}. \quad (6.41)$$

Les résultats de Kreher [58] ont été étendus à la présence d'interfaces dans Maalej *et al.* [63], ce qui donne

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{|\Gamma|}{|\Omega|} \left(\llbracket v_n \rrbracket^{\text{eff}} \right)^2 &= \frac{\partial \Psi(\mathbf{D}, p, \varpi)}{\partial K_n}, \\ \frac{1}{2} \frac{|\Gamma|}{|\Omega|} \left(\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}} \right)^2 &= \frac{\partial \Psi(\mathbf{D}, p, \varpi)}{\partial K_t}. \end{aligned} \quad (6.42)$$

Estimation de Mori-Tanaka

Le problème linéaire (6.34) va être résolu par recours à un schéma de Mori-Tanaka, généralisé à la présence d'interfaces, pour prendre en compte la morphologie matrice-inclusion. Lorsque les inclusions sont sphériques et mono-disperses, l'utilisation de ce schéma d'homogénéisation est justifiée si la distribution spatiale des inclusions est isotrope. Cette hypothèse est adoptée par la suite. Le rayon des inclusions sphériques est noté R_0 et la fraction volumique d'inclusions ρ . Les inclusions ne se recouvrant pas, la surface spécifique des interfaces est alors

$$\gamma_i = \frac{|\Gamma_i|}{|\Omega|} = \frac{3\rho}{R_0}. \quad (6.43)$$

Solution du problème (P1) Comme discuté ci-dessus, la morphologie matrice-inclusion suggère le recours à un schéma d'homogénéisation de Mori-Tanaka pour établir une estimation de la raideur homogénéisée \mathbb{C}^{hom} . Cependant, pour capturer les effets d'interfaces imparfaites, le motif morphologique représentatif n'est pas une inclusion homogène mais une inclusion composite constituée d'une sphère rigide entourée d'une interface élastique. Le problème d'Eshelby modifié d'une sphère entourée d'une interface faible, comme présenté dans Hashin [48], doit donc être utilisé. En transposant les résultats de Dormieux *et al.* [32], établis pour le schéma auto-cohérent, l'estimation de Mori-Tanaka de la raideur homogénéisée est isotrope, de la forme $\mathbb{C}^{\text{hom}} = 3k^{\text{hom}}\mathbb{J} + 2\mu^{\text{hom}}\mathbb{K}$, où les modules homogénéisés de compression k^{hom} et μ^{hom} sont

$$\begin{aligned} k^{\text{hom}} &= \frac{1}{3} \frac{(3k_m + 4\rho\mu_m)R_0K_n + (1 - \rho)12k_m\mu_m}{(1 - \rho)R_0K_n + 4\mu_m + 3\rho k_m}, \\ 2\mu^{\text{hom}} &= \mu_m \frac{(((3 + 2\rho)4\mu_m + (2 + 3\rho)3k_m)R_0K_n + 4\mu_m((2 + \rho)8\mu_m + (1 + \rho)9k_m))R_0K_t + \dots}{(3(1 - \rho)(k_m + 2\mu_m)R_0K_n + ((4 - 3\rho)4\mu_m + (3 - 2\rho)3k_m)2\mu_m)R_0K_t + \dots} \\ &\quad \frac{\dots(((3 + \rho)8\mu_m + (5 + 3\rho)3k_m)R_0K_n + (1 - \rho)(8\mu_m + 9k_m)8\mu_m)2\mu_m}{\dots(3((5 - 2\rho)k_m + (2 - \rho)4\mu_m)R_0K_n + ((2 + 3\rho)4\mu_m + (3 + 2\rho)3k_m)8\mu_m)\mu_m}. \end{aligned} \quad (6.44)$$

Dans la suite, le cas limite $K_n/K_t \rightarrow \infty$ s'avèrera particulièrement utile comme le suggèrent (6.26) et (6.33). Asymptotiquement, les modules homogénéisés se réduisent à

$$\begin{aligned} k^{\text{hom},l} &= \frac{3k_m + 4\rho\mu_m}{3(1 - \rho)}, \\ 2\mu^{\text{hom},l} &= \mu_m \frac{(3k_m(2 + 3\rho) + 4\mu_m(2\rho + 3))R_0K_t + 2\mu_m(8(\rho + 3)\mu_m + 3(3\rho + 5)k_m)}{3((1 - \rho)(k_m + 2\mu_m)R_0K_t + \mu_m((5 - 2\rho)k_m + 4(2 - \rho)\mu_m))}. \end{aligned} \quad (6.45)$$

Afin de calculer l'énergie potentielle (voir (6.38)), il est utile de déterminer le changement de volume normalisé de la matrice v_{1_m} en fonction du taux de déformation macroscopique \mathbf{D} . La résolution de (P1) par l'intermédiaire d'un schéma de Mori-Tanaka conduit à

$$v_{1_m} = b_m \mathbf{1} : \mathbf{D} \quad (6.46)$$

où le coefficient b_m , analogue d'un coefficient de Biot en poroélasticité, vaut

$$b_m = (1 - \rho) \frac{R_0K_n + 4\mu_m}{(1 - \rho)R_0K_n + 4\mu_m + 3\rho k_m}. \quad (6.47)$$

Solution du problème (P2) Le champ de contrainte local solution du problème (P2) dépend linéairement de $p + \varpi$. Ainsi, il existe un tenseur du second ordre \mathbf{B}_2 tel que $\boldsymbol{\sigma}_2 = -\mathbf{B}_2(p + \varpi)$. La contrainte macroscopique est alors $\boldsymbol{\Sigma}_2 = -\overline{\mathbf{B}_2}^\Omega(p + \varpi)$.

Dans l'idée du raisonnement du théorème de Maxwell-Betti et de son application à la poroélasticité [35], remarquons tout d'abord que

$$|\Omega| \overline{\mathbf{d}_1 : \mathbb{C} : \mathbf{d}_2}^\Omega + |\Gamma_i| \overline{\llbracket \mathbf{v}_1 \rrbracket \cdot \mathbf{K} \cdot \llbracket \mathbf{v}_2 \rrbracket}^{\Gamma_i} = |\Omega| \overline{\mathbf{d}_2 : \mathbb{C} : \mathbf{d}_1}^\Omega + |\Gamma_i| \overline{\llbracket \mathbf{v}_2 \rrbracket \cdot \mathbf{K} \cdot \llbracket \mathbf{v}_1 \rrbracket}^{\Gamma_i}.$$

où la symétrie de \mathbb{C} et \mathbf{K} a été utilisée. Une application soigneuse du lemme de Hill (dans sa forme étendue aux interfaces [63]) au couples croisés $(\mathbf{d}_1, \boldsymbol{\sigma}_2)$ et $(\mathbf{d}_2, \boldsymbol{\sigma}_1)$, en présence de la précontrainte $p + \varpi$, donne :

$$\overline{\mathbf{d}_1}^\Omega : \overline{\boldsymbol{\sigma}_2}^\Omega + (p + \varpi) \mathbf{1} : (1 - \rho) \overline{\mathbf{d}_1}^m = \overline{\mathbf{d}_2}^\Omega : \overline{\boldsymbol{\sigma}_1}^\Omega.$$

Ensuite, cette identité se simplifie au vu des conditions aux limites dans (P1) et (P2) ainsi que de (6.46) :

$$-(p + \varpi) \overline{\mathbf{B}_2}^\Omega : \mathbf{D} + (p + \varpi) b_m \mathbf{1} : \mathbf{D} = 0.$$

La contrainte macroscopique dans (P2) finalement établie est

$$\boldsymbol{\Sigma}_2 = -(p + \varpi) b_m \mathbf{1}.$$

Le changement de volume normalisé de la matrice v_{2_m} , impliqué dans (6.38), doit maintenant être déterminé. Pour cela, l'expression (6.3.1) de la contrainte macroscopique dans (P2) est confrontée à la règle de moyenne des contraintes (voir Eqs. (6.51) à (6.54) pour plus de détails)

$$\boldsymbol{\Sigma}_2 = -(p + \varpi) b_m \mathbf{1} = (1 - \rho) (\mathbb{C}^m : \overline{\mathbf{d}_2}^{\Omega_m} - (p + \varpi) \mathbf{1}) + \gamma_i R_0 \overline{\mathbf{n} \otimes \mathbf{K} \cdot \llbracket \mathbf{v}_2 \rrbracket}^{\Gamma_i}.$$

En prenant la trace, cette équation se simplifie en

$$-3(p + \varpi) b_m = 3k_m v_{2_m} - (1 - \rho) 3(p + \varpi) + \gamma_i R_0 K_n \overline{\llbracket v_{2_n} \rrbracket}^{\Gamma_i}.$$

Par ailleurs, étant donné que le taux de déformation macroscopique est nul dans (P2) et que les inclusions sont rigides (pas de déformation), la règle de moyenne des taux de déformation se réduit à :

$$0 = v_{2_m} + \gamma_i \overline{\llbracket v_{2_n} \rrbracket}^{\Gamma_i}.$$

Finalement, le changement de volume de la matrice dépend de la précontrainte $-(p + \varpi)$ suivant

$$v_{2_m} = -\frac{3(b_m - 1 + \rho)}{3k_m - R_0 K_n} (p + \varpi) = \frac{1}{N_m} (p + \varpi),$$

où le module N_m , analogue du module de Biot en poroélasticité, vaut

$$N_m = \frac{(1 - \rho) R_0 K_n + 4\mu_m + 3\rho k_m}{3\rho(1 - \rho)}. \quad (6.48)$$

Problème linéaire complet En adaptant les travaux de Dormieux *et al.* [34], les deux équations d'état macroscopiques du problème linéaire complet sont obtenues par superposition des solutions aux trois modes de chargement :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma} &= \mathbb{C}^{\text{hom}} : \mathbf{D} - (p + \varpi) b_m \mathbf{1} + \varpi \mathbf{1}, \\ v_m &= b_m \mathbf{1} : \mathbf{D} + \frac{p + \varpi}{N_m}, \end{aligned} \quad (6.49)$$

où \mathbb{C}^{hom} est défini par (6.44), b_m par (6.47) et N_m par (6.48).

L'énergie potentielle du problème linéaire (6.34) est finalement obtenue par injection de (6.49) dans (6.38) :

$$\Psi(\mathbf{D}, p, \varpi) = \frac{1}{2} \mathbf{D} : \mathbb{C}^{\text{hom}} : \mathbf{D} - (p + \varpi) b_m \text{tr} \mathbf{D} - \frac{(p + \varpi)^2}{2N_m} + \varpi \text{tr} \mathbf{D}. \quad (6.50)$$

Pour une utilisation ultérieure, une méthode micro-macro alternative pour l'expression de la contrainte moyenne macroscopique Σ_m est proposée. Le point de départ est la règle de moyenne des contraintes $\Sigma_m = \overline{\sigma}_m$ qui peut se scinder sur les différentes phases en :

$$\Sigma_m = (1 - \rho) \overline{\sigma}_m^m + \rho \overline{\sigma}_m^i \quad (6.51)$$

La moyenne $\overline{\sigma}_m^i$ est évaluée à partir de la moyenne $\overline{T}_n^{\Gamma_i}$ de la composante normale du tenseur des contraintes appliqué aux interfaces. En effet, pour une inclusion $\mathcal{P} \subset \Omega_i$ donnée, l'équation d'équilibre $\text{div} \boldsymbol{\sigma} = 0$ permet d'établir la relation :

$$\frac{1}{|\mathcal{P}|} \int_{\mathcal{P}} \boldsymbol{\sigma} dV = \frac{1}{|\mathcal{P}|} \int \mathbf{z} \otimes \mathbf{T} dS. \quad (6.52)$$

Considérons maintenant une inclusion sphérique de rayon R_0 . Dans ce cas, le vecteur position \mathbf{z} sur la frontière de l'inclusion est $R_0 \mathbf{n}$, où \mathbf{n} est la normale unitaire extérieure à l'inclusion $\partial \mathcal{P}$. L'équation précédente se simplifie alors en

$$\overline{\sigma}_m^{\mathcal{P}} = \overline{T}_n^{\partial \mathcal{P}}. \quad (6.53)$$

Finalement, en considérant l'ensemble des inclusions, la moyenne des contraintes dans la phase inclusionnaire est

$$\overline{\sigma}_m^i = \overline{T}_n^{\Gamma_i}. \quad (6.54)$$

Ce résultat est introduit dans (6.51) en tenant compte des lois de comportement de (6.34). Finalement, la contrainte macroscopique moyenne Σ_m peut s'exprimer sous la forme alternative :

$$\Sigma_m = k_m v_m - (1 - \rho)p + \rho(K_n \overline{[v_n]}^{\Gamma_i} + \varpi). \quad (6.55)$$

6.3.2 Homogénéisation non linéaire

Tous les résultats nécessaires à l'utilisation de la méthode sécante modifiée étant établis, revenons maintenant au problème fictif non linéaire (6.18). Formellement, le problème non linéaire est identique au problème linéaire (6.34), à la différence près que les modules non linéaires (6.21) (resp. (6.26) ou (6.32)) sont substitués à \mathbb{C}_m (resp. \mathbf{K}) dans (6.34).

La non linéarité de la raideur de la matrice va maintenant être prise en compte d'une manière simplifiée. L'idée est de supposer que les tenseurs de raideur non linéaires peuvent être vus comme des fonctions de moyennes adéquates du taux de déformation, appelés *taux de déformations effectifs*. Dans la méthode sécante modifiée [94], ces estimations effectives des taux de déformation volumique et déviatorique sont leur moyennes quadratiques sur la phase matricielle définies par (6.39). Les valeurs effectives des modules sécants (6.21) dans la phase matrice sont alors estimées en utilisant (6.40) par les modules constants sur la phase matrice :

$$k_m^{\text{eff}} \approx k_m(d_v^{\text{eff}}, d_d^{\text{eff}}) \quad ; \quad \mu_m^{\text{eff}} \approx \mu_m(d_v^{\text{eff}}, d_d^{\text{eff}}). \quad (6.56)$$

De même, la non linéarité de la raideur d'interface est prise en compte par l'estimation via (6.42) des moyennes quadratiques sur Γ_i des composantes du saut de vitesse à travers les interfaces :

$$K_n^{\text{eff}} \approx K_n(\overline{[v_n]}^{\text{eff}}, \overline{[v_t]}^{\text{eff}}) \quad ; \quad K_t^{\text{eff}} \approx K_t(\overline{[v_n]}^{\text{eff}}, \overline{[v_t]}^{\text{eff}}). \quad (6.57)$$

6.4 Critères de résistance macroscopiques

Dans cette section, la méthode de résolution mise en place à la section 6.3 est mise en oeuvre pour déterminer une estimation des états de contrainte macroscopiques appartenant à la frontière du domaine de résistance homogénéisé. Les cas des interfaces parfaites, Tresca et Mohr-Coulomb, de difficulté croissante, sont successivement étudiés.

6.4.1 Interfaces parfaites

Dérivation du critère de résistance macroscopique

Tout d'abord, le cas des interfaces parfaites est considéré. Dans cette situation, les raideurs d'interface normale et tangentielle sont infinies et aucun saut de vitesse à travers les interfaces matrice-inclusion n'est permis. Ainsi, le problème (6.18) est résolu en s'appuyant sur le problème linéaire (6.34) dans la limite où K_n et K_t sont infinis et sans précontrainte dans les interfaces ($\varpi = 0$).

En ce qui concerne le problème linéaire sous-jacent, la décomposition en trois modes de chargements proposée à la section 6.3.1 devient triviale.

Pour (P1), les modules linéaires homogénéisés (6.44) se réduisent à l'estimation classique de Mori-Tanaka pour un composite à matrice avec inclusions sphériques infiniment raides et parfaitement adhérentes :

$$\begin{aligned} k^{\text{hom}} &= \frac{3k_m + 4\rho\mu_m}{3(1-\rho)}, \\ 2\mu^{\text{hom}} &= \mu_m \frac{3k_m(2+3\rho) + 4\mu_m(2\rho+3)}{3(1-\rho)(k_m + 2\mu_m)}. \end{aligned} \quad (6.58)$$

La solution du problème (P2) est immédiatement ($\mathbf{v}_2 = \mathbf{0}, \boldsymbol{\sigma}_2 = -p\mathbf{1}$) et la solution du problème (P3) est ($\mathbf{v}_3 = \mathbf{0}, \boldsymbol{\sigma}_3 = 0$) car $\varpi = 0$.

Les calculs sont menés en substituant les modules homogénéisés (6.58) dans l'expression de l'énergie potentielle (6.50) avec $p = c$ (voir (6.21)) et $\varpi = 0$. Ensuite, les composantes du taux de déformation effectif dans la matrice sont exprimées par (6.40) et injectées dans (6.56) pour obtenir un système d'équation non linéaires portant sur d_v^{eff} et d_d^{eff} . La solution est reportée dans le module de cisaillement effectif de la matrice μ_m^{eff} :

$$2\mu_m^{\text{eff}} = \frac{(1-\rho)b}{D_d} \sqrt{\frac{6(a+b)}{2(a+b)(2\rho b + 3a)\beta^2 + bq}}, \quad (6.59)$$

où la constante positive q est définie par (6.64) et β est le taux de triaxialité du taux de déformation macroscopique défini comme

$$\beta = D_v/D_d. \quad (6.60)$$

Ensuite, en invoquant (6.21), le module de compression effectif de la matrice est $k_m^{\text{eff}} = 2\mu_m^{\text{eff}}a/b$. En utilisant ces expressions des modules effectifs de la matrice dans la raideur homogénéisée (6.58), la contrainte macroscopique Σ est finalement obtenue par la première équation d'état macroscopique dans (6.49), ce qui fournit des équations paramétriques de Σ_m et Σ_d en fonction de β . L'élimination de β donne une équation des états de contrainte sur la frontière ∂G^{hom} , ou autrement dit, une estimation du critère de résistance macroscopique. Comme attendu, ce dernier est isotrope. La frontière du domaine de résistance macroscopique ∂G^{hom} est une ellipse

dans le plan (Σ_m, Σ_d) . Le domaine de résistance G^{hom} est défini par :

$$\frac{(\Sigma_m + c)^2}{A} + \frac{\Sigma_d^2}{B} - 1 \leq 0, \quad (6.61)$$

avec $A = a \left(1 + \rho \frac{2b}{3a}\right)$; $B = b \left(1 + \rho \frac{9a + 4b}{6(a + b)}\right)$.

Observons que, dans ce cas où les interfaces sont parfaites, le domaine de résistance homogénéisé G^{hom} contient toujours le domaine de résistance de la matrice argileuse (6.6). Les inclusions rigides jouent alors bien le rôle d'un renfort.

Le résultat (6.61) qui concerne le cas des inclusions parfaites a été récemment établi par Shen *et al.* [90] en suivant la même méthode. Dans la suite, de nouveaux résultats sont établis afin de prendre en compte la possibilité d'une imperfection des interfaces entre la matrice et les inclusions.

6.4.2 Interfaces de Tresca

Le cas où les interfaces sont gouvernées par un critère de résistance de Tresca (6.15) est maintenant considéré. Tout d'abord, le critère de résistance macroscopique est établi en supposant que les interfaces sont activées. Ensuite, les conditions d'activation des interfaces sont déterminées.

Dérivation du critère macro lorsque les interfaces sont activées

Au regard des lois de comportement fictives (6.21) et (6.25), le problème linéaire à considérer implique une précontrainte $p = c$ dans la matrice, aucune précontrainte dans les interfaces ($\varpi = 0$) et une raideur d'interface normale K_n infinie.

La valeur effective du saut de vitesse tangentiel $\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}}$ à travers l'interface est exprimée en fonction des modules effectifs de la matrice par utilisation de (6.42) et (6.50), avec \mathbb{C}^{hom} caractérisé par (6.45) et K_t par (6.26). Ce faisant, une équation polynomiale du second ordre en $\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}}$ apparaît. Or par définition, $\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}}$ doit être positif, et l'équation a seulement zéro ou une racine positive suivant la résistance tangentielle k des interfaces. Dès lors, deux situations doivent être étudiées :

1. interfaces inactivées : si l'équation n'admet pas de racine positive, les interfaces sont dites inactivées, ce qui veut dire que la condition limite du critère d'interface n'est pas atteinte. Dans ce cas, $\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}} = 0$ et $K_t \rightarrow \infty$, de sorte que le critère de résistance macroscopique pour des interfaces parfaites (6.61) est retrouvé.
2. interfaces activées : si l'équation admet une racine positive $\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}} > 0$, cela veut dire que le critère d'interface est atteint et que les interfaces sont activées.

Plaçons nous dans le cas où les interfaces sont activées. La condition mathématique pour l'activation des interfaces sera fournie par la suite. Le saut de vitesse tangentiel $\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}}$, ainsi que K_t^{eff} via (6.26), sont maintenant des fonctions des taux de déformation volumique et déviatorique effectifs dans la matrice. À leur tour, ces taux de déformation effectifs de la matrice d_v^{eff} et d_d^{eff} sont exprimées par utilisation de (6.40), (6.50) et (6.45) dans laquelle la substitution $k_m = 2\mu_m a/b$ est réalisée au regard de (6.21). Ces expressions de d_v^{eff} et d_d^{eff} sont ensuite injectées dans μ_m ; il en résulte une équation polynomiale du second ordre en μ_m^{eff} qui admet une seule racine positive (6.68). Les valeurs effectives de k_m^{eff} et K_t^{eff} en sont déduites explicitement et substituées dans μ^{hom} et k^{hom} . Finalement, une équation paramétrique des états de contraintes macroscopiques appartenant à la frontière du critère de résistance macroscopique est trouvée par utilisation de

(6.49). Ces états de contraintes macroscopiques obtenus par (6.49) appartiennent à une portion d'ellipse dans le plan (Σ_m, Σ_d) d'équation

$$\frac{(\Sigma_m + c)^2}{A} + \frac{(\Sigma_d - \Sigma_{d0})^2}{B} \leq 1. \quad (6.62)$$

Si les interfaces sont inactivées, les paramètres de l'ellipse correspondent au cas des interfaces parfaites et sont définis par (6.61) et $\Sigma_{d0} = 0$. Autrement, si les interfaces sont activées, les paramètres de l'ellipse sont

$$\begin{aligned} A &= a \left(1 + \frac{2\rho b}{3a} \right) \left(1 - \left(\frac{k}{k_e} \right)^2 \right) \\ B &= \frac{(1 - \rho)rb^2}{18\rho(b + a)k_e^2} \left(1 - \left(\frac{k}{k_e} \right)^2 \right) \\ \Sigma_{d0} &= \frac{\sqrt{5}(2b + 3a)}{6(b + a)} \frac{b}{k_e^2} k \end{aligned} \quad (6.63)$$

dans lesquels les notations suivantes ont été introduites :

$$\begin{aligned} t &= (4 - 2\rho)b + (5 - 2\rho)a, \\ q &= (6 + 4\rho)b + (6 + 9\rho)a, \\ r &= (4\rho + 12)b + (9\rho + 15)a. \end{aligned} \quad (6.64)$$

Conditions d'activation des interfaces

À ce stade, les conditions d'activation des interfaces doivent être explicitées. Ces conditions dépendent du taux de triaxialité $\beta = D_v/D_d$ du taux de déformation macroscopique. Premièrement, l'existence de racines réelles de l'équation portant sur $[[v_t]]^{\text{eff}}$ impose d'avoir

$$k^2 \leq k_e^2 = \frac{tb}{6\rho(b + a)}. \quad (6.65)$$

Ensuite, une des racines est positive si

$$k^2 \leq k_c^2(\beta) = \frac{5}{6} \frac{(b(2b + 3a))^2}{2(b + a)^2(3a + 2b\rho)\beta^2 + (b + a)bq}, \quad (6.66)$$

où l'inégalité $k_c^2(\beta) < k_e^2$ est vérifiée quelque soit la valeur de β . Remarquons aussi que la raideur tangentielle critique $k_c(\beta)$ est une fonction paire et décroissante de β ; elle atteint donc son maximum en $\beta = 0$, qui correspondant au cas limite d'un taux de déformation macroscopique purement déviatorique.

En résumé, deux situations doivent être distinguées :

- Si $k > k_c(0)$, les interfaces ne sont jamais activées car elles sont trop résistantes en comparaison avec la matrice (Fig. 6.4a,6.4b). Le critère de résistance macroscopique est égal au critère (6.61) obtenu dans le cas des interfaces parfaites.
- Si $k \leq k_c(0)$, une valeur critique du taux de triaxialité des déformations β (6.60) apparaît :

$$\beta_c^2 = \frac{5}{12(3a + 2b\rho)} \left(\frac{(2b + 3a)b}{(b + a)k} \right)^2 \left(1 - \left(\frac{k}{k_c(0)} \right)^2 \right). \quad (6.67)$$

La discussion concernant le statut des interfaces est alors contrôlée par le taux de triaxialité β :

- si $\beta^2 \geq \beta_c^2$, les interfaces ne sont pas activées.
- si $\beta^2 < \beta_c^2$, les interfaces sont activées. Dans ce cas, le module de cisaillement effectif dans la matrice prend la valeur

$$2\mu_m^{\text{eff}} = \frac{(1-\rho)b}{D_d} \sqrt{\frac{3t}{(t(3a+2b\rho)\beta^2 + (1-\rho)br)} \left(1 - \left(\frac{k}{k_e}\right)^2\right)} \quad (6.68)$$

et le saut de vitesse tangentiel entre les interfaces matrice-inclusions vaut

$$\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}} = \frac{\sqrt{5}(2b+3a)R_0D_d}{3t} \left(1 - \frac{k}{k_c(\beta)}\right). \quad (6.69)$$

Ainsi, sous réserve que la résistance tangentielle des interfaces soit suffisamment faible ($k \leq k_c(0)$), la frontière ∂G^{hom} du domaine de résistance macroscopique résulte de la combinaison de deux ellipses. Aux forts taux de triaxialité ($\beta^2 \geq \beta_c^2$), le critère de résistance correspondant aux interfaces parfaites est retrouvé, tandis qu'aux faibles taux de triaxialité ($\beta^2 \leq \beta_c^2$), le critère est affaibli par l'activation des interfaces et bifurque sur une portion d'une plus petite ellipse (Fig. 6.4c,6.4d), dont le centre est situé sur l'axe vertical $\Sigma_m = -c$. Remarquons que les deux ellipses sont tangentes à leur intersection en $\beta^2 = \beta_c^2$. Ainsi, à propriétés de résistance de la matrice et concentration des inclusions fixées, une réduction de la résistance tangentielle k des interfaces conduit à une résistance déviatorique plus faible tandis que les résistances hydrostatiques, en compression comme en traction, restent inchangées. Enfin, lorsque la résistance tangentielle des interfaces est très faible, la résistance déviatorique du matériau argileux renforcé par inclusions est *plus faible* que la résistance déviatorique de la matrice argileuse seule.

Dans le cas où les paramètres de résistance de la matrice argileuse sont régis par (6.7), le critère de résistance macroscopique est très sensible à la valeur de la porosité. Il est alors instructif de représenter le critère de résistance macroscopique dans l'espace à trois dimensions $(\Sigma_m, \Sigma_d, \phi)$. La surface engendrée par la série de frontières $\partial G^{\text{hom}}(\phi)$ est représentée Fig. 6.5. Suivant la valeur de la porosité, les interfaces peuvent ou non être activées.

6.4.3 Interfaces de Mohr-Coulomb

Finalement, le cas où les interfaces sont gouvernées par un critère de résistance de Mohr-Coulomb (6.16) est considéré. Dans ce cas, le problème linéaire sous-jacent fait appel à toute la complexité des résultats mis en place à la section 6.3.1, impliquant un précontrainte $p = c$ dans la matrice et $\varpi = T_p$ dans les interfaces.

Dérivation du critère macro lorsque les interfaces sont activées

Procédons comme pour le cas des interfaces de Tresca et supposons les interfaces activées avant d'explicitier les conditions d'activation. Le saut de vitesse tangentiel effectif $\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}}$ à travers l'interface est exprimé en fonction des modules effectifs de la matrice et de la fonction \mathcal{F} des interfaces de Mohr-Coulomb en utilisant (6.42) et (6.50) où \mathbb{C}^{hom} est caractérisé par (6.45) et K_t par (6.32). D'après (6.21), $k_m = 2\mu_m a/b$ et la seule racine conditionnellement positive est

$$\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}} = \frac{6(1-\rho)(a+b)\alpha_i \mathcal{F} + 2\sqrt{5}\mu^{\text{eff}}(2b+3a)D_d}{6t\mu^{\text{eff}}} R_0. \quad (6.70)$$

Le saut de vitesse normal peut être déterminé soit d'après la règle de normalité $\llbracket v_n \rrbracket^{\text{eff}} = \alpha_i \llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}}$ (voir section 6.2.2) ou, de façon consistante, par l'estimation quadratique (6.42). Il est intéressant de remarquer que l'estimation directe $\overline{\llbracket v_n \rrbracket^{\Gamma_i}}$, que l'on peut calculer par la règle de moyenne des taux de déformation, s'avère ici égale à l'estimation quadratique $\llbracket v_n \rrbracket^{\text{eff}}$.

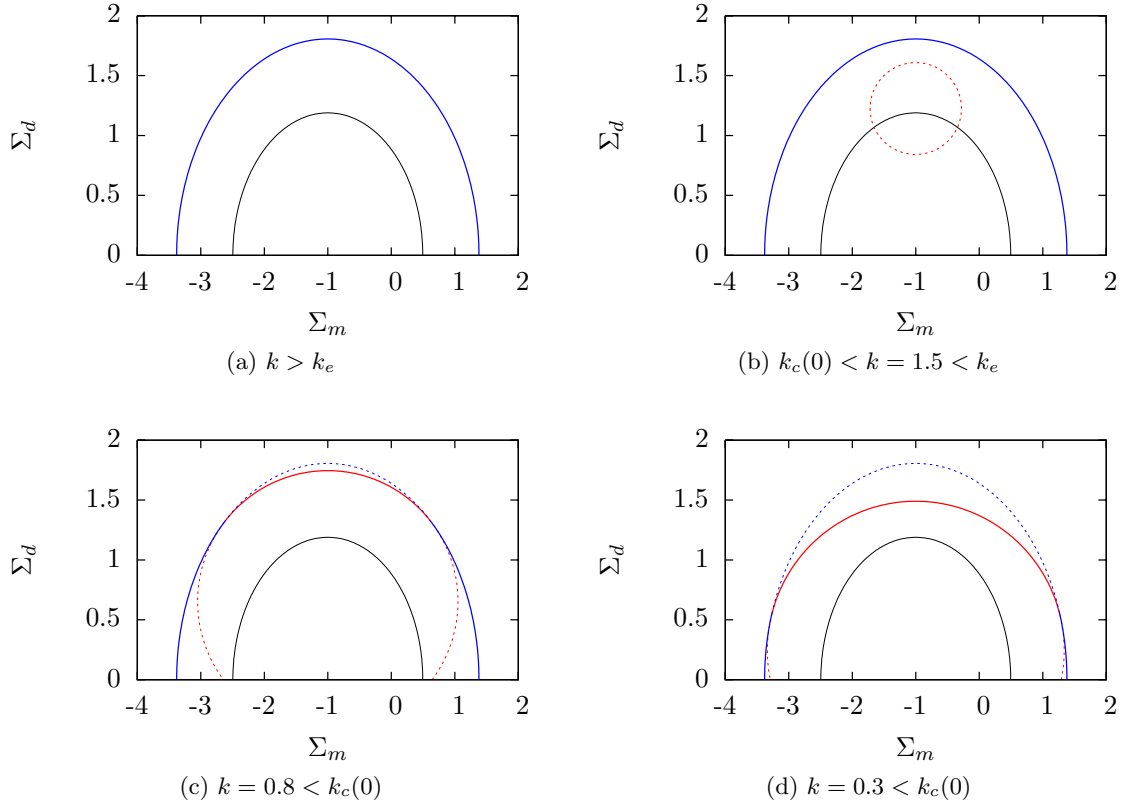


FIG. 6.4: Critères de résistance macroscopiques dans le cas des interfaces méso avec un critère de Tresca (lignes bleues et rouges épaisses). La ligne bleue correspond aux interfaces inactivées et la ligne rouge aux interfaces activées, pour différentes valeurs de la résistance tangentielle k des interfaces. La ligne noire fine correspond au critère de résistance de la matrice pour $a = 5$, $b = 2$ et $c = 1$. La fraction volumique d'inclusions est fixée à $\rho = 0.5$. Les lignes bleues et rouges fines sont les portions restantes des ellipses qui ne font pas partie de la frontière du domaine de résistance. Les valeurs de k sont à comparer aux résistances critiques valant $k_e = 1.57$ et $k_c(0) = 1.12$ dans ce cas.

Le paramètre d'interface $\mathcal{F}(Y)$ (voir (6.30)) est déterminé par comparaison d'une part de l'expression macroscopique (6.49) de la contrainte macroscopique moyenne :

$$\Sigma_m = k^{\text{hom}} D_v - c b_m + (1 - b_m) T_p$$

et d'autre part de l'expression (6.55) issue de la règle de moyenne des contraintes :

$$\Sigma_m = k_m v_m - (1 - \rho) c + \rho (K_n \llbracket v_n \rrbracket^{\text{eff}} + T_p),$$

où l'égalité $\llbracket v_n \rrbracket^{\text{eff}} = \overline{\llbracket v_n \rrbracket}^{\Gamma_i}$ a été mise à profit. La variation de volume normalisée de la matrice v_m est déterminée grâce à la seconde équation d'état macroscopique (6.49). Par ailleurs, d'après la loi de comportement de l'interface (6.30), $K_n \llbracket v_n \rrbracket^{\text{eff}} + T_p = h_i + \mathcal{F}$. De plus, dans le cas limite $K_n, T_p \rightarrow \infty$, la loi de comportement fictive de l'interface est telle que

$$b_m \rightarrow 1 \quad ; \quad (1 - b_m) T_p \rightarrow -\frac{\rho(3k_m + 4\mu_m)}{(1 - \rho) R_0} \llbracket v_n \rrbracket^{\text{eff}} \quad ; \quad \frac{T_p}{N_m} \rightarrow -\frac{3\rho}{R_0} \llbracket v_n \rrbracket^{\text{eff}}.$$

Finalement, la comparaison des deux expressions de la contrainte moyenne macroscopique ci-

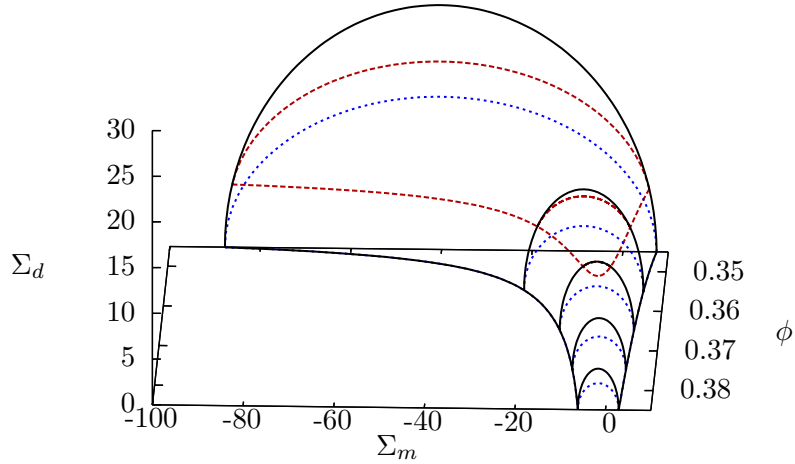


FIG. 6.5: Critère de résistance macroscopiques dans le cas des interfaces méso avec un critère de Tresca. Le critère de la matrice (6.6) est utilisé avec $h_g=92,86$; $\alpha_g=0,055$; $\rho=0,6$ et $k = 0$ (bleu pointillé) ; 4 (rouge tiret) ou ∞ (noir plein).

dessus permet de déterminer la valeur du paramètre d'interface :

$$\mathcal{F} = \frac{3k^{\text{eff}} + 4\mu^{\text{eff}}}{3(1 - \rho)} D_v - \frac{3\rho k^{\text{eff}} + 4\mu^{\text{eff}}}{R_0(1 - \rho)} \llbracket v_n \rrbracket^{\text{eff}} - c - h_i. \quad (6.71)$$

La dernière étape se déroule comme suit : une équation sur $\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}}$ doit être établie par substitution de (6.71) dans (6.70), avec utilisation de la règle de normalité $\llbracket v_n \rrbracket^{\text{eff}} = \alpha_i \llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}}$ et de l'identité $k^{\text{eff}} = 2\mu^{\text{eff}} a/b$. De même que pour les interfaces de Tresca, deux situations doivent être étudiées lors de la résolution de cette équation permettant d'obtenir $\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}}$ en fonction de μ^{eff} , D_v et D_d :

1. Interfaces inactivées : si cette équation n'admet pas de racine positive, cela correspond physiquement à des interfaces non activées. Dans ce cas, $\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}} = 0$ donc $K_t \rightarrow \infty$ et le critère de résistance macroscopique (6.61) correspondant aux interfaces parfaites est retrouvé.
2. Interfaces activées : si l'équation admet une racine positive $\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}} > 0$, cela signifie que les interfaces sont activées.

Dans la situation où les interfaces sont activées, les modules effectifs de la matrice doivent être déterminés en supposant l'existence d'une valeur strictement positive de $\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}}$. Pour plus de clarté, les notations additionnelles suivantes sont introduites :

$$\begin{aligned} u &= 2(a + b)(3\rho a + 2b)\alpha_i^2 + bt, \\ w &= 2(a + b)q\alpha_i^2 + 5b(3a + 2b\rho). \end{aligned} \quad (6.72)$$

En supposant $\llbracket v_t \rrbracket^{\text{eff}} > 0$, le saut de vitesse normal effectif $\llbracket v_n \rrbracket^{\text{eff}}$ est déduit de la règle de normalité et la raideur d'interface tangentielle effective K_t^{eff} de (6.32). Ensuite, les composantes effectives du taux de déformation dans la matrice sont exprimées par (6.40). L'expression est prise dans le cas limite (6.33) afin de vérifier asymptotiquement la règle de normalité des interfaces, comme pour le calcul du paramètre d'interface \mathcal{F} . Ces estimations du taux de déformation effectif sont injectées dans (6.21) pour obtenir une équation polynomiale du second degré en μ_m^{eff} , qui admet une racine positive sous réserve que $(h_i + c)^2 \leq h_4^2$ où

$$h_4^2 = \frac{u}{6\rho(a + b)\alpha_i^2}. \quad (6.73)$$

Le module de cisaillement effectif de la matrice μ_m^{eff} est finalement

$$2\mu_m^{\text{eff}} = (1 - \rho) \sqrt{\frac{3bu}{A'D_v^2 + B'D_d^2 - 2C'D_v D_d} \left(1 - \left(\frac{h_i + c}{h_4}\right)^2\right)}, \quad (6.74)$$

où les notations suivantes ont été utilisées :

$$\begin{aligned} A' &= 12a(a + b)(1 - \rho)^2 \alpha_i^2 + (3a + 2b\rho)t, \\ B' &= (3\rho a + 2b)q\alpha_i^2 + b(1 - \rho)r, \\ C' &= \sqrt{5}\rho(2b + 3a)^2 \alpha_i. \end{aligned} \quad (6.75)$$

Le saut de vitesse tangentiel, dont le signe doit encore être discuté, est donné par

$$[[v_t]]^{\text{eff}} = \frac{R_0}{3u} \left((2b + 3a)(\sqrt{5}bD_d + 2\alpha_i(a + b)D_v) - \frac{3(1 - \rho)b(a + b)\alpha_i(h_i + c)}{\mu_m^{\text{eff}}} \right). \quad (6.76)$$

Le module de compression effectif de la matrice k_m^{eff} est déduit de μ_m^{eff} (6.74) par (6.21) tandis que K_t^{eff} (voir (6.32)) est obtenu par $[[v_t]]^{\text{eff}}$ (6.76) et \mathcal{F} (6.71). Ces quantités sont finalement introduites dans (6.45) afin de déterminer μ^{hom} et k^{hom} . Les états de contrainte macroscopiques (Σ_m, Σ_d) situés sur la frontière du domaine de résistance macroscopique sont alors déduits de (6.49). La fonction d'appui $\pi_{\text{act}}^{\text{hom}}$ associée à ces états de contrainte pour la partie du critère correspondant aux interfaces activées est reconnue d'après $\Sigma = \partial\pi_{\text{act}}^{\text{hom}}(\mathbf{D})/\partial\mathbf{D}$ comme étant

$$\pi_{\text{act}}^{\text{hom}}(\mathbf{D}) = \sqrt{\frac{3b}{u} \left(1 - \left(\frac{h_i + c}{h_4}\right)^2\right)} (A'D_v^2 + B'D_d^2 - 2C'D_v D_d) + \Sigma_{m0}D_v + \Sigma_{d0}D_d, \quad (6.77)$$

avec

$$\Sigma_{m0} = \frac{(h_i + c)\alpha_i(2b + 3a)\rho}{u} 2(a + b)\alpha_i - c \quad ; \quad \Sigma_{d0} = \frac{(h_i + c)\alpha_i(2b + 3a)\rho}{u} \sqrt{5}b. \quad (6.78)$$

La frontière du domaine de résistance macroscopique correspondant aux interfaces activées, dont $\pi_{\text{act}}^{\text{hom}}$ (6.77) est la fonction d'appui, est une ellipse inclinée dans le plan (Σ_m, Σ_p) , centrée en $(\Sigma_{m0}, \Sigma_{p0})$ et caractérisée par la partie du critère de résistance $f_{\text{act}}^{\text{hom}}$ suivante correspondant aux interfaces activées :

$$f_{\text{act}}^{\text{hom}}(\Sigma) = \frac{(\Sigma_m - \Sigma_{m0})^2}{A} + \frac{(\Sigma_d - \Sigma_{d0})^2}{B} + \frac{2(\Sigma_m - \Sigma_{m0})(\Sigma_d - \Sigma_{d0})}{C} - 1, \quad (6.79)$$

avec les paramètres d'ellipse impliquant (6.64), (6.73) et (6.75) définis comme

$$\begin{aligned} A &= \frac{s}{B'} \quad ; \quad B = \frac{s}{A'} \quad ; \quad C = \frac{s}{C'}, \\ \text{avec } s &= \frac{(1 - \rho)b}{3} (6a(1 - \rho)q\alpha_i^2 + (3a + 2b\rho)r) \left(1 - \left(\frac{h_i + c}{h_4}\right)^2\right). \end{aligned} \quad (6.80)$$

Conditions d'activation des interfaces

Les conditions d'activation des interfaces doivent maintenant être explicitées en détail. À cet effet, le signe de $[[v_t]]^{\text{eff}}$, fonction de $h_i + c$ et $\beta = D_v/D_d$ doit être étudié et discuté.

La discussion, un peu technique, impose l'introduction de quatre paramètres notés h_j ($j = 1, \dots, 4$) homogènes à une contrainte. Le paramètre h_4 a été défini par (6.73), tandis que les

autres sont :

$$\begin{aligned} h_1^2 &= \frac{(2b+3a)^2}{3(3a+2b\rho)}, \\ h_2^2 &= \frac{5b(2b+3a)^2}{6(a+b)q\alpha_i^2}, \\ h_3^2 &= \frac{w(2b+3a)^2}{6(b+a)(3a+2\rho b)q\alpha_i^2}. \end{aligned} \quad (6.81)$$

Ces paramètres sont ordonnés comme suit :

$$h_1 < h_3 < h_4 \quad ; \quad h_2 < h_3. \quad (6.82)$$

Le signe de $h_1 - h_2$ dépend de la position de α_i par rapport à

$$\alpha_c^2 = \frac{5b(3a+2\rho b)}{2(a+b)q}. \quad (6.83)$$

Si $\alpha_i > \alpha_c$, alors $h_2 < h_1$, sinon $h_2 \geq h_1$.

1. L'activation des interfaces n'est pas possible si $(h_i + c)^2 > h_4^2$ défini par (6.73), c'est à dire si leur résistance en traction est trop élevée (Fig. 6.6a). Le critère de résistance macroscopique (6.61) correspondant aux interfaces parfaites est retrouvé.
2. L'activation n'est uniquement possible que sous la condition additionnelle $(h_i + c)^2 \leq h_3^2$, qui est plus sévère que la première car $h_3 < h_4$. Lorsque $h_3^2 < (h_i + c)^2 < h_4^2$, une racine positive μ^{eff} existe mais n'a pas de conséquence physique car l'équation sur $[[v_t]]^{\text{eff}}$ n'a pas de racine positive. Plus précisément, le domaine de résistance macroscopique basé sur (6.79) existe mathématiquement : il est strictement inclus dans l'ellipse définie par (6.61) (interfaces inactivées) et ne l'intersecte pas. Néanmoins, sa frontière ne fait pas partie de la frontière du domaine de résistance macroscopique (Fig. 6.6b) car $[[v_t]]^{\text{eff}} < 0$.
3. Dans le cas intermédiaire $h_1 < h_i + c < h_3$, les interfaces sont activées si le taux de triaxialité des déformations (6.60) $\beta \in [\beta_{c-}; \beta_{c+}]$ où

$$\beta_{c\pm} = \frac{\sqrt{5b(2b+3a)} \pm (h_i + c) \sqrt{3bw \left(1 - ((h_i + c)/h_3)^2\right)}}{2(a+b)(2b+3a)\alpha \left(((h_i + c)/h_1)^2 - 1 \right)}. \quad (6.84)$$

L'intersection des deux parties du critère de résistance macroscopique se fait aux deux points correspondants à $\beta = \beta_{c\pm}$ (Fig. 6.6c).

Le signe de la valeur critique β_{c-} est physiquement intéressant. Lorsque $\beta_{c-} > 0$, le point correspondant sur la frontière du domaine de résistance macroscopique est situé à la droite du sommet de l'ellipse. Dans ce cas, la contrainte déviatorique maximale est atteint dans un état où les interfaces ne sont pas activées. L'activation des interfaces est alors restreinte aux valeurs élevées de la contrainte moyenne macroscopique. Au contraire, si $\beta_{c-} < 0$, le point correspondant sur la frontière du domaine de résistance macroscopique est situé à la gauche du sommet de l'ellipse, ce qui implique que la contrainte déviatorique maximale est atteinte dans un état où les interfaces sont effectivement activées. Ces remarques sont en accord avec le fait que β_{c-} est une fonction croissante de h . De fait, le signe de β_{c-} est déterminé comme suit : β_{c-} est négatif si $(h_i + c)^2 < h_2^2$ et positif sinon. Remarquons que β_{c-} n'est pas singulier en $h_i + c = h_1$ car il se réexprime sous la forme

$$\beta_{c-} = \frac{5b^2(2b+3a) \left(((h_i + c)/h_2)^2 - 1 \right)}{2(a+b)\alpha \left(\sqrt{5b(2b+3a)} + (h_i + c) \sqrt{3bw \left(1 - ((h_i + c)/h_3)^2\right)} \right)}. \quad (6.85)$$

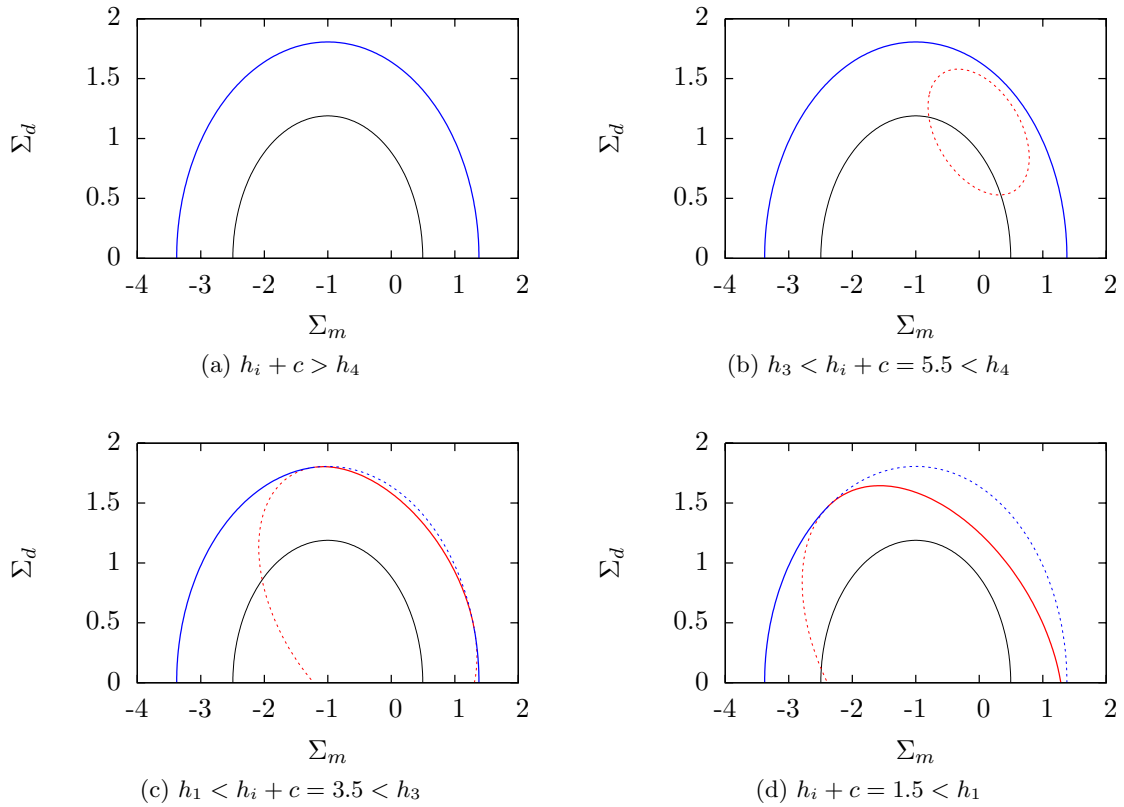


FIG. 6.6: Critères de résistance macroscopique dans le cas des interfaces méso suivant un critère de Mohr-Coulomb (lignes bleues et rouges épaisses). La ligne bleue correspond aux interfaces inactivées et la ligne rouge aux interfaces activées, pour différentes valeurs de la résistance en traction h_i des interfaces. La ligne noire correspond au critère de la matrice pour $a = 5$, $b = 2$ et $c = 1$. La fraction volumique d'inclusion est $\rho = 0,5$ et l'angle de frottement $\alpha_i = 0,3$. Les lignes pointillées rouges et bleues sont les parties restantes des ellipses qui n'appartiennent pas à la frontière du domaine de résistance. Les résistances d'interfaces critiques sont ici $h_1 = 2,66$; $h_2 = 3,73$; $h_3 = 4,58$ et $h_4 = 5,93$.

4. Si $h_i + c < h_1$, $\beta_{c+} \rightarrow \infty$ et les interfaces sont toujours activées si $\beta > \beta_{c-}$. L'intersection des deux parties du critère de résistance macroscopique a lieu en un seul point (Fig. 6.6d). Dans ce cas, les interfaces sont activées pour un état de contrainte macroscopique en traction isotrope pure ($\beta \rightarrow \infty$).

Ainsi, lorsque la résistance en traction des interfaces est suffisamment faible ($h_i + c < h_3$), le critère (6.61) correspondant aux interfaces parfaites est tronqué et la symétrie selon le plan $\Sigma_m = -c$ est rompue. L'ellipse correspondant à la frontière du domaine de résistance macroscopique où les interfaces activées (6.80) est tangente en $\beta_{c\pm}$ à celle où les interfaces sont inactivées (6.61), de sorte que la frontière ∂G^{hom} du domaine de résistance macroscopique n'a pas de point anguleux. À propriétés de résistance de la matrice et concentration des inclusions fixées, l'effet de renfort des inclusions rigides décroît avec une réduction de la résistance en traction des interfaces h_i ou de l'angle de frottement α_i (Fig. 6.6). Finalement, il est intéressant de mentionner que le cas des interfaces de Tresca est bien retrouvé à partir du cas Mohr-Coulomb dans la limite $\alpha_i \rightarrow 0$ et $h_i \rightarrow \infty$ avec $h_i = k/\alpha_i$.

Dans le cas où les paramètres de résistance de la matrice argileuse sont régis par (6.7), la surface engendrée par la série de frontières $\partial G^{\text{hom}}(\phi)$ est représentée Fig. 6.7.

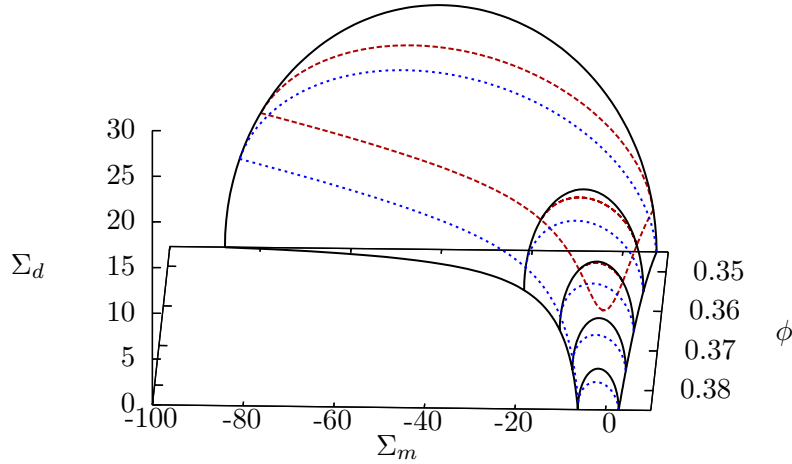


FIG. 6.7: Critère de résistance macroscopiques dans le cas des interfaces méso avec un critère de Mohr-Coulomb. Le critère de la matrice (6.6) est utilisé avec $h_g=92,86$; $\alpha_g=0,055$; $\rho=0,6$; $\alpha_i=0,065$ et $h_i = 0$ (bleu pointillé); 50 (rouge tiret) ou ∞ (noir plein).

Comparaison à d'autres méthodes d'homogénéisation

Le résultat (6.61) qui concerne le cas des inclusions parfaites a été récemment établi par Shen *et al.* [90] en suivant la même méthode, appelée “méthode variationnelle”. Une comparaison avec une méthode alternative de type Gurson est proposée dans [50]. De nouvelles comparaisons sont proposées dans cette section, toujours dans le cas où les interfaces sont parfaites.

Un raisonnement général permet de montrer que le décalage $-c\mathbf{1}$ dans (6.6) conduit à une translation du domaine de résistance homogénéisé de $-c\mathbf{1}$ dans le cas d'inclusions rigides avec un critère d'interface insensible à la contrainte normale, ce qui est bien reproduit par la méthode variationnelle. Il est donc suffisant d'étudier le cas d'un critère de matrice elliptique centré à l'origine.

Rappelons que le rapport d'aspect de l'ellipse du critère de résistance de la matrice (6.6) peut avoir une grande amplitude, en particulier à l'approche de la porosité critique. Il convient de vérifier la qualité des estimations proposées, obtenues par la méthode variationnelle, pour des rapports d'aspect faibles comme très élevés.

Modèle de sphère composite Tentons ici de vérifier la qualité de l'estimation (6.61) du critère de résistance macroscopique en l'absence d'effets d'interfaces obtenue par la méthode variationnelle. Dans (6.61), la résistance en compression (ou traction isotrope) est déterminée par le grand axe \sqrt{A} et la précontrainte $-c$. Au vu des remarques précédentes, il est suffisant de vérifier la pertinence de la résistance isotrope proposée en l'absence du décalage $-c\mathbf{1}$, qui est uniquement déterminée par \sqrt{A} . Dans (6.61), la déviatorique maximale est déterminée par \sqrt{B} .

L'approche cinématique du Calcul à la Rupture peut être mise en oeuvre sur une sphère composite constituée d'un noyau sphérique rigide entouré de la matrice argileuse avec le critère de résistance (6.6) sans le décalage $-c\mathbf{1}$. Dans un premier temps, pour les directions purement hydrostatique (voir (F.19)) ou déviatorique (voir [50]), le choix de champs de vitesse correspondants à des taux de déformation uniformes avec discontinuités de vitesse conduit aux majorants

suivants

$$\begin{aligned}\Sigma_m^{+,uni.} &= \sqrt{a} \left[(1 - \rho) + \rho \sqrt{1 + \frac{2b}{3a}} \right] \\ \Sigma_d^{+,uni.} &= \sqrt{b} \left[(1 - \rho) + \rho \sqrt{\frac{17b + 12a}{10b}} \right]\end{aligned}\tag{6.86}$$

La charge hydrostatique limite exacte (F.7) de la sphère composite a été établie dans l'annexe F par combinaison des approches cinématique et statique du Calcul à la Rupture. Pour la contrainte moyenne macroscopique maximale supportable, les résultats (F.7), (6.86) et (6.61) sont comparés Fig. 6.8. La méthode variationnelle surestime légèrement la résistance en compression de la sphère composite, mais l'écart reste tout à fait acceptable. Notons que la cinématique du mécanisme de ruine de la sphère composite sous chargement hydrostatique fait intervenir une localisation du taux de déformation dans la matrice à la frontière avec l'inclusion, qui se manifeste par un saut de vitesse (Fig. F.1). Remarquons que l'approche cinématique avec un taux de déformation uniforme dans la matrice et un saut de vitesse à la frontière avec l'inclusion (voir Fig. F.1) donne une estimation (6.86) très proche de celle obtenue par la méthode sécante modifiée (6.61), qui utilise aussi un taux de déformation uniforme dans la matrice.

La discussion concernant la contrainte déviatorique maximale est plus délicate. Remarquons tout de suite que dans la limite $a/b \rightarrow \infty$, pour laquelle on retrouve un critère de Von Mises pour la matrice, \sqrt{B} dans (6.61) reste fini tandis que $\Sigma_d^{+,uni.}$ (6.86) tend vers l'infini quelque soit la fraction volumique de renfort $\rho > 0$, ce qui n'est pas physiquement acceptable. La divergence est due au terme de discontinuité du champ de vitesse choisi, qui ne respecte pas asymptotiquement pour $a/b \rightarrow \infty$ la condition de pertinence $[[v_n]] = 0$ du critère de Von Mises. En tenant compte de cette remarque, une nouvelle borne supérieure (F.52) de la résistance déviatorique maximale de la sphère composite a été établie dans l'annexe F. L'amélioration apportée par la borne (F.52) par rapport à (6.86) se manifeste principalement pour les rapports d'aspect a/b élevés (voir Fig. 6.8). Par ailleurs, elle est en excellent accord avec les résultats de la méthode variationnelle pour les faibles fractions volumiques.

Cellule unitaire en conditions aux limites périodiques Par la méthode numérique présentée au chapitre 5, la résistance d'un réseau périodique cubique faces centrées (CFC) d'inclusions plongées dans la matrice est étudiée. Seules les directions de chargement $\mathbf{D} = 1/3 \cos(\theta)\mathbf{1} + 1/\sqrt{6} \sin(\theta)(\mathbf{1} - \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z)$ sont ici explorées numériquement. Dans le plan (Σ_m, Σ_d) qui y correspond, le critère est quasiment elliptique aux faibles fractions volumiques d'inclusions mais s'en écarte légèrement aux plus fortes concentrations (voir Fig. 6.9 et 6.10). Rappelons cependant que l'étude d'autres directions de chargement présentée au chapitre 5 montre une dépendance du critère macroscopique au troisième invariant des contraintes, que la méthode présentée dans ce chapitre n'a pas permis de capturer.

La résistance en compression/traction hydrostatique pour le réseau périodique est supérieure à celles de la sphère composite et de l'estimation par la méthode variationnelle (Fig. 6.8). Ces deux dernières sont très proches. Une première hypothèse est que cette surestimation est la signature de l'interaction entre les inclusions par périodicité. Notons aussi que dans le réseau CFC les inclusions forment un squelette rigide à partir du seuil de percolation $\rho \approx 0,74$, tandis que le schéma de Mori-Tanaka comme le modèle de sphère composite impliquent l'absence de percolation des inclusions. Cependant, la surestimation pour le réseau périodique est aussi observée aux faibles fractions volumiques d'inclusions. Une autre hypothèse est que la méthode numérique utilisée prend mal en compte la localisation des déformations. Toutefois, une étude de sensibilité à la discrétisation semble infirmer cette seconde hypothèse. Notons qu'un tel phénomène de différence prononcée sur la résistance en compression/traction hydrostatique de la sphère

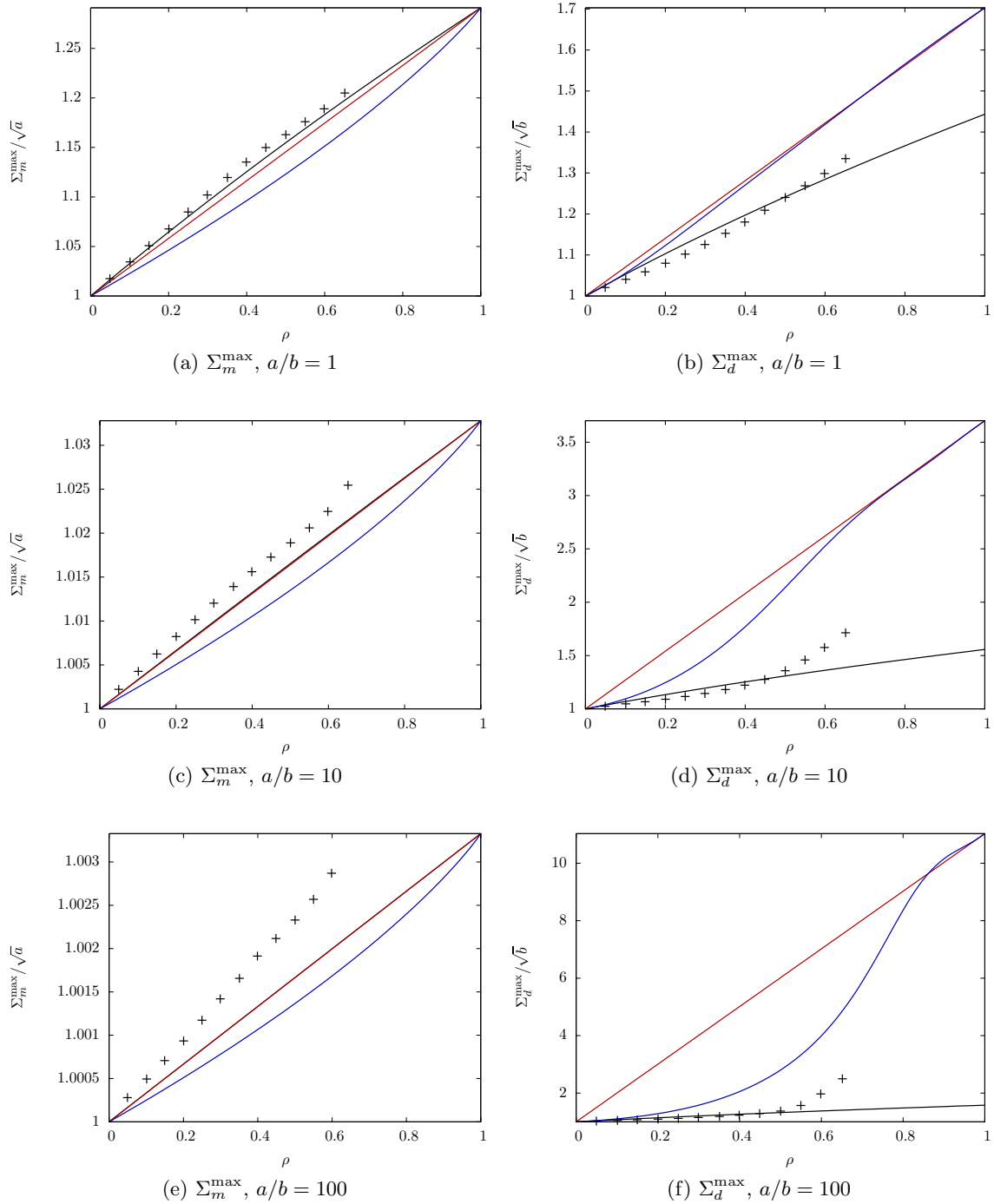


FIG. 6.8: Contraintes moyenne et déviatorique macroscopiques maximales (interfaces parfaites). Trait noir : méthode variationnelle (6.61), trait rouge : sphère composite, borne supérieure par champ uniforme (6.86), trait bleu : sphère composite, charge limite exacte (F.7) pour Σ_m^{\max} ou borne supérieure par champ avec fonction de courant (F.52) pour Σ_d^{\max} , point noir : calcul par la méthode numérique du chapitre 5 sur un réseau CFC et une grille 64^3 .

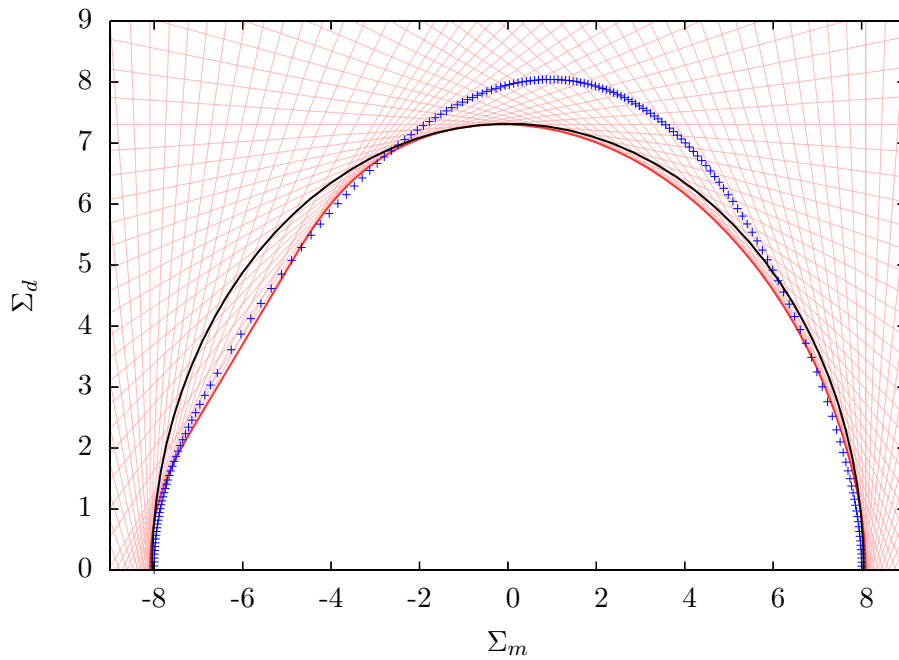


FIG. 6.9: Comparaison des critères de résistance macroscopique pour $\rho = 0,51$. Rouge : méthode numérique du chapitre 5 sur un réseau CFC, bleu : calcul élastoplastique sur une sphère composite (réalisés par G. Hassen, Navier/ENPC), noir : (6.61).

composite d'un réseau périodique a été observée pour le cas d'une matrice avec critère de Von Mises et des pores sphériques [5, 80, 103].

La résistance déviatorique (6.61) majore légèrement celle du réseau périodique aux faibles fractions volumiques mais est sensiblement plus faible aux plus fortes concentrations (Fig. 6.8).

D'autres comparaisons dans le cas d'interfaces imparfaites seraient bienvenues pour statuer de la qualité des estimations proposées, mais nécessiteraient l'utilisation de méthodes plus sophistiquées qui permettent la prise en compte de discontinuités du champ de vitesse.

6.5 Effet d'une pression de fluide dans les pores de la matrice

Les résultats établis jusqu'à présent ont été conduit sous l'hypothèse que la contrainte dans les pores de la matrice argileuse est nulle. Dans la suite, le cas où les pores sont remplis d'un fluide à une pression non négligeable est étudié. Dans un premier temps, la modification du critère de résistance de la matrice argileuse est exposée. Dans un second temps, l'impact de la pression dans les pores sur le critère de résistance macroscopique et l'activation des interfaces est discuté.

6.5.1 Existence d'une contrainte effective pour la résistance de la matrice

En l'absence de pression de fluide dans les pores, le domaine de résistance méso $G^m = G^m(p = 0)$ de la matrice argileuse à l'état sec obtenu par He *et al.* [51] correspond à l'ensemble des états de contrainte σ^{meso} tels qu'il existe un champ de contrainte microscopique σ défini sur

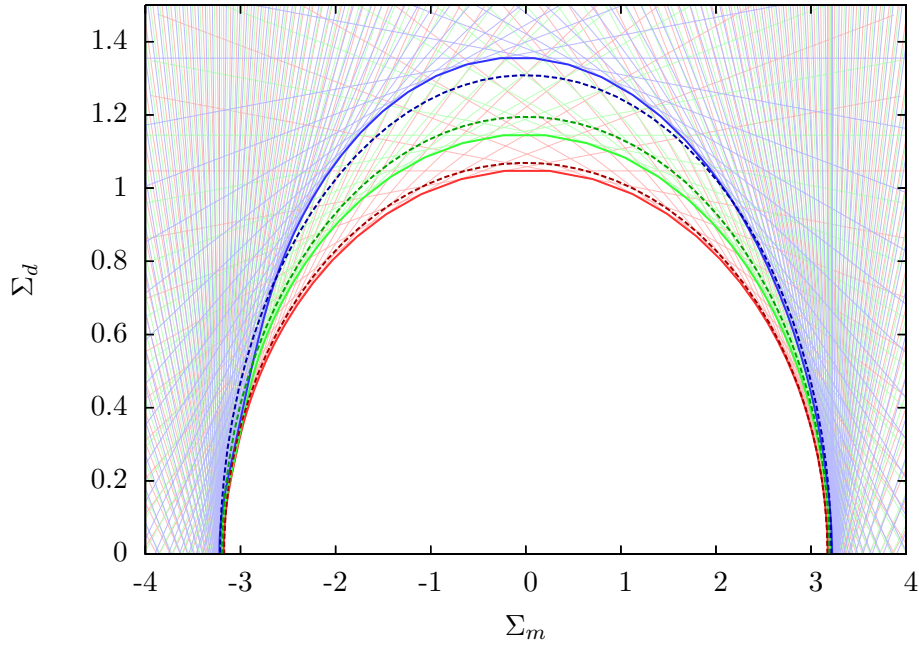


FIG. 6.10: Comparaison des critères de résistance macroscopique pour $a = 10$, $b = 1$, $\rho = 0,1$ (rouge) ; $0,3$ (vert) ou $0,5$ (bleu). Trait plein : méthode numérique du chapitre 5 sur un réseau CFC, pointillé (6.61).

un VER Ω_m de la matrice qui vérifie

$$\sigma^{\text{meso}} \in G^m = G^m(p=0) \Leftrightarrow \exists \sigma(z) \text{ tel que } \begin{cases} \operatorname{div} \sigma = 0 & (\Omega_m) \\ \sigma \text{ quelconque} & (\Omega_g) \\ \sigma = 0 & (\Omega_p) \\ \mathbf{T} = \sigma \cdot \mathbf{n} \text{ continu} & (\Gamma_g) \\ f_g(\mathbf{T}) \leq 0 & (\Gamma_g) \\ \bar{\sigma}^m = \sigma^{\text{meso}} \end{cases} \quad (6.87)$$

Lorsque les pores de la matrice sont totalement remplis par un fluide à une pression uniforme p , le domaine de résistance méso de la matrice argileuse saturée $G^m(p)$ correspond à l'ensemble des états de contrainte σ^{meso} tels qu'il existe un champ de contrainte microscopique σ défini sur un VER Ω_m de la matrice qui vérifie

$$\sigma^{\text{meso}} \in G^m(p) \Leftrightarrow \exists \sigma(z) \text{ tel que } \begin{cases} \operatorname{div} \sigma = 0 & (\Omega_m) \\ \sigma \text{ quelconque} & (\Omega_g) \\ \sigma = -p\mathbf{1} & (\Omega_p) \\ \mathbf{T} = \sigma \cdot \mathbf{n} \text{ continu} & (\Gamma_g) \\ f_g(\mathbf{T}) \leq 0 & (\Gamma_g) \\ \bar{\sigma}^m = \sigma^{\text{meso}} \end{cases} \quad (6.88)$$

Le fait que le critère d'interface entre grains $f_g(\mathbf{T})$ est un cône peut être mis à profit pour démontrer l'existence d'une contrainte effective pour le critère de résistance méso de la matrice argileuse en suivant [5, 29, 34]. Suivant ces auteurs, remarquons que le critère de Mohr-Coulomb

écrit sous la forme (6.1) vérifie

$$\forall \mathbf{T} \in \mathbb{R}^3, \forall \lambda \geq 0 \begin{cases} f_g(\mathbf{T}) \leq 0 \Rightarrow f_g(\tilde{\mathbf{T}}) \leq 0 \\ f_g(\tilde{\mathbf{T}}) = \lambda f_g(\mathbf{T}) \end{cases} \text{ avec } \tilde{\mathbf{T}} = \lambda \mathbf{T} + (1 - \lambda) h_g \mathbf{n} \quad (6.89)$$

Ainsi, sous réserve que $p > -h_g$, le choix $\lambda = 1/(1 + p/h_g)$ conduit à

$$f_g(\mathbf{T}) = \left(1 + \frac{p}{h_g}\right) f_g(\tilde{\mathbf{T}}) \text{ avec } \tilde{\mathbf{T}} = \frac{\mathbf{T} + p\mathbf{n}}{1 + p/h_g} \quad (p > h_g) \quad (6.90)$$

Supposons qu'un état de contrainte $\boldsymbol{\sigma}^{\text{meso}} \in G^m(p)$: il existe alors un champ de contrainte microscopique $\boldsymbol{\sigma}$ défini sur le VER Ω_m vérifiant les conditions de (6.88). À partir de ce champ, on peut construire le champ $\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = (\boldsymbol{\sigma} + p\mathbf{1})/(1 + p/h_g)$ qui vérifie les conditions de (6.87) pour une contrainte mésoscopique $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{meso}} = (\boldsymbol{\sigma}^{\text{meso}} + p\mathbf{1})/(1 + p/h_g)$. L'implication $\boldsymbol{\sigma}^{\text{meso}} \in G^m(p) \Rightarrow \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{meso}} \in G^m(0)$ est donc assurée. En appliquant le même raisonnement, la réciproque s'obtient aisément et l'équivalence suivante est obtenue

$$\boldsymbol{\sigma}^{\text{meso}} \in G^m(p) \Leftrightarrow \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{meso}} = \frac{\boldsymbol{\sigma}^{\text{meso}} + p\mathbf{1}}{1 + p/h_g} \in G^m(0) = G^m. \quad (6.91)$$

Ainsi, le critère de résistance mésoscopique de la matrice argileuse est régi par la contrainte effective

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{meso}} = \frac{\boldsymbol{\sigma}^{\text{meso}} + p\mathbf{1}}{1 + p/h_g} \quad (6.92)$$

Par ailleurs, l'utilisation de la contrainte effective (6.92) dans les différentes formes (6.6), (6.8), (6.11) ou (6.12) du critère de résistance homogénéisé de la matrice argileuse à l'état sec permet de montrer que la présence d'un fluide sous pression ne modifie pas la nature du critère. En particulier, dans le cas $1/3 < \phi < 1/2$, les formes (6.6) et (6.8) ne font intervenir que les trois grandeurs a , b et c définies par (6.7). Le critère de résistance méso à l'état sec peut donc se mettre sous une forme $f_m(\boldsymbol{\sigma}, p = 0, a, b, c)$. En utilisant la contrainte effective (6.92) dans ces deux formes du critère à l'état sec, on montre que le critère de résistance à l'état saturé $f_m(\boldsymbol{\sigma}, p)$ n'implique qu'une modification des grandeurs a , b et c de l'état sec :

$$f_m(\boldsymbol{\sigma}, p) = f_m(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, 0, a, b, c) = f_m(\boldsymbol{\sigma}, 0, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}) \quad (6.93)$$

avec

$$\tilde{a} = a \left(1 + \frac{p}{h_g}\right)^2 \quad ; \quad \tilde{b} = b \left(1 + \frac{p}{h_g}\right)^2 \quad ; \quad \tilde{c} = c \left(1 + \frac{p}{h_g}\right) + p \quad (6.94)$$

L'effet d'une pression de fluide sur le critère de résistance elliptique de la matrice argileuse est illustré Fig. 6.11. Pour $\phi > \phi^{\text{crit}}$ donné (resp. $1/3 < \phi < \phi^{\text{crit}}$), l'ellipse (resp. l'hyperbole) dans le plan (σ_m, σ_d) correspondant à $\partial G^m(p)$ est déduite de celle correspondant à $\partial G^m(0)$ par l'application d'une homothétie centrée en $(-c, 0)$ et de rapport $(1 + p/h_g) \geq 1$ puis d'une translation $-p(1 + c/h_g)$ suivant l'axe σ_m .

6.5.2 Résistance du matériau argileux renforcé en présence d'un fluide

Le résultat (6.93) est remarquable car il implique que tous les efforts déployés précédemment dans ce chapitre, à savoir la détermination du critère de résistance macroscopique d'un composite avec matrice suivant un critère elliptique et inclusions rigides avec effets d'interfaces, peuvent directement être appliqués pour prendre en compte l'effet d'une pression de fluide dans les pores.

En présence d'un fluide à la pression p , les critères de résistance macroscopiques se déduisent de ceux à l'état sec définis par (6.61), (6.62), (6.79) en remplaçant a , b et c par \tilde{a} , \tilde{b} et \tilde{c} selon (6.94). Cependant, il faut prendre garde que les conditions d'activation des interfaces sont aussi modifiées selon le même procédé.

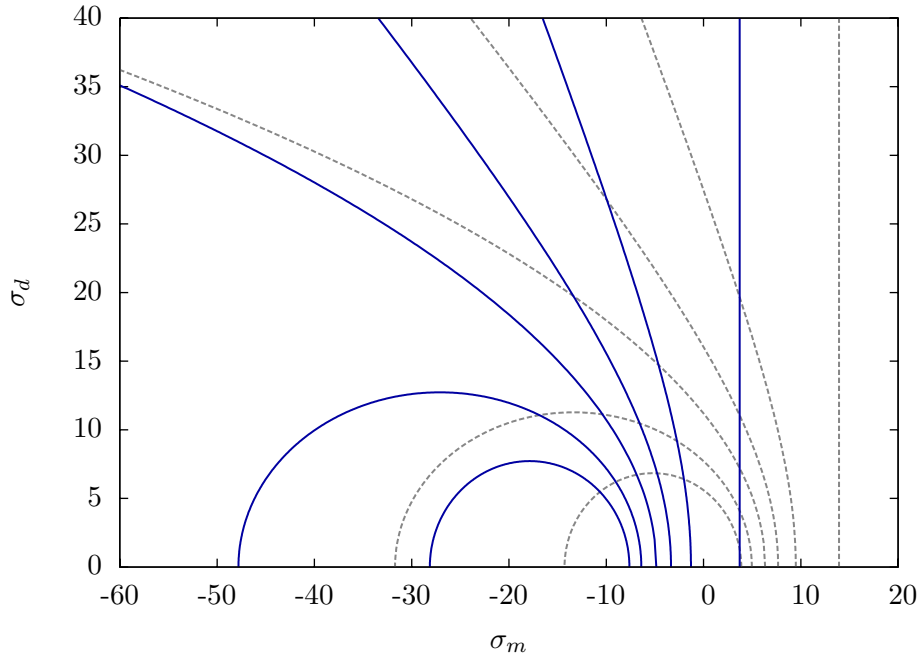


FIG. 6.11: Modification du critère de résistance de la matrice argileuse Fig. 6.2 à l'état sec (pointillé gris) en présence d'un fluide sous pression $p=12$ (trait plein bleu).

Modification des conditions d'activation des interfaces de Tresca À l'état sec, il existe au moins un état de contrainte de ∂G^{hom} telle que les interfaces de Tresca soient activées si leur résistance tangentielle $k < k_c(0)$ (6.66). À l'état saturé par un fluide sous pression, cette condition est modifiée suivant

$$k < k_c(0) \text{ devient } k < k_c(0) \left(1 + \frac{p}{h_g}\right) \quad (6.95)$$

Ainsi, en partant de l'état sec avec $k > k_c(0)$ donné, aucun état de contrainte macroscopique admissible ne peut entraîner l'activation des interfaces. Cependant, dans ce cas, il existe une pression de fluide p au delà de laquelle il existe au moins un état de contrainte de ∂G^{hom} telle que les interfaces de Tresca soit activées. Ce scénario est illustré Fig. 6.12 et 6.13.

Modification des conditions d'activation des interfaces de Mohr-Coulomb L'effet de la pression de fluide sur les conditions d'activation des interfaces de Mohr-Coulomb est plus délicat car deux effets entrent en compétition :

- Les quatre paramètres d'activation h_j ($j=1,\dots,4$) définis à l'état sec par (6.73) et (6.81) sont multipliés en présence d'une pression par $(1 + p/h_g)$:

$$\forall j \in \{1, \dots, 4\} \quad h_j \text{ devient } h_j \left(1 + \frac{p}{h_g}\right) \quad (6.96)$$

- La grandeur $h_i + c$ qui doit être comparée aux paramètres d'activation h_j est elle même augmentée de $p(1 + c/h_g)$ en présence d'un fluide sous pression.

$$h_i + c \text{ devient } h_i + c + p \left(1 + \frac{c}{h_g}\right) \quad (6.97)$$

Ainsi, les inégalités à vérifier pour l'activation des interfaces sont transformées en présence d'un fluide sous pression comme suit :

$$\forall j \in \{1, \dots, 4\} \quad h_i + c \leq h_j \text{ devient } h_i + c \leq h_j + p \frac{h_j - h_g - c}{h_g} \quad (6.98)$$

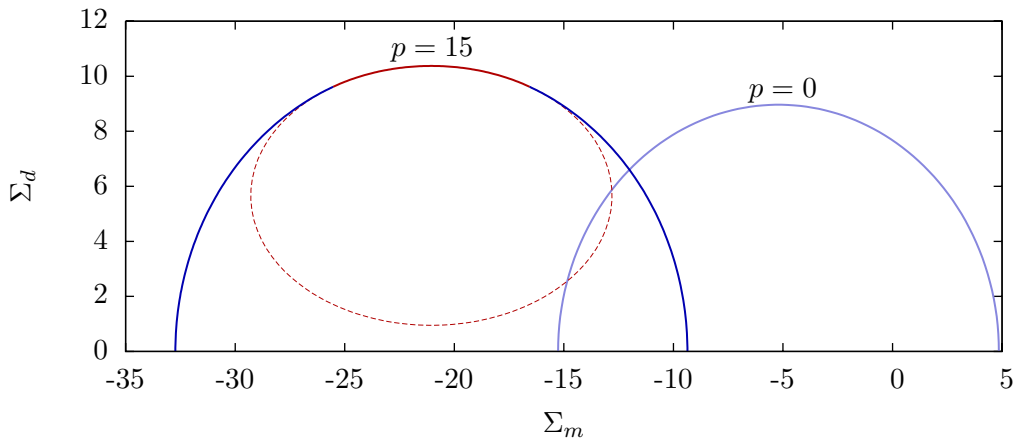


FIG. 6.12: Modification du critère de résistance macroscopique avec interfaces de Tresca en présence d'un fluide sous pression.

En particulier, si $h_3 - h_g - c > 0$ (resp. < 0), une augmentation de pression favorise (resp. défavorise) l'existence d'états de contrainte de ∂G^{hom} pour lesquels les interfaces sont activées.

Dans une logique où seules la porosité et la pression de fluide sont amenées à varier, une porosité d'activation ϕ^{act} à l'état sec peut être définie comme la porosité solution de $h_i + c = h_3$. Pour une porosité $\phi > \phi^{\text{act}}$, il n'existe pas d'état de contrainte de ∂G^{hom} pour lequel les interfaces sont activées. Pour cette porosité d'activation, $h_3 - h_g - c = h_i - h_g$ donc l'effet de la pression sur l'activation des interfaces est simplement gouverné par la différence de résistance en traction des interfaces grain-grain (micro) et matrice-inclusion (méso). Ainsi, si $h_i > h_g$, une augmentation de pression augmente la taille du domaine de porosités pour lesquelles les interfaces peuvent être activées, et réciproquement. Cette compétition entre la résistance en traction des interfaces micro et celle des interfaces méso est illustrée Fig. 6.14 et 6.15.

Ligne d'activation des interfaces Plaçons nous dans la situation où le seul paramètre microstructural amené à varier est la porosité. Le critère de résistance macroscopique, très sensible à la porosité, peut être représenté dans l'espace à trois dimensions $(\Sigma_m, \Sigma_d, \phi)$ (voir par exemple Fig. 6.13 et Fig. 6.15). Cette représentation fait apparaître une ligne de l'espace qui correspond à l'intersection de la surface engendrée par la série d'ellipses frontières de $\partial G^{\text{hom}}(\phi)$ pour les interfaces inactivées avec celle pour les interfaces activées. La projection de cette ligne dans le plan (Σ_m, Σ_d) est présentée Fig. 6.16. Un intérêt particulier pour cette ligne d'activation sera porté au chapitre 7 qui propose une relecture élasto-plastique du critère de résistance macroscopique. En effet, un trajet de chargement qui franchit la ligne d'activation va entraîner le déclenchement de glissements aux interfaces matrice-inclusion, ce qui peut résulter en une détérioration des propriétés mécaniques de ces interfaces.

À confinement élevé, l'activation des interfaces de Tresca est très peu dépendante du confinement et principalement conditionnée par la contrainte déviatorique. Au contraire, l'activation des interfaces de Mohr-Coulomb est asymptotiquement régie par une loi linéaire qui dépend du confinement. Pour ces deux cas, une certaine correspondance entre la forme mathématique de la ligne d'activation et du critère de résistance d'interface sont observées aux forts confinement. Remarquons finalement que, asymptotiquement à confinement élevé, les lignes d'activation sont quasiment indépendantes de la pression de fluide.

Augmentation de la résistance déviatorique maximale Dans le cas des interfaces de Tresca, bien que les interfaces soient plus susceptibles d'avoir une possibilité d'être activées

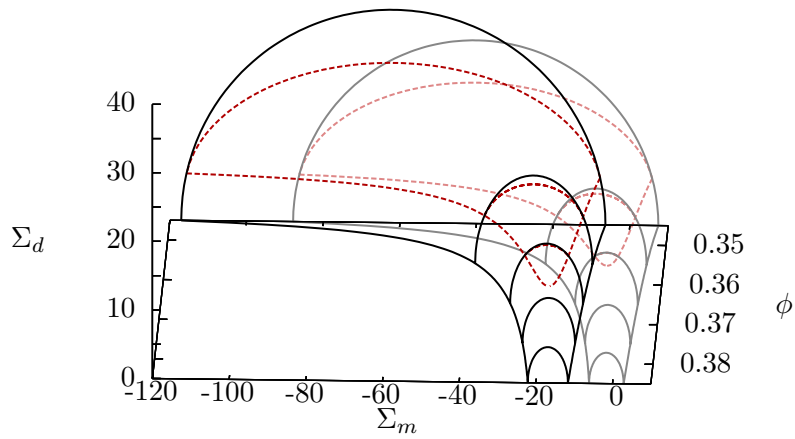
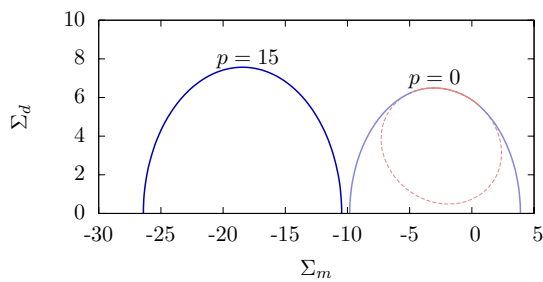
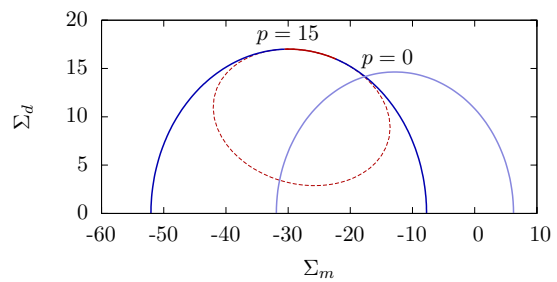


FIG. 6.13: Critère de résistance macroscopique avec interfaces de Tresca, sec (clair) ou avec fluide sous pression (foncé).

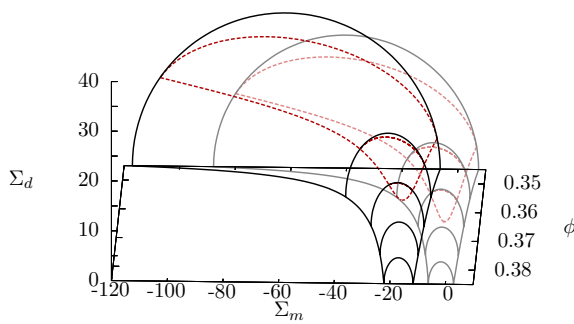


(a) $\phi=0,37$; $h_i=50 < h_g \approx 93$

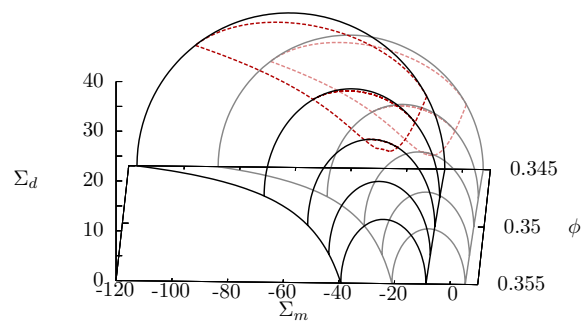


(b) $\phi=0,3502$; $h_i=120 > h_g \approx 93$

FIG. 6.14: Modification du critère de résistance macroscopique avec interfaces de Mohr-Coulomb en présence d'un fluide sous pression.



(a) $h_i = 50 < h_g \approx 93$



(b) $h_i = 120 > h_g \approx 93$

FIG. 6.15: Critère de résistance macroscopique avec interfaces de Mohr-Coulomb, sec (clair) ou avec fluide sous pression (foncé).

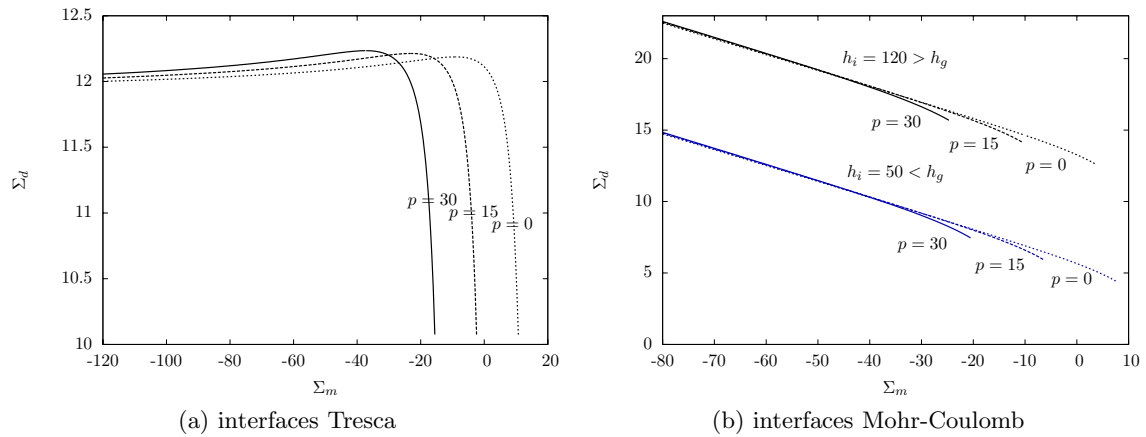


FIG. 6.16: Effet de la pression de fluide sur la ligne d'activation des interfaces.

en présence d'une pression de fluide, cette activation survient pour un niveau de contrainte déviatorique plus élevé. D'après (6.62) et (6.94), la résistance déviatorique maximale est ainsi une fonction croissante de la pression de fluide, même si les interfaces s'activent.

De même, dans le cas des interfaces de Mohr-Coulomb, on montre dans tous les cas que la résistance déviatorique maximale est aussi une fonction croissante de la pression de fluide.

Ce chapitre a présenté un modèle à trois échelles pour la description des propriétés de résistance d'une roche argileuse. Pour la transition micro-méso, les résultats de He *et al.* [51] ont été adoptés pour la matrice argileuse. Pour la transition méso-macro, la méthode sécante modifiée est utilisée avec une représentation aléatoire implicite d'un composite à matrice avec effets d'interface.

Dans le cas particulier d'interfaces parfaites entre la matrice et les inclusions, la méthode a conduit aux résultats exposés dans Shen *et al.* [90]. Nous avons ici comparé ces résultats avec deux méthodes alternatives sur des géométries explicites : le calcul à la rupture sur une sphère composite et la méthode numérique du chapitre 5 sur un réseau périodique cubique à faces centrées. Cette comparaison a permis de confirmer que la méthode sécante modifiée rend bien compte de l'allure du critère et des valeurs des résistances déviatoriques et hydrostatiques. Cependant, la méthode sécante modifiée n'a pas permis de capturer l'effet du troisième invariant observé numériquement.

Le cas général d'interfaces imparfaites régies par un critère de résistance de type Tresca ou Mohr-Coulomb fait apparaître un critère composite et la notion d'activation des mécanismes d'interfaces. L'activation des interfaces est gouvernée par le taux de triaxialité du taux de déformation macroscopique. L'activation des interfaces a pour effet de réduire la résistance déviatorique en comparaison avec le cas des interfaces parfaites. Cependant, la résistance en compression isotrope reste inchangée car les interfaces ne sont pas activées. En traction isotrope, les interfaces de Tresca ne sont pas activées mais celles de Mohr-Coulomb peuvent l'être conditionnellement.

Lorsque qu'un fluide sature totalement l'espace poreux, la prise en compte de la pression de fluide est immédiate grâce à l'existence d'une contrainte effective pour la résistance. Une pression dans les pores modifie les conditions d'activation des interfaces.

* *

*

Troisième partie

Plasticité

Chapitre 7

Plasticité

Résumé : *L'objet de ce chapitre est de proposer une interprétation en plasticité des critères de résistance ductile obtenus dans le chapitre 6. L'objectif est de proposer des mécanismes permettant de rendre compte de deux observations courantes sur les matériaux granulaires (lors d'un essai triaxial) : d'une part, la présence d'un pic de contraintes suivi d'un plateau (état critique); d'autre part, le changement de signe de la déformation volumique. Le mécanisme proposé pour rendre compte du changement de signe de la déformation volumique, situé à l'échelle micro (grains et pores), est une compétition entre une variation de porosité et une dilatation des interfaces. La notion d'état critique est obtenue en proposant un écrouissage de la matrice argileuse par changement de porosité. Le mécanisme proposé pour la description d'un pic de contraintes, situé à l'échelle méso, est un adoucissement des propriétés d'interfaces entre les inclusions et la matrice. Le pic de contrainte résulte de la compétition entre un écrouissage positif par réduction de porosité et un écrouissage négatif par détérioration des propriétés d'interfaces matrice-inclusion.*

Sommaire

7.1	Présentation du matériau à trois échelles	175
7.1.1	Morphologie	175
7.1.2	Constituants	175
7.2	Elasto-plasticité de la matrice argileuse	176
7.2.1	Élasticité de la matrice	176
7.2.2	Plasticité de la matrice	176
7.2.3	Bilan de variation de volume micro	178
7.2.4	État critique et écoulement plastique libre de la matrice	178
7.2.5	Simulations élasto-plastiques	180
7.3	Élasto-plasticité du matériau renforcé	183
7.3.1	Élasticité du matériau renforcé	183
7.3.2	Plasticité du matériau renforcé	183
7.3.3	Écrouissage par dégradation des propriétés d'interfaces	186
7.3.4	Bilan de variation de volume méso	186
7.3.5	État critique et écoulement plastique libre du matériau renforcé	187
7.3.6	Simulations élasto-plastiques	189

Ce chapitre cherche à mettre à profit l'analogie entre l'analyse limite en élasto-plasticité et le calcul à la rupture pour proposer une modélisation du comportement élasto-plastique de matériaux granulaires et argileux. Pour éviter les confusions entre ces deux disciplines, précisons la terminologie. En calcul à la rupture, les capacités de résistance locales peuvent être décrites par une fonction critère de résistance. Pour une direction de chargement donnée, la charge extrême supportable par la structure est déterminée par l'identification d'un mécanisme de ruine optimal. En élasto-plasticité, la limite d'élasticité correspond à l'initiation de la plasticité et est atteinte suite à une évolution élastique. La limite d'élasticité est décrite par un critère de plasticité (ou fonction de charge plastique). La limite d'élasticité ne doit pas être confondue avec la charge limite qui est atteinte à l'écoulement plastique libre de la structure. Formellement, dans le cas où la fonction de charge plastique d'un problème élasto-plastique est identique en tout point au critère de résistance d'un problème de calcul à la rupture, le mécanisme de ruine optimal qui conduit à la détermination de la charge extrême correspond au mécanisme d'écoulement plastique libre : il s'agit de l'analogie que nous souhaitons mettre à profit.

Par ailleurs, un matériau élasto-plastique peut subir un écoulement, c'est à dire une modification de sa limite d'élasticité et de sa fonction de charge plastique. L'écrouissage du matériau peut avoir deux origines micro-structurales : un écoulement par énergie bloquée ou un écoulement par changement de géométrie.

Pour fixer les idées, prenons l'exemple d'un matériau poreux modèle comme une sphère composite constituée d'une couronne de matériau élasto-plastique isotrope uniforme entourant un pore sphérique [8]. Lorsque ce matériau est soumis à une pression extérieure p , l'évolution est élastique jusqu'à la pression p_1 pour laquelle les contraintes à la frontière du pore atteignent la limite d'élasticité. Une augmentation supplémentaire de la pression à une valeur p_2 entraîne la déformation plastique d'une couronne dont l'étendue croît à partir du pore. Dès lors, une partie de l'énergie élastique est bloquée car si le matériau est déchargé, des contraintes résiduelles subsistent pour assurer la compatibilité géométrique. Le matériau peut ensuite être rechargé jusqu'à la pression $p_2 > p_1$ sans entraîner de déformation plastique supplémentaire : c'est une manifestation de l'écrouissage par énergie bloquée. La pression extérieure peut ensuite être augmentée jusqu'à la valeur p_3 telle que la couronne plastifiée atteigne l'extérieur de la sphère composite. Si on raisonne à géométrie fixée, le matériau ne peut supporter de pression supérieure à p_3 car l'écoulement plastique libre est atteint. En revanche, la prise en compte du changement de géométrie qui conduit à la fermeture progressive du pore permet d'atteindre des pressions supérieures à p_3 : c'est une manifestation de l'écrouissage par changement de géométrie. Pour ce modèle, le changement de géométrie permet de rendre compte d'un écoulement beaucoup plus important que l'énergie bloquée [8]. Cependant, il faut considérer des changements de porosité très importants. Au contraire, les expériences sur les matériaux argileux montrent qu'une modification mineure de la porosité peut induire une évolution majeure de l'écrouissage [2, 88].

L'approche heuristique que nous proposons pour la modélisation du comportement élasto-plastique de matériaux argileux est la suivante. La description de la microstructure à trois échelles présentée au chapitre 6 est adoptée. Dans un premier temps, on se focalise sur le comportement de la matrice argileuse à l'échelle méso. Les mécanismes de ruine identifiés par He *et al.* [51] sont adoptés comme mécanismes d'écoulement plastique libre. Or les critères de résistances obtenus par He *et al.* [51] s'avèrent extrêmement sensibles à la porosité de la matrice argileuse. On propose donc de rendre compte d'un écoulement par changement de géométrie de la microstructure. Lors d'un incrément infinitésimal de charge, la porosité est actualisée d'après le mécanisme d'écoulement plastique libre. Cela revient à supposer que sur une configuration actuelle, le comportement est élastique parfaitement plastique. En particulier, l'écrouissage de la microstructure par énergie bloquée est négligé.

Dans un second temps, on remonte au comportement élasto-plastique du matériau argileux renforcé par des inclusions avec interfaces imparfaites. La stratégie adoptée est la même qu'à

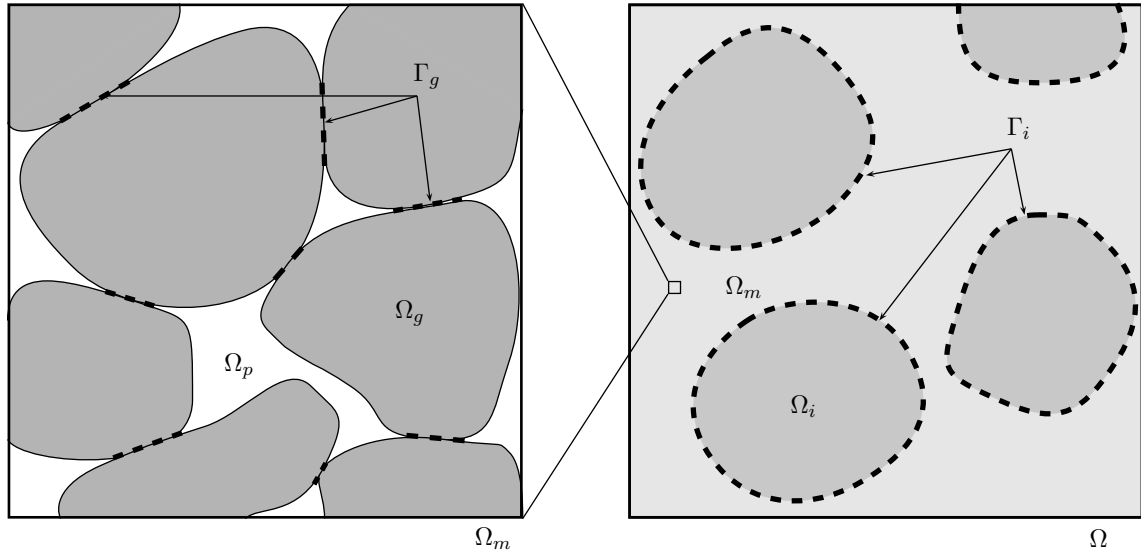


FIG. 7.1: Description du matériau aux échelles micro (gauche) et méso (droite).

l'échelle inférieure. Cependant, on suppose en outre la dégradation des propriétés des interfaces par une loi pilotée par le saut de déplacement tangentiel à l'interface entre matrice et inclusions.

7.1 Présentation du matériau à trois échelles

7.1.1 Morphologie

On considère le matériau à trois échelles appelées micro, méso et macro du chapitre 6 décrit Fig. 7.1. À l'échelle "micro", un volume élémentaire représentatif (VER) Ω_m de ce qui constitue la matrice de l'échelle "méso" est considéré. La matrice est constituée d'un assemblage de grains rigides occupant le domaine Ω_g et d'un espace poreux. L'espace poreux entre les grains occupe le domaine Ω_p , de fraction volumique appelée porosité $\phi = |\Omega_p|/|\Omega_m|$. Les grains sont jointifs et on note Γ_g l'union de toutes les interfaces entre grains. La surface spécifique des interfaces entre grains, homogène à l'inverse d'une longueur, est notée $\gamma_g = |\Gamma_g|/|\Omega_m|$. Dans tout le chapitre, on utilisera abusivement l'appellation "matrice" pour cet assemblage granulaire.

À l'échelle "méso", un VER Ω appelé matériau renforcé est considéré. Le matériau renforcé est constitué de la matrice qui occupe le domaine Ω_m et d'inclusions. Les inclusions occupent le domaine Ω_i , de fraction volumique $\rho = |\Omega_i|/|\Omega|$. L'union de toutes les interfaces entre inclusions et matrice est notée Γ_i . La surface spécifique des interfaces entre inclusions et matrice est notée $\gamma_i = |\Gamma_i|/|\Omega|$.

7.1.2 Constituants

Les interfaces entre grains microscopiques sont imparfaites, sujettes à des frottements régis par un critère de plasticité de type Mohr-Coulomb (6.1) sur le vecteur contrainte \mathbf{T} appliqué à l'interface. Les glissements entre les grains sont décrits par un saut de déplacement $[[\boldsymbol{\xi}]]$ ou de vitesse $[[\mathbf{v}]]$. De même, les interfaces entre inclusions mésoscopiques et matrice sont imparfaites. Deux types de critères de plasticité d'interface sont considérés à l'échelle méso : soit un critère de Tresca (6.15), soit un critère de Mohr-Coulomb (6.16).

7.2 Elasto-plasticité de la matrice argileuse

À l'échelle mésoscopique, le taux de déformation moyen dans la matrice est dû à deux origines, élastique et plastique, et noté $\mathbf{d} = \mathbf{d}^e + \mathbf{d}^p$. La contrainte méso dans la matrice est notée $\boldsymbol{\sigma}$. À l'échelle micro, les sauts de vitesse tangentielle et normale aux interfaces entre grains sont notés respectivement $[[v_t]]$ et $[[v_n]]$. Le comportement méso de la matrice provient d'une homogénéisation micro-méso de l'assemblage de grains interfacés.

7.2.1 Élasticité de la matrice

Un modèle simplifié est proposé pour rendre compte du comportement élastique de la matrice ¹. Dans un souci de simplification, les grains micro sont supposés rigides, de raideur infinie. Les pores ont une raideur nulle et l'élasticité de la matrice provient de celle des interfaces entre grains. Le saut de déplacement élastique $[[\boldsymbol{\xi}]]^e$ à travers l'interface est relié au vecteur contrainte $\mathbf{T} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ appliqué à l'interface, de normale \mathbf{n} par la raideur d'interface \mathbf{K}^g telle que $\mathbf{T} = \mathbf{K}^g \cdot [[\boldsymbol{\xi}]]^e$. La raideur d'interface entre grains se décompose en $\mathbf{K}^g = K_n^g \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + K_t^g (\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})$ où K_n^g et K_t^g désignent respectivement les raideurs d'interface normale et tangentielle. La raideur d'interface normale K_n^g est supposée infinie, ce qui entraîne l'absence de contribution élastique au saut de vitesse normal à travers les interfaces.

Les grains sont supposés sphériques de rayon r_0 . Le tenseur de raideur homogénéisé de la matrice est isotrope et se met sous la forme $\mathbb{C}_m = 3k_m \mathbb{J} + 2\mu_m \mathbb{K}$. Dans le régime de porosité $1/3 < \phi < 1/2$, les modules isotropes d'élasticité homogénéisés de la matrice sont [51]

$$k_m = r_0 K_t^g \mathcal{K} \quad ; \quad \mu_m = r_0 K_t^g \mathcal{M}, \quad (7.1)$$

avec les modules normalisés \mathcal{M} et \mathcal{K} donnés (6.4).

7.2.2 Plasticité de la matrice

On se place dans le cas de grains rigides et d'interfaces entre grains régies par un critère de plasticité de Mohr-Coulomb (6.1) avec règle d'écoulement plastique associée. On note h_g la résistance en traction isotrope des interfaces entre grains et α_g l'angle de frottement. Le critère de rupture de la matrice argileuse présenté par He *et al.* [51] est ici interprété comme un critère de plasticité.

Dans le régime de porosité $1/3 < \phi < 1/2$, le comportement plastique homogénéisé dépend du paramètre adimensionnel δ défini en (6.5). Lorsque $\delta < 1$, le domaine de plasticité de la matrice est délimité par une ellipse dans le plan (σ_m, σ_d) décrite par la fonction de charge plastique f (6.6) :

$$f(\boldsymbol{\sigma}, \phi) = \frac{(\sigma_m + c(\phi))^2}{a(\phi)} + \frac{\sigma_d^2}{b(\phi)} - 1 \leq 0 \quad (7.2)$$

ou a , b et c donnés en (6.7) sont très sensibles à la porosité ϕ lorsqu'elle est proche de la porosité critique ϕ^{crit} définie en (6.10).

À partir d'un état de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ de la matrice, on applique un incrément de contrainte infinitésimal $d\boldsymbol{\sigma}$. Si l'état de contrainte est à l'intérieur du domaine d'élasticité ($f(\boldsymbol{\sigma}, \phi) < 0$), l'évolution est élastique. Si l'état de contrainte est sur la frontière du domaine d'élasticité ($f(\boldsymbol{\sigma}, \phi) = 0$) et que l'incrément de contrainte est dirigé vers l'intérieur de ce domaine ($\partial f(\boldsymbol{\sigma}, \phi) / \partial \boldsymbol{\sigma} : d\boldsymbol{\sigma} \leq 0$), l'évolution est élastique. Dans ces deux cas, l'incrément de contrainte n'entraîne pas de déformation plastique. En revanche, le cas où l'état de contrainte est sur la frontière du domaine d'élasticité ($f(\boldsymbol{\sigma}, \phi) = 0$) et l'incrément de contraintes est dirigé vers l'extérieur de ce domaine ($\partial f(\boldsymbol{\sigma}, \phi) / \partial \boldsymbol{\sigma} : d\boldsymbol{\sigma} > 0$) correspond à une charge plastique.

¹Ce modèle est bien entendu insuffisant pour rendre compte de l'élasticité d'un matériau argileux : l'intérêt véritable de ce chapitre est la modélisation de la plasticité.

En phase de charge plastique, le principe du travail plastique maximal énoncé par Hill (1950) conduit à la règle de normalité : le taux de déformation plastique est orienté selon la normale extérieure au domaine d'élasticité. Comme la surface de la limite d'élasticité ne présente ici pas de point anguleux, il existe un scalaire $\dot{\Lambda}_m > 0$ appelé multiplicateur plastique de la matrice tel que

$$\mathbf{d}^p = \dot{\Lambda}_m \frac{\partial f(\boldsymbol{\sigma}, \phi)}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \Rightarrow d_v^p = \dot{\Lambda}_m \frac{2(\sigma_m + c)}{a} \quad ; \quad d_d^p = \dot{\Lambda}_m \frac{2\sigma_d}{b}. \quad (7.3)$$

La direction du taux de déformation plastique de la matrice $\beta_m = d_v^p/d_d^p$ se déduit alors de l'état de contrainte dans la matrice par

$$\beta_m = \frac{d_v^p}{d_d^p} = \frac{(\sigma_m + c)b}{\sigma_d a}. \quad (7.4)$$

La condition de continuité du comportement entre le cas de la décharge élastique et celui de la charge plastique, combinée à la règle de normalité, permet d'écrire alternativement la règle de normalité (7.3) :

$$\mathbf{d}^p = \frac{1}{m(\boldsymbol{\sigma}, \phi)} \left(\frac{\partial f(\boldsymbol{\sigma}, \phi)}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \dot{\boldsymbol{\sigma}} \right) \frac{\partial f(\boldsymbol{\sigma}, \phi)}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \quad (7.5)$$

où $m(\boldsymbol{\sigma}, \phi)$ est un paramètre strictement positif. On peut aussi définir un tenseur de souplesse d'écoulement \mathbf{S} tel que $\mathbf{d}^p = \mathbf{S} : \dot{\boldsymbol{\sigma}}$ par :

$$\mathbf{S} = \frac{1}{m(\boldsymbol{\sigma}, \phi)} \frac{\partial f(\boldsymbol{\sigma}, \phi)}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \otimes \frac{\partial f(\boldsymbol{\sigma}, \phi)}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \quad (7.6)$$

Lorsque le paramètre $m(\boldsymbol{\sigma}, \phi)$ s'annule, la matrice ne peut plus supporter d'incrément de charge plastique. La contrainte atteint un état critique, tandis que le taux de déformation plastique est non nul mais indéterminé : c'est l'écoulement plastique libre de la microstructure de la matrice argileuse.

Dans la suite, on cherche à caractériser ces états critiques et le déclenchement de l'écoulement plastique libre. Tout d'abord, procédons à une localisation du mécanisme d'écoulement plastique microscopique à l'aide du mécanisme de ruine proposé par He *et al.* [51]. Pour ce mécanisme de ruine, le saut de vitesse normal plastique moyen des interfaces entre grains s'exprime en fonction du taux de déformation volumique plastique moyen de la matrice sous la forme

$$\gamma_g \overline{[v_n]^p}^{\Gamma_g} = v(\beta_m) d_v^p. \quad (7.7)$$

où la fonction $v(\beta_m)$ se déduit des travaux de [51] :

$$v(\beta_m) = \frac{\delta \lambda}{1 - \delta} \left(\frac{\sqrt{\beta_m^2 + 2(1 - \delta)\mathcal{M}/\mathcal{K}}}{\sqrt{\delta}\beta_m} - 1 \right), \quad (7.8)$$

avec \mathcal{M} et \mathcal{K} donnés par (6.4), λ par (6.3), δ par (6.5), β_m par (7.4) et γ_g par (6.2). Remarquons que dans la limite d'un écoulement plastique purement déviatorique ($\beta_m \rightarrow 0$), le saut de vitesse prend la valeur finie

$$\lim_{\beta_m \rightarrow 0} \frac{[v_n]^p}{r_0} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2\delta\mathcal{M}}{(1 - \delta)\mathcal{K}}} d_d^p = \frac{2\sqrt{b}}{3h_g\lambda} d_d^p. \quad (7.9)$$

Il reste maintenant à relier la variation de porosité au taux de déformation volumique de la matrice.

7.2.3 Bilan de variation de volume micro

À l'échelle micro, la variation du volume de la matrice, égale au flux du vecteur vitesse à travers la frontière du VER Ω_m , peut se décomposer en trois contributions. Précisons tout d'abord quelques notations. On rappelle que d_v est la trace taux de déformation de la matrice et est considéré comme une grandeur "macro" à cette échelle. La frontière du VER Ω_m en contact avec un grain i est notée $(\partial\Omega_m)_i$. La frontière d'un grain i en contact avec l'espace poreux est notée $(\partial\Omega_g^i)_p$, celle en contact avec un grain voisin j est notée $(\partial\Omega_g^i)_j$. La normale à $(\partial\Omega_g^i)_p$ orientée du grain i vers l'espace poreux est $\mathbf{n}_{i \rightarrow p}$, celle à $(\partial\Omega_g^i)_j$ orientée du grain i vers le grain j est $\mathbf{n}_{i \rightarrow j}$. L'interface commune à deux grains i et j voisins est notée Γ_{ij} , de sorte que pour la paire i, j $\int_{(\partial\Omega_g^i)_j} v_{n_{i \rightarrow j}} dS + \int_{(\partial\Omega_g^j)_i} v_{n_{j \rightarrow i}} dS = \int_{\Gamma_{ij}} \llbracket v_n \rrbracket dS$ ². Le bilan de variation de volume de la matrice se décompose donc en :

$$\begin{aligned}
|\dot{\Omega}_m| &= \int_{\partial\Omega_m} v_n dS \\
&= \left[\sum_{\text{grains } i} \left(\int_{(\partial\Omega_m)_i} v_n dS + \int_{(\partial\Omega_g^i)_p} v_{n_{i \rightarrow p}} dS + \sum_{\text{voisins de } i} \sum_{\text{grains } j} \int_{(\partial\Omega_g^i)_j} v_{n_{i \rightarrow j}} dS \right) \right] \\
&\quad + \left[\int_{\partial\Omega_p} v_n dS \right] - \left[\sum_{\text{grains } i} \sum_{\text{voisins de } i} \sum_{\text{grains } j} \int_{(\partial\Omega_g^i)_j} v_{n_{i \rightarrow j}} dS \right] \\
&= \sum_{\text{grains } i} |\dot{\Omega}_g^i| + |\dot{\Omega}_p| + \sum_{\text{paires } i,j} \int_{\Gamma_{ij}} \llbracket v_n \rrbracket dS.
\end{aligned} \tag{7.10}$$

La première contribution est la variation de volume des grains, $|\dot{\Omega}_g|/|\Omega_m| = \overline{d_v^{\Omega_g}} |\Omega_g|/|\Omega_m| = (1 - \phi) \overline{d_v^{\Omega_g}}$. La deuxième contribution est la variation de volume de l'espace poreux $|\dot{\Omega}_p| = \dot{\phi} |\Omega_m| + \phi |\dot{\Omega}_m|$. La troisième contribution est due à la dilatance des interfaces entre grains. Elle s'exprime en fonction du saut de vitesse normal moyen aux interfaces en reconnaissant :

$$\sum_{\text{paires } i,j} \int_{\Gamma_{ij}} \llbracket v_n \rrbracket dS = \int_{\Gamma_g} \llbracket v_n \rrbracket dS = |\Gamma_g| \overline{\llbracket v_n \rrbracket}^{\Gamma_g}. \tag{7.11}$$

En divisant par le volume total de la matrice et en se rappelant les définitions $d_v = |\dot{\Omega}_m|/|\Omega_m|$, $d_v^g = \overline{d_v^{\Omega_g}} = |\dot{\Omega}_g|/|\Omega_g|$ et $\gamma_g = |\Gamma_g|/|\Omega_m|$, le bilan microscopique de conservation de volume est

$$(1 - \phi) d_v = (1 - \phi) d_v^g + \dot{\phi} + \gamma_g \overline{\llbracket v_n \rrbracket}^{\Gamma_g} \tag{7.12}$$

Le bilan (7.12) s'interprète comme une relation cinématique micro-méso qui généralise la règle de moyenne habituelle $\mathbf{D} = \overline{\mathbf{d}}$. Pour simplifier les notations, on notera dans la suite $\llbracket \mathbf{v} \rrbracket$ le saut de déplacement moyen $\overline{\llbracket \mathbf{v} \rrbracket}^{\Gamma_g}$ aux interfaces entre grains micro. Par ailleurs, les grains sont supposés rigides donc d_v^g est nul.

7.2.4 État critique et écoulement plastique libre de la matrice

Écoulement plastique libre de la matrice

La porosité de la matrice est prise comme paramètre d'écoulement. Comme en phase de charge plastique le critère de plasticité est vérifié à tout instant, la variation de contrainte est

²Une ambiguïté peut sembler résider dans l'orientation de la normale pour le signe de la vitesse normale entre deux grains. Toutefois, comme on s'intéresse à une différence entre la vitesse normale orientée du grain i vers j comptée sur le grain i et celle comptée sur le grain j , ou réciproquement, l'orientation n'intervient plus. Par exemple, si les deux grains se rapprochent, $\llbracket v_n \rrbracket$ sera négatif que l'on oriente la normale de i vers j ou de j vers i .

liée à l'écroûissage par changement de porosité par

$$\frac{d f(\boldsymbol{\sigma}, \phi)}{d t} = \frac{\partial f(\boldsymbol{\sigma}, \phi)}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{\partial f(\boldsymbol{\sigma}, \phi)}{\partial \phi} \dot{\phi} = 0 \text{ si } \frac{\partial f(\boldsymbol{\sigma}, \phi)}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \dot{\boldsymbol{\sigma}} > 0. \quad (7.13)$$

Explicitons maintenant la condition pour qu'un écoulement plastique libre de la matrice ait lieu. La variation de volume peut se mettre sous la forme :

$$\dot{\phi} - (1 - \phi)d_v^e = (1 - \phi - v(\beta_m)) d_v^p. \quad (7.14)$$

On peut raisonnablement supposer qu'en phase de charge plastique la déformation volumique élastique est négligeable devant la déformation volumique plastique. Ceci est cohérent avec notre approche heuristique selon laquelle l'écroûissage est lié à un changement de géométrie (modification de porosité) plutôt que par énergie bloquée.

Le paramètre $m(\boldsymbol{\sigma}, \phi)$ de la matrice se déduit alors de la règle d'écoulement (7.5), du bilan de variation de volume (7.14) et de (7.13) comme :

$$m(\boldsymbol{\sigma}, \phi) = (v(\beta_m) - (1 - \phi)) \operatorname{tr} \left(\frac{\partial f(\boldsymbol{\sigma}, \phi)}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \right) \frac{\partial f(\boldsymbol{\sigma}, \phi)}{\partial \phi} \quad (7.15)$$

En phase de charge plastique, le paramètre $m(\boldsymbol{\sigma}, \phi)$ de la matrice et donc le tenseur de modules d'écroûissage s'annule lorsque $v(\beta_m) = 1 - \phi$. Il existe donc un taux de triaxialité critique du taux de déformation plastique de la matrice, solution de $v(\beta_m) = 1 - \phi$ pour lequel l'écoulement plastique libre a lieu :

$$\beta_m^c(\phi) = \lambda \sqrt{\frac{2\mathcal{M}\delta}{\mathcal{K}((1 - \phi)^2 - (1 - \phi - \lambda)^2\delta)}}. \quad (7.16)$$

Lorsque $\beta_m = \beta_m^c$, l'écoulement plastique libre est atteint (hormis si $\dot{\phi} = (1 - \phi)d_v^e$ si l'on ne néglige pas le taux de déformation élastique) et le multiplicateur plastique de la matrice devient infini.

Revenons un instant sur le cas particulier $d_v^p = 0$. Le bilan de variation de volume dégénère en $\dot{\phi} - (1 - \phi)d_v^e = -(\sqrt{b}/h_g)d_d^p$. Il ne peut y avoir déclenchement de la plasticité que si $\dot{\phi} < (1 - \phi)d_v^e$. Le multiplicateur plastique de la matrice prend alors la valeur finie $\dot{\Lambda}_m = -(h_g\sqrt{b})/(2\sigma_d)(\dot{\phi} - (1 - \phi)d_v^e)$ et l'écoulement plastique libre n'a pas lieu. Ainsi, bien que la matrice ne change pas de volume, la porosité peut diminuer : la variation de volume due au changement de porosité est exactement compensée par la dilatance des interfaces.

D'une manière plus générale, en phase de charge plastique, l'évolution de la porosité est contrôlée par le taux de triaxialité β_m du taux de déformation plastique la matrice d'après (7.14). Dans le cas usuel $d^e \ll d^p$, le bilan de variation de volume de la matrice conduit à $\dot{\phi} \approx (1 - \phi - v(\beta_m))d_v^p$, qui est négatif pour $\beta_m < \beta_m^c$ et positif pour $\beta_m > \beta_m^c$, où β_m^c défini par (7.16) est le taux de triaxialité critique de la matrice conduisant à l'écoulement plastique libre.

Ainsi, l'évolution de la porosité n'est pas contrôlée par le signe du taux de triaxialité du taux de déformation de la matrice β_m , mais par le signe de $\beta_m - \beta_m^c$. La porosité peut diminuer alors que le matériau se dilate macroscopiquement : la dilatation provient alors des interfaces entre grains, par la règle de normalité pour le critère de Mohr-Coulomb. Si $\beta_m = \beta_m^c$, la porosité n'évolue pas : l'écoulement plastique libre est atteint car il n'y a pas d'écroûissage. Ce phénomène renvoie à la notion d'état critique traditionnellement introduite en mécanique des sols [2, 88].

Ligne d'état critique

Explicitons maintenant les états critiques de contraintes et de porosité pour lesquels l'écoulement plastique libre a lieu. Ces états critiques se situent sur la frontière du domaine d'élasticité et vérifient donc $f(\boldsymbol{\sigma}, \phi) = 0$. Par ailleurs, ils correspondent à un taux de triaxialité

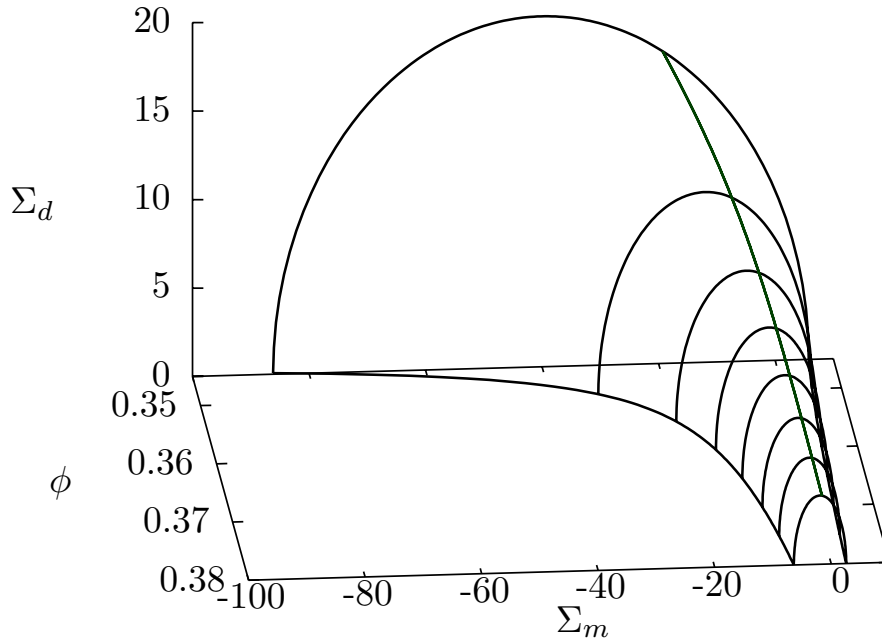


FIG. 7.2: Évolution du critère de plasticité de la matrice en fonction de la porosité ϕ . La ligne en vert foncé est la ligne d'état critique (7.17) : états pour lesquels a lieu l'écoulement plastique libre.

critique (7.16) du taux de déformation de la matrice. D'après la règle de normalité (7.4), ces états vérifient donc $\beta_m^c(\phi) = b(\sigma_m + c)/(a\sigma_d)$. La combinaison de ces deux relations permet d'établir l'équation paramétrique d'une *ligne d'état critique* dans l'espace $(\sigma_m, \sigma_d, \phi)$:

$$\sigma_d(\phi) = \sqrt{\frac{b(\phi)}{1 + [\beta_m^c(\phi)]^2 a(\phi)/b(\phi)}} \quad ; \quad \sigma_m(\phi) = -c(\phi) + \beta_m^c(\phi) \frac{a(\phi)}{b(\phi)} \sqrt{\frac{b(\phi)}{1 + [\beta_m^c(\phi)]^2 a(\phi)/b(\phi)}} \quad (7.17)$$

La ligne d'état critique est représentée Fig. 7.2 dans l'espace $(\sigma_m, \sigma_d, \phi)$.

7.2.5 Simulations élasto-plastiques

Trajet de chargement Deux types de trajets de chargement réalisables en cellule d'essai triaxiale ont été étudiés. Dans les deux cas, la contrainte moyenne est diminuée dans un premier temps à partir de l'état libre de contrainte jusqu'à la contrainte σ_m^0 à l'intérieur du domaine d'élasticité initial (compression à déviateur nul). Dans un second temps, un déviateur de contrainte est imposé par l'application d'une contrainte axiale compressive supplémentaire à l'aide d'un piston. Pour cette étape, deux possibilités sont étudiées :

- *trajet "triaxial"* : la contrainte latérale est maintenue constante, de sorte que les variations des contraintes moyenne et déviatorique sont proportionnelles.
- *trajet à "contrainte moyenne constante"* : à mesure que la compression axiale est augmentée, la compression latérale est diminuée de telle sorte que la contrainte moyenne reste constante au cours de l'essai.

Notons σ_m^N la limite d'élasticité en compression isotrope initiale. Si $\sigma_m^0 = \sigma_m^N$, l'essai est dit réalisé à l'état *normalement consolidé*. Si $|\sigma_m^0| < |\sigma_m^N|$, l'état est dit *sur-consolidé*. Dans la suite, nous serons amenés à distinguer les états faiblement sur-consolidés ("wetter than critical") des

états fortement sur-consolidés (“dryer than critical”). L’algorithme utilisé pour les simulations élasto-plastiques est détaillé en annexe G, section G.1.

Deux types d’évolution élasto-plastique Si l’on suit un trajet de chargement tel que la limite d’élasticité initiale soit atteinte en un point dont la normale a un taux de triaxialité $\beta_m < \beta_m^c$, la porosité diminue. La matrice subit un écrouissage positif et β_m augmente jusqu’à ce que $\beta_m = \beta_m^c$: l’état de contrainte et de porosité se bloque à l’état critique et l’écoulement plastique libre est atteint. Cette situation correspond aux états normalement consolidés ou faiblement sur-consolidés.

Au contraire, si la limite d’élasticité initiale est atteinte en un point dont la normale a un taux de triaxialité $\beta_m > \beta_m^c$, la porosité augmente. La matrice subit un écrouissage négatif et β_m diminue jusqu’à ce que $\beta_m = \beta_m^c$: l’état de contrainte et de porosité se bloque à l’état critique et l’écoulement plastique libre a lieu. Cette situation correspond aux états fortement sur-consolidés³. Elle se caractérise par la présence d’un pic des contraintes associé à l’augmentation de porosité après atteinte de la limite d’élasticité.

Ces deux situations sont très différentes puisque dans le premier cas la porosité diminue et la contrainte déviatorique peut augmenter, dans le second la porosité augmente et la contrainte déviatorique doit diminuer.

La Fig. 7.3a illustre un chargement à contrainte moyenne constante en conditions normalement consolidées. Le volume de l’échantillon commence par diminuer par accommodation de la porosité, ce qui entraîne un écrouissage positif. Puis, à déviateur de contrainte croissant, la diminution de porosité entre progressivement en compétition avec la dilatation des interfaces. Lorsque l’état de contrainte est en haut de l’ellipse (c.f. Fig. 7.3b), la règle de normalité indique que le taux de déformation plastique est purement déviatorique : la diminution de porosité est exactement compensée par la dilatation des interfaces. En ce point, le multiplicateur plastique est fini donc l’écoulement plastique libre n’a pas lieu et l’écrouissage continue. Au delà de ce point, le volume de l’échantillon augmente car la porosité diminue moins que les interfaces ne se dilatent. Sous certaines conditions sur l’angle de frottement, l’état critique peut ensuite être atteint et l’écoulement plastique libre se déclenche.

Concordance avec les notions empiriques de mécanique des sols Le modèle élasto-plastique de la matrice argileuse présenté dans cette section est séduisant puisqu’il permet de rendre compte par une approche micro-mécanique de concepts classiquement introduits en mécanique des sols par des approches empiriques (voir Atkinson [2], Schofield et Wroth [88]). Ainsi, la notion de *surface d’état* est retrouvée Fig. 7.2 : il faut concevoir la surface de charge plastique dans l’espace (σ, ϕ) . Sous l’action d’un chargement mécanique, les contraintes et la porosité évoluent jusqu’à un *état critique* défini par l’intersection du trajet de chargement avec la ligne d’état critique (7.17). Les deux grandes classes d’évolution sont retrouvées : compaction des matériaux les plus lâches (“wet side of critical”) ou décompaction des matériaux les plus denses (“dry side of critical”). La Fig. 7.4 illustre que le modèle d’écrouissage par changement de porosité capture bien les phénomènes observés expérimentalement.

Notons seulement quelques différences. Premièrement, le pic de contrainte des matériaux fortement sur-consolidés est abrupt dans ce modèle. En effet, le modèle ne fait pas de distinction entre les interfaces (pas d’orientation privilégiée, de distributions de tailles) qui entrent toutes en plasticité en même temps. Ceci est cohérent avec le fait que l’écrouissage par énergie bloquée a

³Il est donc clair que la notion de d’état consolidé dépend à la fois du matériau et du trajet de chargement imposé : il est possible qu’un même échantillon auquel on appliquerait la même contrainte moyenne σ_m^0 puis soit un trajet triaxial classique, soit un trajet à contrainte moyenne constante, puisse avoir une augmentation de porosité pour le chargement triaxial et une diminution de porosité pour le chargement à contrainte moyenne constante.

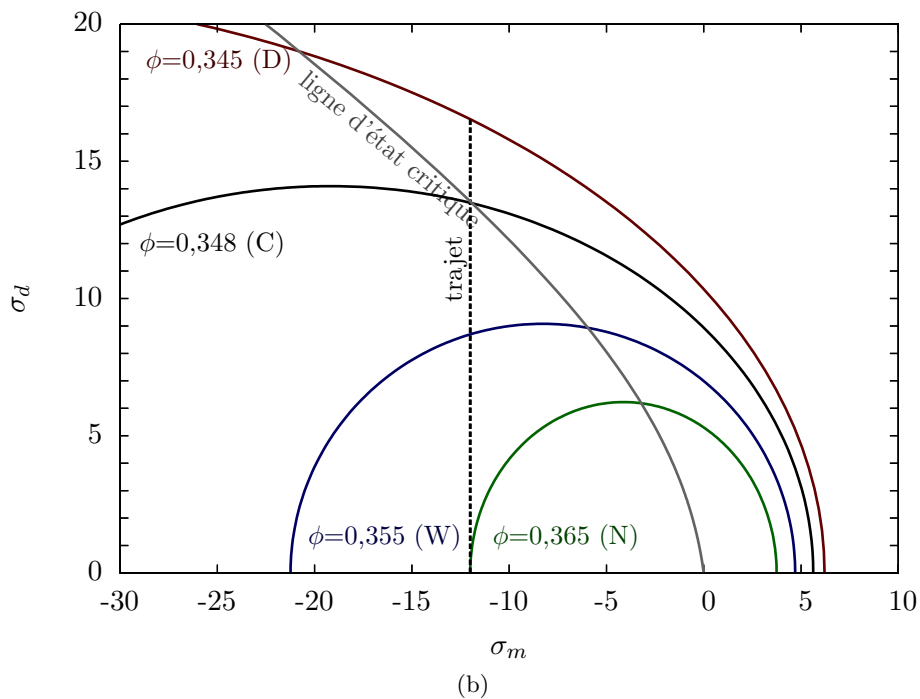
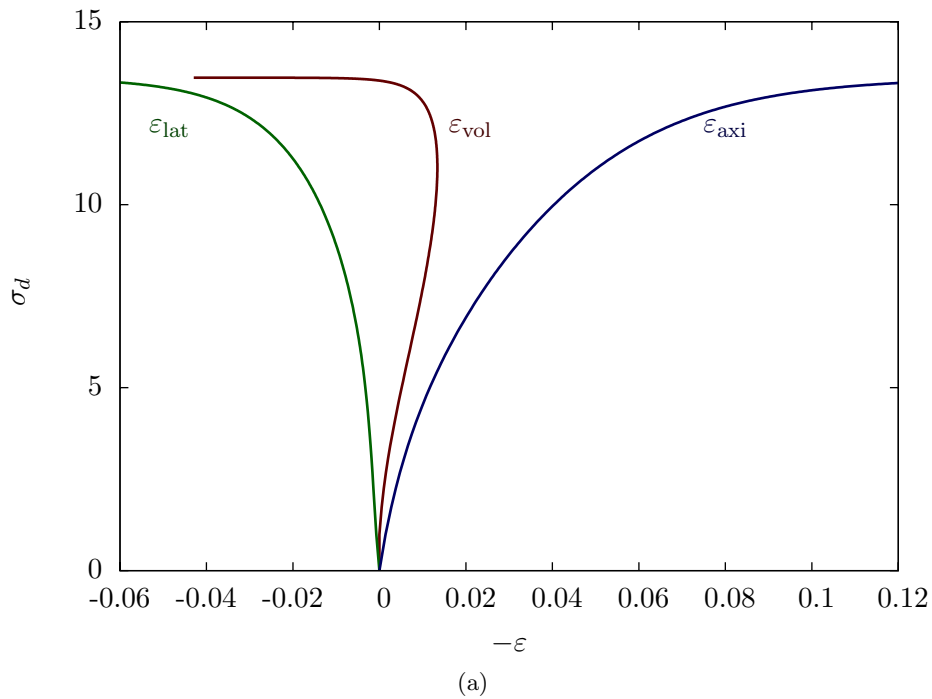


FIG. 7.3: (a) déformations axiales, latérales et volumiques pour un essai à contrainte moyenne constante sur un échantillon normalement consolidé. (b) projection de Fig. 7.2 dans le plan (σ_m, σ_d) : ligne d'état critique et limites d'élasticité initiales et finale pour les trois cas présentés Fig. 7.4 à droite : N=échantillon normalement consolidé, W=échantillon "wetter than critical" (légèrement sur-consolidé), D=échantillons "dryer than critical" (fortement surconsolidés), C=état critique.

été négligé : soit la microstructure suit une évolution élastique, soit elle est totalement plastifiée, mais les situations intermédiaires ne sont pas considérées (c.f. modèle de sphère creuse [8]).

Deuxièmement, le modèle prévoit que l'écoulement plastique libre est nécessairement dilatant. Or expérimentalement la variation de volume semble être nulle à l'écoulement plastique libre [2]. Cette caractéristique du modèle tient à ce que l'on considère que les interfaces suivent un comportement plastique avec règle d'écoulement associée. Pour le critère de Mohr-Coulomb considéré, la dilatance des interfaces peut être attribuée à une rugosité en dents de scie des interfaces. Or s'il paraît plausible que du fait de cette rugosité l'écoulement plastique des interfaces soit initialement associé, il est en revanche improbable qu'il le soit pour des décollements d'interfaces arbitrairement grands. Il faudrait donc rendre compte d'une distance caractéristique du décollement liée à la tribologie des interfaces, au delà de laquelle l'écoulement n'est plus associé, mais non dilatant (en moyenne).

Enfin, le modèle ne prévoit pas le comportement initialement légèrement contractant des échantillons fortement sur-consolidés.

7.3 Élasto-plasticité du matériau renforcé

On se place maintenant à l'échelle supérieure et considère la transition méso-macro. À l'échelle méso, l'assemblage granulaire interfacé étudié à la section précédente constitue la matrice. La matrice est maintenant supposée renforcée par des inclusions rigides avec interfaces imparfaites.

Les contraintes macroscopiques sont notées Σ . Le taux de déformation macroscopique est la somme de deux termes d'origine élastique et plastique : $\mathbf{D} = \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^p$. Les sauts de vitesse tangentielle et normale moyens aux interfaces entre matrice et inclusion sont notés $\llbracket V_t \rrbracket$ et $\llbracket V_n \rrbracket$.

7.3.1 Élasticité du matériau renforcé

Le comportement élastique de la matrice est décrit par la raideur \mathbb{C}_m issue de l'homogénéisation micro-méso de l'assemblage granulaire (7.1).

Les inclusions, de fraction volumique ρ , ont une raideur infinie. Les interfaces entre matrice et inclusion sont élastiques avec une raideur d'interface \mathbf{K}^i finie. Plus précisément, la raideur tangentielle K_t^i des interfaces entre matrice et inclusion est finie tandis que la raideur tangentielle K_n^i est infinie, ce qui a pour effet d'annuler le saut de vitesse normal élastique à l'interface.

Les inclusions sont supposées sphériques de rayon R_0 . Le tenseur de raideur homogénéisé du matériau renforcé est isotrope et se met sous la forme $\mathbb{C}^{\text{hom}} = 3k^{\text{hom}}\mathbb{J} + 2\mu^{\text{hom}}\mathbb{K}$. Les modules isotropes d'élasticité homogénéisés du matériau renforcé sont donnés par (6.45).

7.3.2 Plasticité du matériau renforcé

Les interfaces entre les inclusions et la matrice sont imparfaites et obéissent à un critère de plasticité d'interface. Deux possibilités sont étudiées pour ce critère de plasticité :

- critère de Mohr-Coulomb (6.16) : la résistance en traction est notée h_i et l'angle de frottement α_i ,
- critère de Tresca (6.15) : la résistance tangentielle est notée k .

On se place dans le cas d'une règle d'écoulement plastique associée.

En reprenant les résultats du chapitre 6 pour les critères de rupture ductile équivalents, la limite d'élasticité macroscopique est un assemblage de deux portions d'ellipses dans le plan (Σ_m, Σ_d) . Une première portion d'ellipse correspond à la situation où les interfaces ne sont pas activées, la deuxième portion à des interfaces activées. Les raccords entre les deux portions sont tangents. Les portions d'ellipses sont décrites par des fonctions de charge macroscopique de la

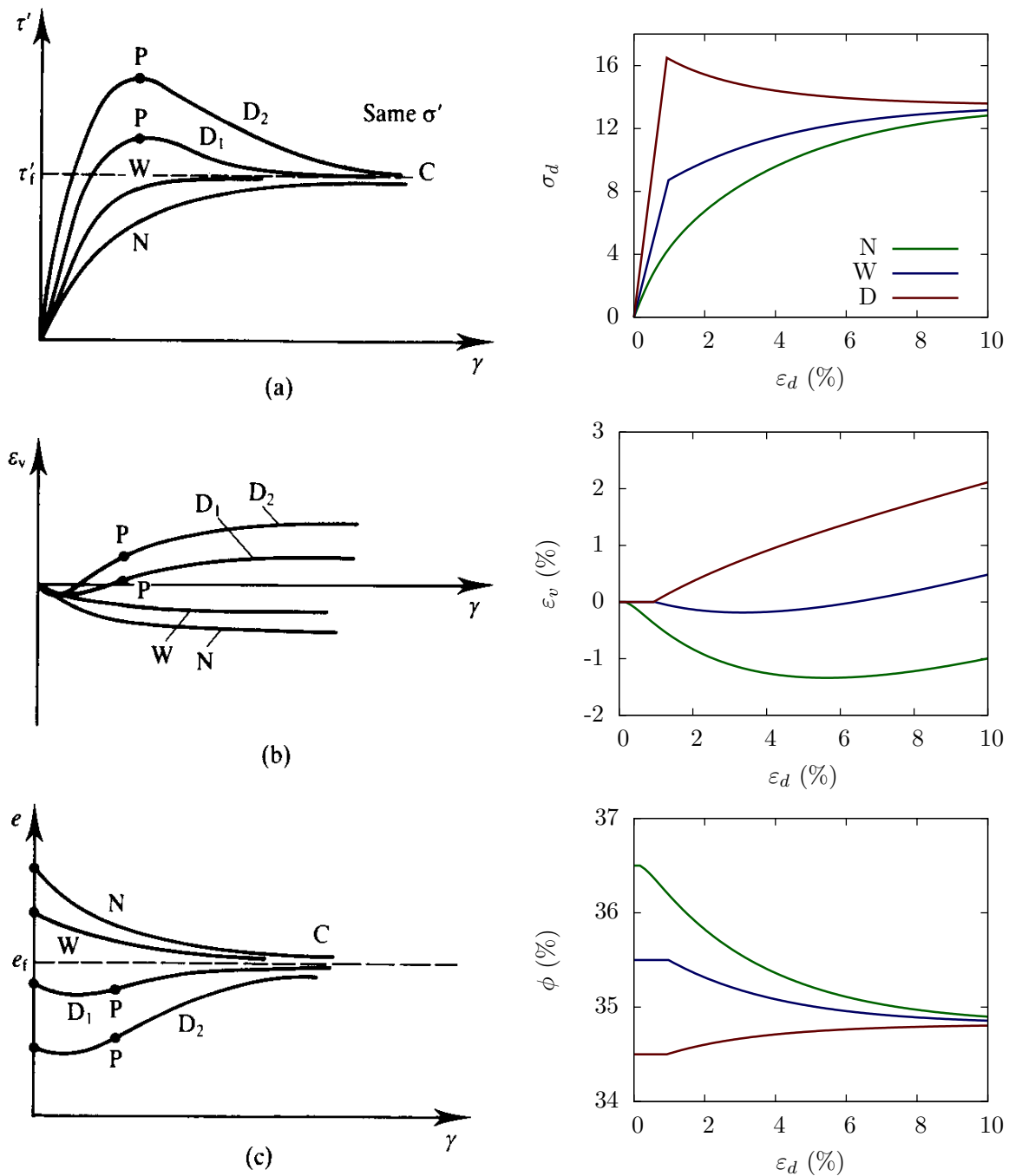


FIG. 7.4: Gauche : comportement d'un sol idéalisé d'après des essais expérimentaux de cisaillement drainés Atkinson [2]. Notations de [2] : e =porosité, γ =angle de cisaillement, τ =contrainte de cisaillement, σ =contrainte normale, ϵ_v =déformation volumique, N=échantillon normalement consolidé, W=échantillon "wetter than critical" (légèrement sur-consolidé), D=échantillons "drier than critical" (fortement surconsolidés), C=état critique. Droite : simulations élasto-plastiques d'essais triaxiaux à contrainte moyenne constante (la même pour tous les essais) pour le modèle de matrice argileuse présenté dans ce chapitre. Seule la porosité initiale change entre ces trois simulations, les autres paramètres métériaux sont fixés.

forme

$$F(\boldsymbol{\Sigma}) = \frac{(\Sigma_m - \Sigma_{m0})^2}{A} + \frac{(\Sigma_d - \Sigma_{d0})^2}{B} + \frac{2(\Sigma_m - \Sigma_{m0})(\Sigma_d - \Sigma_{d0})}{C} - 1. \quad (7.18)$$

Pour un état de contrainte macroscopique sur la frontière du domaine d'élasticité, les conditions d'appartenance à une ellipse correspondant aux interfaces activées ou non activées sont décrites sections 6.4.2 et 6.4.3. Les paramètres des différentes portions d'ellipses de la limite d'élasticité sont présentés en (6.61), (6.63) et (6.80).

En phase de charge plastique, la règle de normalité du taux de déformation plastique macro associée à la fonction de charge (7.18) est :

$$\mathbf{D}^p = \dot{\Lambda} \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} = 2\dot{\Lambda} \left[\left(\frac{\Sigma_m - \Sigma_{m0}}{A} + \frac{\Sigma_d - \Sigma_{d0}}{C} \right) \frac{\mathbf{1}}{3} + \left(\frac{\Sigma_d - \Sigma_{d0}}{B} + \frac{\Sigma_m - \Sigma_{m0}}{C} \right) \frac{\boldsymbol{\Sigma}_d}{\Sigma_d} \right] \quad (7.19)$$

où l'on a utilisé $\partial \Sigma_m / \partial \boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{1}/3$ et $\partial \Sigma_d / \partial \boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma}_d / \Sigma_d$ et $\dot{\Lambda}$ est positif. Par identification des parties sphériques et déviatoriques

$$D_v^p = 2\dot{\Lambda} \left(\frac{\Sigma_m - \Sigma_{m0}}{A} + \frac{\Sigma_d - \Sigma_{d0}}{C} \right) \quad ; \quad D_d^p = 2\dot{\Lambda} \left(\frac{\Sigma_d - \Sigma_{d0}}{B} + \frac{\Sigma_m - \Sigma_{m0}}{C} \right), \quad (7.20)$$

La direction du taux de déformation plastique macro $\beta = D_v^p / D_d^p$ se déduit alors de l'état de contrainte macroscopique par

$$\beta = \frac{B}{A} \left[\frac{(\Sigma_m - \Sigma_{m0})C + (\Sigma_d - \Sigma_{d0})A}{(\Sigma_m - \Sigma_{m0})B + (\Sigma_d - \Sigma_{d0})C} \right]. \quad (7.21)$$

Comme pour la matrice argileuse, la règle de normalité peut aussi se mettre sous la forme

$$\mathbf{D}^p = \frac{1}{m'} \left(\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} : \dot{\boldsymbol{\Sigma}} \right) \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} \quad (7.22)$$

où m' est un scalaire positif qui dépend de l'état de contrainte macroscopique et des paramètres d'érouissage. De manière analogue à (7.6), on montre que m' est proportionnel au tenseur des modules d'érouissage \mathbf{M}' tel que $\dot{\boldsymbol{\Sigma}} = \mathbf{M}' : \mathbf{D}^p$. L'annulation du paramètre m' caractérise ainsi l'écoulement plastique libre du matériau renforcé.

Comme précédemment, la porosité de la matrice est prise comme paramètre d'érouissage par changement de géométrie. Pour expliciter l'érouissage par changement de géométrie, un bilan de variation de volume macro est nécessaire. Ce bilan va notamment faire intervenir l'éventuelle dilatance des interfaces entre matrice et inclusions. Dans le cas des interfaces parfaites ou de Tresca ou non actives, le saut de vitesse normal à l'interface entre matrice et inclusion est nul. Pour les interfaces de Mohr-Coulomb, sous réserve d'activation, la règle de normalité $\llbracket V_n \rrbracket^p = \alpha_i \llbracket V_t \rrbracket^p$ et la localisation du saut de vitesse tangentiel (6.76) pour le mécanisme d'écoulement plastique adopté permettent de relier la moyenne du saut de vitesse normale plastique à l'interface entre matrice et inclusion à la déformation plastique macroscopique par :

$$\gamma_i \llbracket V_n \rrbracket^p = V(\beta) D_v^p, \quad (7.23)$$

où γ_i donné en (6.43) est la surface spécifique des interfaces entre matrice et inclusions et

$$V(\beta) = \frac{\rho \alpha_i}{u} \left[(2b + 3a)(\sqrt{5}b + 2\alpha_i(a + b)\beta) - 6b(a + b)\alpha_i(h_i + c) \sqrt{\frac{A'\beta^2 - 2C'\beta + B'}{3bu(1 - ((h + c)/h_4)^2)}} \right] \frac{1}{\beta}. \quad (7.24)$$

En plus du changement de porosité ϕ , le changement de géométrie entraîne un changement de fraction volumique d'inclusions ρ . Toutefois, le critère de plasticité est beaucoup moins sensible aux variations de ρ que de ϕ . Pour simplifier, on négligera donc l'érouissage par changement de fraction volumique d'inclusions vu les faibles déformations volumiques en jeu.

7.3.3 Écrouissage par dégradation des propriétés d'interfaces

Des essais triaxiaux menés sur l'argilite montrent à l'échelle macroscopique la présence d'un pic de contrainte même lorsque l'essai est conduit à l'état normalement consolidé. Ce phénomène n'est pas rendu compte par notre modèle de la matrice argileuse et est attribué à un mécanisme situé à l'échelle "mésos".

En supplément de l'écrouissage par changement de porosité de la matrice, on considère un écrouissage négatif lié à la dégradation progressive des interfaces entre matrice et inclusions. La dégradation des interfaces est supposée être une conséquence du glissement aux interfaces. Il est rendu compte heuristiquement par une loi de dégradation des propriétés plastiques des interfaces qui dépend du saut de déplacement tangentiel plastique moyen $[[\xi_t]]^p$ à travers ces interfaces. Ce saut de déplacement $[[\xi_t]]^p$, obtenu par localisation du mécanisme de plasticité (voir (6.69) ou (6.76)), constitue donc une nouvelle variable interne pour la fonction de charge plastique $F(\boldsymbol{\Sigma}, \phi, [[\xi_t]]^p)$. Il faut donc bien faire la différence entre les interfaces entre grains à l'échelle "micro" qui sont supposées ne pas se dégrader et les interfaces entre matrice et inclusions à l'échelle "mésos" qui subissent une décohésion.

Pour les interfaces de Tresca, la résistance tangentielle des interfaces est supposée régie par une loi du type

$$k = k^0 \exp\left(-\frac{[[\xi_t]]_{\text{eff}}^p}{\xi_c}\right), \quad (7.25)$$

où k^0 est la résistance tangentielle initiale et ξ_c est une taille critique.

Pour les interfaces de Mohr-Coulomb, la résistance en traction normale des interfaces est supposée régie par une loi du type

$$h_i = h_i^0 \exp\left(-\frac{[[\xi_t]]_{\text{eff}}^p}{\xi_c}\right), \quad (7.26)$$

où h_i^0 est la résistance en traction normale initiale.

Pour un saut de déplacement à l'interface au delà de la taille critique ξ_c , les résistances décroissent très rapidement vers 0.

7.3.4 Bilan de variation de volume méso

À l'échelle méso, la variation du volume du matériau renforcé, égale au flux du vecteur vitesse à travers la frontière du VER Ω , peut également se décomposer en trois contributions. On note \mathbf{D} le taux de déformation du VER. En utilisant des notations similaires à celles de l'échelle micro, le bilan de variation de volume est :

$$\begin{aligned} |\dot{\Omega}| &= \int_{\partial\Omega} v_n \, dS \\ &= \left[\int_{\partial\Omega} v_n \, dS - \sum_{\text{incl. } i} \int_{(\partial\Omega_m)_i} v_n \, dS \right] + \left[\sum_{\text{Lincl. } i} \left(\int_{(\partial\Omega_m)_i} v_n \, dS - \int_{(\partial\Omega_i)_m} v_n \, dS \right) \right] + \left[\sum_{\text{Lincl. } i} \int_{(\partial\Omega_i)_m} v_n \, dS \right] \\ &= |\dot{\Omega}_m| + \int_{\Gamma_i} [[v_n]] \, dS + |\dot{\Omega}_i|. \end{aligned} \quad (7.27)$$

Le premier terme fait apparaître le taux de déformation volumique moyen de la matrice. Le second terme fait apparaître le saut de vitesse normale moyen aux interfaces entre matrice et inclusion et la surface spécifique γ_i de ces interfaces. Le troisième terme correspond à la variation de volume des inclusions avec $|\dot{\Omega}_i|/|\Omega| = d_v^i \rho$. Le bilan de volume à l'échelle méso s'écrit, au

premier ordre en petites déformations⁴

$$D_v = (1 - \rho)d_v + \gamma_i \overline{[v_n]}^{\Gamma_i} + \rho d_v^i. \quad (7.28)$$

En intégrant les informations de l'échelle microscopique, on obtient finalement

$$D_v = \frac{1 - \rho}{1 - \phi} \left((1 - \phi)d_v^g + \dot{\phi} + \gamma_g \overline{[v_n]}^{\Gamma_g} \right) + \gamma_i \overline{[v_n]}^{\Gamma_i} + \rho d_v^i. \quad (7.29)$$

Dans notre cas, les grains et les inclusions sont supposés rigides donc d_v^g et d_v^i sont nuls. Les notations simplifiées $[\mathbf{v}] = \overline{[\mathbf{v}]}^{\Gamma_g}$ et $[\mathbf{V}] = \overline{[\mathbf{v}]}^{\Gamma_i}$ sont adoptées dans la suite.

7.3.5 État critique et écoulement plastique libre du matériau renforcé

Écoulement plastique libre du matériau renforcé

Le matériau renforcé présente deux paramètres d'écroissage : la porosité ϕ et le saut de déplacement tangentiel moyens aux interfaces entre matrice et inclusions $[\xi_t^p]$. En phase de charge plastique, le critère est vérifié à tout instant, de sorte que :

$$\frac{dF(\boldsymbol{\Sigma}, \phi, [\xi_t^p])}{dt} = 0 = \frac{\partial F(\boldsymbol{\Sigma}, \phi, [\xi_t^p])}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} : \dot{\boldsymbol{\Sigma}} + \frac{\partial F(\boldsymbol{\Sigma}, \phi, [\xi_t^p])}{\partial \phi} \dot{\phi} + \frac{\partial F(\boldsymbol{\Sigma}, \phi, [\xi_t^p])}{\partial [\xi_t^p]} [V_t^p] \quad (7.30)$$

À l'écoulement plastique libre, deux situations sont possibles : soit les interfaces sont inactivées, soit elles sont activées. Dans le cas où les interfaces sont inactivées, $[V_t^p]$ est automatiquement nul. Dans le cas où les interfaces entre matrice et inclusions sont activées, $[\xi_t^p]$ croît arbitrairement à l'écoulement plastique libre. Or pour les interfaces de Tresca (resp. Mohr-Coulomb), $\partial F / \partial [\xi_t^p]$ se décompose en $\partial F / \partial k \times \partial k / \partial [\xi_t^p]$ (resp. $\partial F / \partial h_i \times \partial h_i / \partial [\xi_t^p]$) qui s'annule pour $[\xi_t^p] \gg \xi_c$ d'après (7.25) (resp. (7.26)). Autrement dit, si elles sont activées, les interfaces sont totalement dégradées à l'écoulement plastique libre donc $[\xi_t^p]$ n'est plus une source d'écroissage. Ainsi, (7.30) se simplifie à l'écoulement plastique libre en :

$$\frac{\partial F(\boldsymbol{\Sigma}, \phi, [\xi_t^p])}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} : \dot{\boldsymbol{\Sigma}} + \frac{\partial F(\boldsymbol{\Sigma}, \phi, [\xi_t^p])}{\partial \phi} \dot{\phi} = 0 \quad \text{à l'E.P.L.} \quad (7.31)$$

Par ailleurs à l'aide de (7.24), le bilan de variation de volume (7.28) se met sous la forme

$$(1 - V(\beta))D_v^p = (1 - \rho)d_v - D_v^e. \quad (7.32)$$

En outre, d_v^p s'exprime en fonction des paramètres micro par (7.14). Finalement, le bilan de variation de volume (7.29) devient :

$$(1 - \phi - v(\beta_m))(1 - V(\beta))D_v^p = (1 - \rho)(\dot{\phi} - v(\beta_m)d_v^e) - (1 - \phi - v(\beta_m))D_v^e \quad (7.33)$$

Dans la suite, on supposera que les taux de déformation élastiques sont négligeables devant les taux de déformation plastiques, suivant le même argumentaire que pour la transition micro-méso.

Le paramètre m' , dont l'annulation caractérise l'écoulement plastique libre, se déduit alors de la règle d'écoulement (7.22), du bilan de variation de volume (7.33) et de (7.31) :

$$m'(\boldsymbol{\Sigma}, \phi, [\xi_t]) = \frac{(v(\beta_m) - (1 - \phi))(1 - V(\beta))}{1 - \rho} \text{tr} \left(\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} \right) \frac{\partial F}{\partial \phi}, \quad (7.34)$$

⁴Dans le cas des inclusions rigides : ce résultat peut se retrouver alternativement en écrivant que $|\Omega_m| = (1 - \rho - \gamma_i \overline{[\xi_n]}^{\Gamma_i})|\Omega|$ donc $|\dot{\Omega}_m| = (1 - \rho - \gamma_i \overline{[\xi_n]}^{\Gamma_i})|\dot{\Omega}| - \gamma_i \overline{[v_n]}^{\Gamma_i}|\Omega| - \rho|\dot{\Omega}|$. La conservation du volume des inclusions donne par ailleurs $\rho|\dot{\Omega}| + \rho|\dot{\Omega}| = 0$. La variation de volume de la matrice s'écrit alors $|\dot{\Omega}_m| = |\dot{\Omega}| - \gamma_i \overline{[v_n]}^{\Gamma_i}|\Omega| - \gamma_i \overline{[\xi_n]}^{\Gamma_i}|\dot{\Omega}|$. En divisant par $|\Omega|$, après simplifications il vient $D_v = (1 - \rho)d_v + \gamma_i \overline{[v_n]}^{\Gamma_i} + \gamma_i \overline{[\xi_n]}^{\Gamma_i}(D_v - d_v)$. Le dernier terme, du second ordre dans l'hypothèse des petites déformations, est négligeable.

où $[\xi_t]$ ne peut correspondre qu'aux deux états : interfaces non activées donc non dégradées ($[\xi_t] = 0$) ou interfaces activées et totalement dégradées ($[\xi_t] \rightarrow \infty$).

L'écoulement plastique libre peut avoir lieu dans deux situations :

- soit $v(\beta_m) = 1 - \phi$: la matrice est à l'écoulement plastique libre (voir (7.16)),
- soit $V(\beta) = 1$: par définition de $V(\beta)$ (7.23), cela signifie que toute la variation de volume du matériau renforcé est due à la dilatation des interfaces entre matrice et inclusions.

L'écoulement plastique libre est donc caractérisé par les taux de triaxialité des taux de déformations macroscopique (β) ou de la matrice (β_m). Le taux de triaxialité β du taux de déformation plastique macro se déduit des contraintes macroscopiques par (7.21). Le taux de triaxialité de la matrice β_m est maintenant cherché en fonction du taux de triaxialité macroscopique β par localisation du mécanisme d'écoulement plastique.

D'une part, les états de contraintes de la matrice sur la frontière du critère de plasticité de la matrice peuvent s'obtenir par une raideur sécante fictive. Notamment, la contrainte déviatorique de la matrice s'exprime en fonction de d^p par l'intermédiaire d'un module de cisaillement fictif (6.21) qui dépend du taux de déformation d^p de la matrice.

D'autre part, ce module de cisaillement fictif est obtenu dans la procédure d'homogénéisation meso-macro de la résistance par (6.59) (interfaces parfaites ou non activées), (6.68) (interfaces de Tresca activées) ou (6.74) (interfaces de Mohr-Coulomb activées) en fonction du taux de déformation D^p macroscopique.

L'égalité de ces deux expressions du module de cisaillement fictif de la matrice permet de calculer β_m en fonction de β sous réserve de pouvoir relier d_v^p à D_v^p . Cette relation est obtenue en négligeant le taux de déformation élastique dans le bilan de variation de volume (7.28) et conduit à $d_v^p/D_v^p = (1 - V(\beta))/(1 - \rho)$ où $V(\beta)$ est donné par (7.24) si les interfaces sont de Mohr-Coulomb et activées ou nul sinon. Finalement, β_m s'exprime en fonction de β comme la racine d'une équation du second degré qui est du signe de d_v^p :

- interfaces Mohr-Coulomb actives :

$$\beta_m(\beta) = (1 - \rho)\beta d_v^p/D_v^p \sqrt{\frac{3ub(1 - ((h_i + c)/h_4)^2)}{b(A'\beta^2 - 2C'\beta + B') - 3\beta^2ua(1 - ((h_i + c)/h_4)^2)(1 - \rho)^2 d_v^p/D_v^p}}, \quad (7.35)$$

- interfaces Tresca actives :

$$\beta_m(\beta) = \beta \sqrt{\frac{3b(bp - 6\rho(a + b)k^2)}{2\rho(9a(a + b)k^2 + b^2p)\beta^2 + b^2(1 - \rho)r}}, \quad (7.36)$$

- interfaces parfaites ou inactives :

$$\beta_m(\beta) = \beta \sqrt{\frac{6(a + b)}{4\rho(a + b)\beta^2 + q}}. \quad (7.37)$$

Il existe donc une valeur critique β_c du taux de triaxialité macroscopique β telle que $\beta_m(\beta_c) = \beta_m^c$ pour laquelle l'écoulement plastique libre macroscopique a lieu, déclenché par celui de la matrice.

Lorsque les interfaces entre matrice et inclusions sont de type Mohr-Coulomb, il existe une autre valeur critique telle que $V(\beta) = 1$. Ce second type d'écoulement plastique libre ne peut avoir lieu que si les interfaces sont activées (voir la discussion section 6.4.3). Pour ne pas compliquer la discussion, ce second scénario d'écoulement plastique libre ne sera pas traité plus en détail.

Lignes d'état critique

Explicitons maintenant les états critiques de contrainte et de porosité pour lesquels, par définition, l'écoulement plastique libre du matériau renforcé a lieu. Rappelons que les interfaces

peuvent avoir seulement deux états à l'écoulement plastique libre : soit intactes, soit totalement dégradées.

Dans le cas où les interfaces sont intactes car jamais activées, les états critiques de contrainte et de porosité vérifient le critère (pour interfaces inactives) et sont tels que $\beta_m = \beta_m^c$ (pour interfaces inactives). La combinaison du critère (7.18) et de la règle de normalité (7.21) dans le cas des interfaces inactives, de la relation entre β_m et β (7.37), et de la valeur critique de β_m (7.16) permet de trouver une équation paramétrique en ϕ pour les états de contrainte Σ_m et Σ_d et de porosité critiques :

$$\Sigma_d(\phi) = \sqrt{\frac{B}{1 + \frac{A}{B}\beta_c^2}} \quad ; \quad \Sigma_m(\phi) = -c + \frac{A}{B}\beta_c\Sigma_d \quad (7.38)$$

$$\text{avec } \beta_c = \beta_m^c \sqrt{\frac{q}{2(a+b)(3-2\rho(\beta_m^c)^2)}} \quad ; \quad \beta_m^c = \lambda \sqrt{\frac{2\mathcal{M}\delta}{\mathcal{K}((1-\phi)^2 - (1-\phi-\lambda)^2\delta)}}$$

où A et B se réfèrent au critère macroscopique pour les interfaces inactives. Ce résultat ne dépend pas du trajet de chargement, tant que celui-ci n'a jamais conduit à une activation des interfaces.

Considérons maintenant le cas où les interfaces sont activées et donc totalement dégradées à l'écoulement plastique libre. Les états critiques sont caractérisés par la combinaison du critère (7.18) et de la règle de normalité (7.21) dans le cas des interfaces actives, de la relation entre β_m et β (7.35) ou (7.36), où toutes ces relations sont prises dans le cas où les interfaces sont totalement dégradées, et la valeur critique de β_m (7.16). Finalement, une relation entre Σ_m et Σ_d est établie pour les états de contrainte et de porosité recherchés sous la forme d'une équation paramétrique en ϕ :

$$\Sigma_d(\phi) = \Sigma_{d0} + \sqrt{\frac{B}{1 + \frac{A(B-C\beta_c)^2}{B(A\beta_c-C)^2} + \frac{2A(B-C\beta_c)}{C(A\beta_c-C)}}} \quad ; \quad \Sigma_m(\phi) = \Sigma_{m0} + \frac{A(B-C\beta_c)}{B(A\beta_c-C)}(\Sigma_d - \Sigma_{d0})$$

$$\text{avec } \beta_c \text{ déduit de } \beta_m \text{ par (7.35) ou (7.36) pour } \beta_m = \beta_m^c \text{ (7.16)} \quad (7.39)$$

où A , B , C , Σ_{m0} et Σ_{d0} se réfèrent au critère macroscopique pour les interfaces actives dans la limite où les interfaces méso sont complètement dégradées ($k = 0$ ou $h_i = 0$).

Les lignes d'état critiques et les frontières des critères de plasticité sont présentées Fig. 7.5 dans l'espace $(\Sigma_m, \Sigma_d, \phi)$ pour le matériau renforcé par inclusions avec interfaces de Tresca, pour différentes valeurs de la résistance tangentielle k des interfaces.

7.3.6 Simulations élasto-plastiques

L'algorithme utilisé pour les simulations élasto-plastiques est détaillé en annexe G, section G.1.

Trois types d'évolutions élasto-plastiques

La Fig. 7.6 illustre les trois types d'évolutions élasto-plastiques que peut rencontrer le matériau renforcé soumis à un chargement. Une étude plus complète est proposée en annexe G Fig. G.1a, G.1b, G.2a et G.2b.

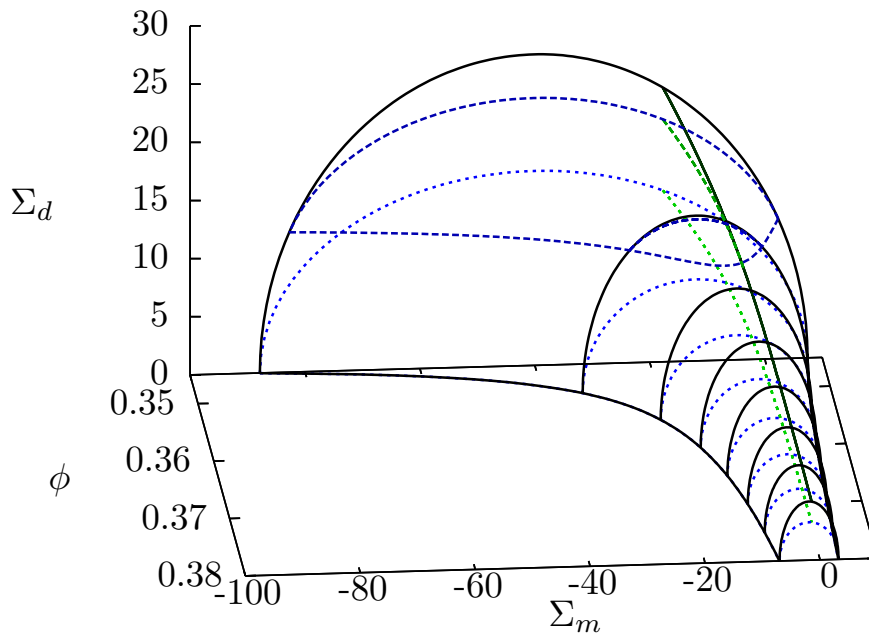


FIG. 7.5: Frontière du critère de plasticité et ligne d'état critique macroscopiques dans le cas du matériau renforcé par inclusions avec interfaces de Tresca. Trait plein noir : interfaces parfaites ou non actives, trait tirets bleu foncé : $k = 7$, trait points bleu clair : $k = 0$. Les lignes vertes correspondantes sont les lignes d'état critique (7.38) ou (7.39).

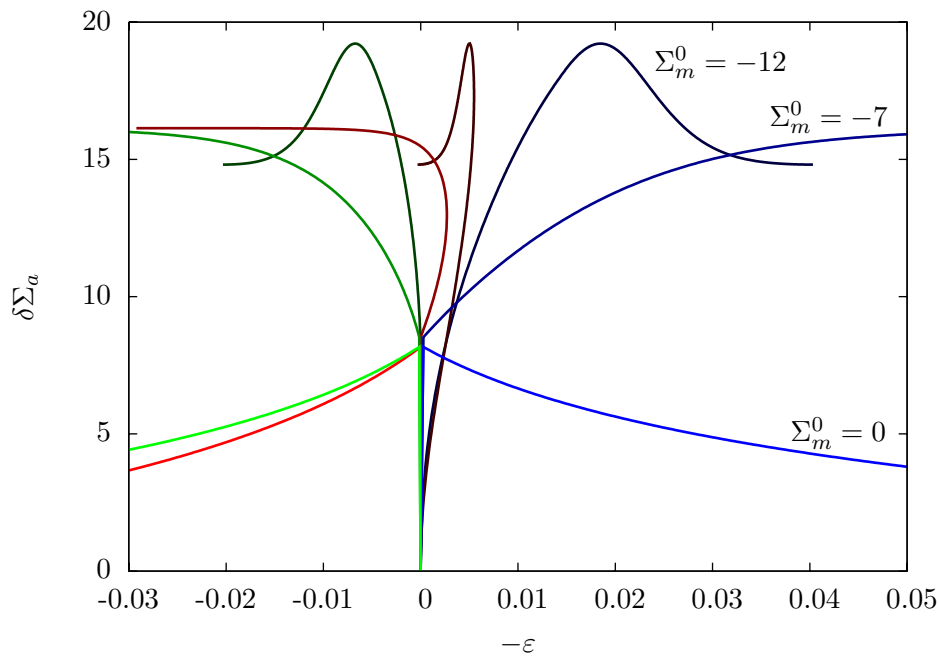


FIG. 7.6: Simulation d'essais à $\Sigma_m = \Sigma_m^0$ constant sur un même matériau renforcé avec interfaces méso de Mohr-Coulomb, pour différents états de sur-consolidation.

Interfaces non activées Dans le cas où les interfaces entre matrice et inclusions ne sont pas activées, la porosité est le seul paramètre d'écroissage et le matériau renforcé se comporte qualitativement comme la matrice argileuse. Deux types d'évolutions élasto-plastiques sont rencontrées : soit la porosité ϕ diminue et l'écroissage est positif (cas $\Sigma_m^0 = -7$ Fig. 7.6) ; soit la porosité ϕ augmente et l'écroissage est négatif (cas $\Sigma_m^0 = 0$ Fig. 7.6).

L'évolution de la porosité n'est pas contrôlée par le signe du taux de triaxialité macroscopique β , mais par le signe de $\beta_m - \beta_m^c$. Rappelons que β_m^c défini par (7.16) est le taux de triaxialité critique du taux de déformation de la matrice conduisant à l'écoulement plastique libre de la matrice et donc du matériau renforcé.

Interfaces activées Dans le cas où les interfaces entre matrice et inclusions sont activées au cours du chargement, le glissement aux interfaces entraîne une dégradation de leurs propriétés plastiques par la loi (7.25) ou (7.26). Pour simplifier la discussion relative à l'activation des interfaces présentée au chapitre 6, cette situation est rencontrée lorsque les interfaces sont faibles en comparaison de la matrice. Or la matrice est d'autant plus résistante que la porosité est faible. Ainsi, les interfaces ne sont susceptibles d'être activées que si le chargement est effectué en conditions normalement consolidé ou légèrement surconsolidé, de telle sorte que la porosité diminue au cours du chargement (cas $\Sigma_m^0 = -12$ Fig. 7.6).

Il existe alors une compétition entre l'écroissage positif par diminution de porosité et l'écroissage négatif par dégradation des interfaces. De cette compétition peut résulter un pic de contraintes si la dégradation des interfaces l'emporte sur la diminution de la porosité. Insistons sur le fait que la nature de ce pic (compétition entre deux mécanismes d'écroissage opposés) est différente de celle du pic rencontré pour la matrice argileuse ou le matériau renforcé sans activation des interfaces (atteinte de la limite d'élasticité puis unique mécanisme d'écroissage négatif par augmentation de porosité Fig. 7.4).

La Fig. 7.7 illustre le trajet suivi dans l'espace $(\Sigma_m, \Sigma_d, \phi)$ par le matériau renforcé lors d'un chargement triaxial normalement consolidé. Initialement, les interfaces ne sont pas activées et le matériau suit un écroissage positif par diminution de porosité. Lorsque le trajet rencontre la ligne d'activation des interfaces, la porosité continue de diminuer mais les interfaces se dégradent. Il n'est alors plus possible de parler rigoureusement d'un écroissage positif ou négatif car la limite d'élasticité change de forme. En effet à partir d'un certain point, la limite d'élasticité en traction/compression augmente ($\dot{\phi} < 0$) tandis qu'elle diminue en contrainte déviatorique diminue (dégradation interfaces). À l'approche de la ligne d'état critique, les interfaces sont totalement dégradées et l'évolution s'arrête à l'intersection du trajet de contrainte avec la ligne d'état critique pour interfaces totalement dégradées (7.39).

La Fig. 7.8 illustre le lien entre les courbes de contrainte/déformation et les limites d'élasticité dans le plan (Σ_m, Σ_d) à différents instants clés.

Pic de contraintes dû à la compétition de deux mécanismes d'écroissage

Tentons d'étudier la compétition entre un écroissage positif dû à la diminution de porosité (à l'échelle "micro") et écroissage négatif apparent dû à la dégradation des interfaces (à l'échelle "méso") pour gagner en compréhension sur l'apparition du pic de contraintes.

Cherchons à déterminer s'il existe un lieu géométrique de ces pics de contrainte. On se place dans l'hypothèse où les contraintes suivent un trajet de chargement imposé (par exemple, Σ_m constant ou un chargement triaxial). Le pic correspond à un point de retour sur le trajet des contraintes, avec $\dot{\Sigma}_m = \dot{\Sigma}_d = 0$. Remarquons que cet état implique $\dot{E}_v^e = \dot{E}_d^e = 0$ en ce point par la loi de comportement élastique.

Par ailleurs, les contraintes doivent vérifier le critère $F(\Sigma) = 0$ à chaque instant en phase de

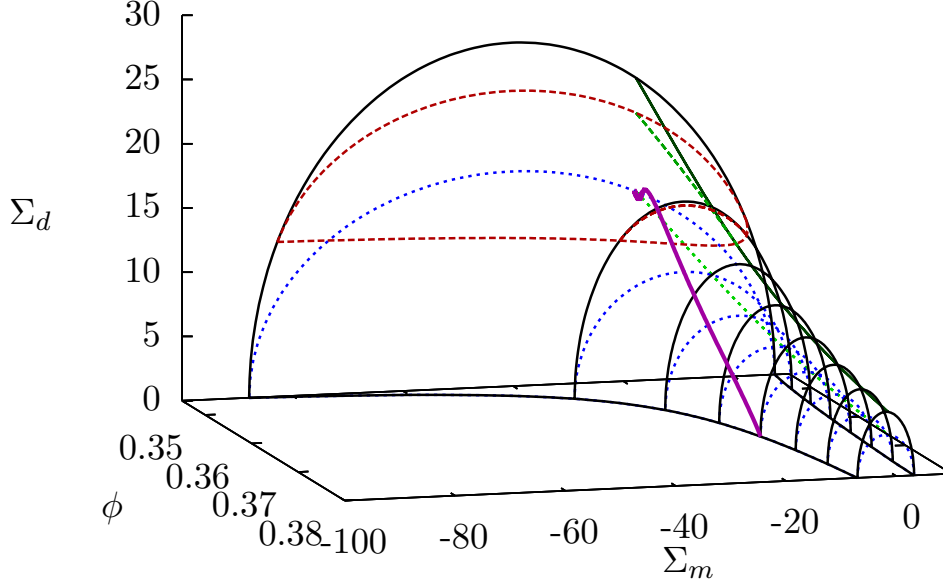


FIG. 7.7: Trajet des contraintes, surfaces de charges et lignes d'état critique pour des interfaces de Tresca et un chargement triaxial avec état initial normalement consolidé.

charge plastique. Par conséquent, $\dot{F}(\Sigma) = 0$ au cours de la charge. En particulier, au pic :

$$\dot{F}(\Sigma) = \frac{\partial F}{\partial \Sigma_m} \dot{\Sigma}_m + \frac{\partial F}{\partial \Sigma_d} \dot{\Sigma}_d + \frac{\partial F}{\partial \phi} \dot{\phi} + \frac{\partial F}{\partial \llbracket \xi_t^p \rrbracket} \llbracket V_t^p \rrbracket = 0 \Rightarrow \frac{\partial F}{\partial \phi} \dot{\phi} + \frac{\partial F}{\partial \llbracket \xi_t^p \rrbracket} \llbracket V_t^p \rrbracket = 0 \quad (7.40)$$

De plus, étant donné que $\dot{E}_v^e = \dot{E}_d^e = 0$ au pic, le bilan de variation de volume (7.33) se réduit à

$$(1 - \phi - v(\beta_m))(1 - V(\beta))D_v^p = (1 - \rho)\dot{\phi}. \quad (7.41)$$

Au regard de (6.69) ou (6.76), on peut localiser le saut de vitesse tangentielle à l'interface inclusion-matrice et le mettre sous la forme

$$\llbracket V_t^p \rrbracket = U(\beta)D_v^p, \quad (7.42)$$

où $U(\beta)$ est une fonction de β et des paramètres microstructuraux, de sorte que

$$(1 - \phi - v(\beta_m))(1 - V(\beta))\llbracket V_t^p \rrbracket = U(\beta)(1 - \rho)\dot{\phi}. \quad (7.43)$$

Finalement, en reportant ce résultat dans (7.40) et en supposant $\dot{\phi} \neq 0$, une relation entre Σ_m , Σ_d , ϕ et $\llbracket \xi_t^p \rrbracket$ est trouvée :

$$\frac{\partial F}{\partial \phi}(1 - \phi - v(\beta_m))(1 - V(\beta)) + \frac{\partial F}{\partial \llbracket \xi_t^p \rrbracket} U(\beta)(1 - \rho) = 0. \quad (7.44)$$

On a ainsi deux relations implicites ((7.44) et (7.18)) portant sur les états Σ_m , Σ_d au pic, dépendant des deux paramètres d'écroutissage ϕ et $\llbracket \xi_t^p \rrbracket$. Les états de contraintes au pic sont

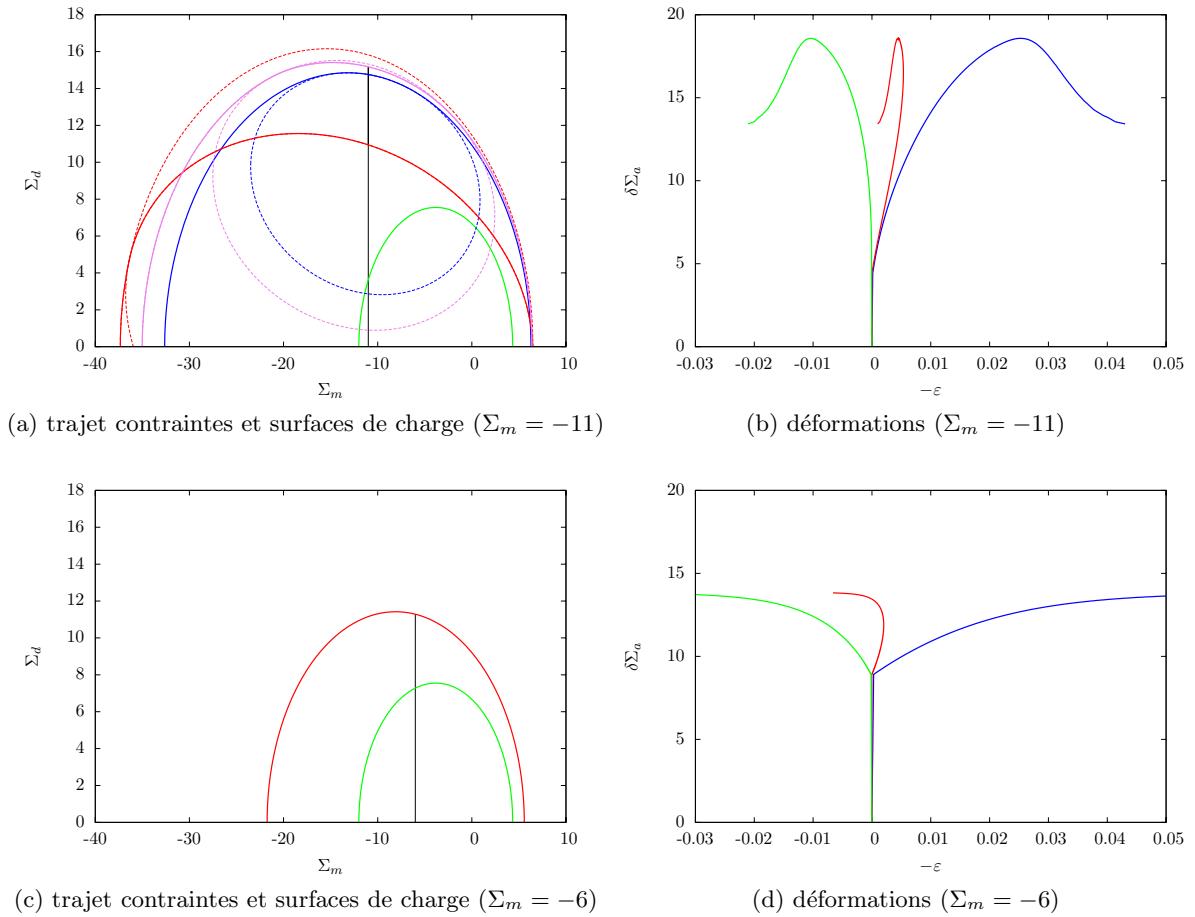
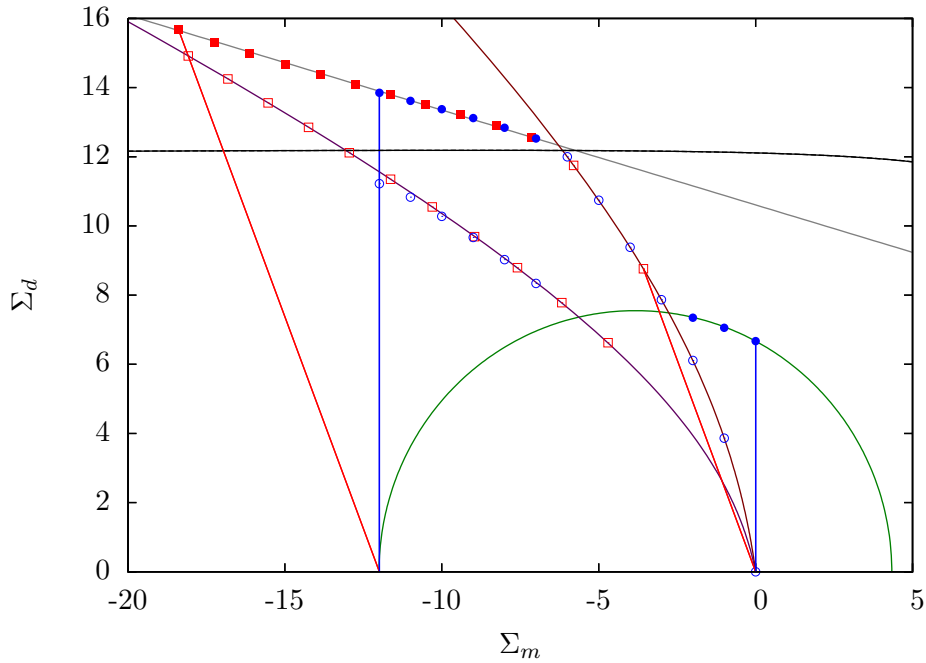
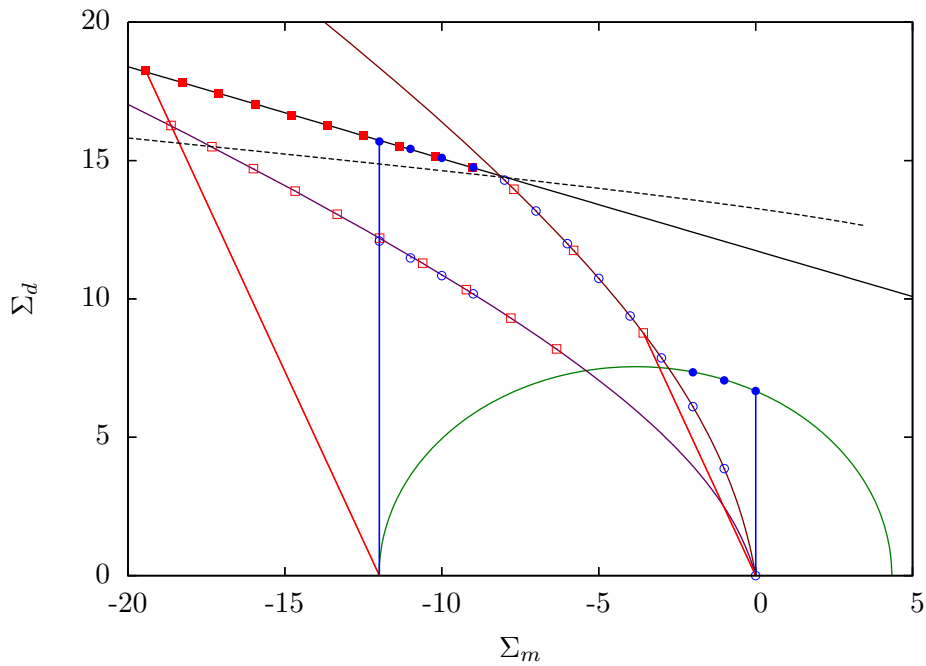


FIG. 7.8: Essais sur un matériau renforcé avec interfaces méso de Mohr-Coulomb à contrainte moyenne constante $\Sigma_m = -11$ et $\Sigma_m = -6$, sur-consolidé car la limite d'élasticité en compression est $\Sigma_m = -12$. (a,c) Surfaces de charges à différents instant; vert : initial, bleu : activation des interfaces, violet : deformation deviatorique maximale, rouge : final (écoulement plastique libre). Les traits pointillés sont la continuité des portions d'ellipses complémentaires du critère avec interfaces activées et non activées. (b,d) Opposé des déformations macroscopiques totales latérale, axiale et volumique en fonction de la variation de contrainte axiale par rapport à l'état initial. Vert : $-\varepsilon_{\text{lat}}$, rouge : $-\varepsilon_{\text{vol}}$, bleu : $-\varepsilon_{\text{axi}}$.



(a) Interfaces Tresca



(b) Interfaces Mohr-Coulomb

FIG. 7.9: Lieux des pics de contrainte et des états critiques lors d'essais triaxiaux classique (carrés violets) ou à contrainte moyenne constante (ronds bleus). Les symboles pleins correspondent aux pics, creux aux états critiques. L'état initial est normalement ou sur consolidé et le matériau est renforcé avec interfaces méso de (a) Tresca ou (b) Mohr Coulomb. Ellipse verte : limite d'élasticité initiale (7.18), lignes bordeaux : lignes d'état critique interfaces intactes (7.38), lignes rouges : lignes d'état critique interfaces totalement dégradées (7.39), lignes noires pointillées : lignes d'activation des interfaces et droite noire ajustée sur le lieu des pics de contraintes $\Sigma_d + 0,2703\Sigma_m - 10,65 = 0$ (Tresca) ou $\Sigma_d + 0,3323\Sigma_m - 11,75 = 0$ (MohrCoulomb). Les paramètres sont $\phi_0 = 0,365$, $\rho = 0,6$, $\alpha_g = 0,055$, $h_g = 92,86$, $\alpha_i = 0,065$, $h_i = 120$, $k^0 = 7$, $r_0K_t^g = 937,25$, $R_0K_t^i = 100050$, valeur critique d'écroûissage $\xi_c/R_0 = 0,003$.

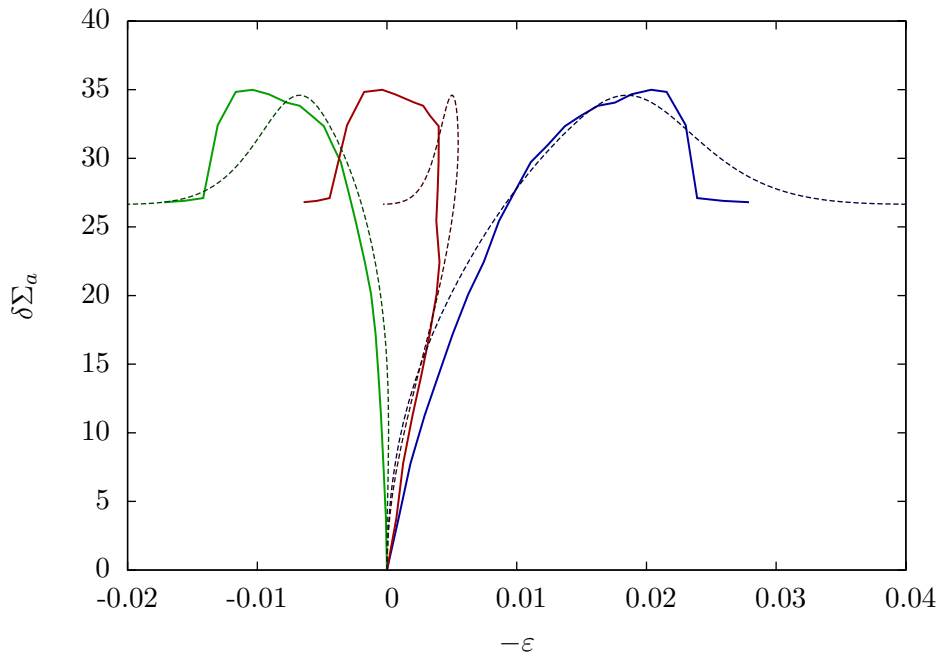


FIG. 7.10: Essai expérimental en cellule triaxiale à contrainte moyenne constante sur l'argilite de Bure à l'état normalement consolidé (trait plein, mesures du Laboratoire de Mécanique de Lille) et simulation pour le matériau renforcé avec des interfaces de Mohr-Coulomb (pointillés).

donc de la forme $\Sigma_m(\phi, \llbracket \xi_t^p \rrbracket)$ et $\Sigma_d(\phi, \llbracket \xi_t^p \rrbracket)$. Il manque alors une relation supplémentaire entre Σ_m , Σ_d , ϕ et $\llbracket \xi_t^p \rrbracket$ afin de caractériser l'ensemble des états de contraintes au pic.

Nous n'avons donc pas pu identifier a priori de lieu géométrique des états de contrainte au pic. Cependant, les résultats de simulations numériques présentés Fig. 7.9 montrent que les états de contraintes au pic sont apparemment localisés sur une ligne dans le plan (Σ_m, Σ_d) , indépendamment du trajet de chargement. Toutefois, on peut affirmer que ce lieu passe par le point correspondant à l'intersection de la ligne d'état critique pour les interfaces non activées avec la ligne d'activation des interfaces (voir chapitre 6), ce qui est bien observé Fig. 7.9.

Confrontation aux observations expérimentales

Le modèle d'élasto-plasticité d'un matériau argileux renforcé par inclusions rigides avec interfaces imparfaites est comparé aux observations expérimentales Fig. 7.10. L'essai correspond à un trajet à contrainte moyenne constante dans une cellule triaxiale à partir de l'état normalement consolidé.

Le modèle permet de rendre compte de toutes les caractéristiques principales de la réponse expérimentale. L'échantillon se contracte initialement par diminution de porosité, puis la dilatance des interfaces "micro" et "méso" l'emporte, de sorte que le taux de déformation volumique change au cours de l'essai. Remarquons que dans cette simulation, la contribution de la dilatance des interfaces entre matrice et inclusions à la déformation volumique totale est un à deux ordres de grandeur plus faible que celle des interfaces entre grains, qui se passe à l'échelle inférieure. La compétition entre la dégradation des interfaces et la diminution de porosité permet de rendre compte d'un pic de contraintes qui apparaît pour une déformation latérale de 2%. Ensuite, le matériau évolue jusqu'à l'état critique avec interfaces totalement dégradées.

Il est intéressant de noter que le modèle de la matrice argileuse seule n'aurait pas pu rendre compte de cet essai. En effet, ce modèle prévoit l'absence de pic de contraintes pour un essai

à partir de l'état normalement consolidé. Seul le modèle à trois échelles avec dégradation des propriétés d'interfaces entre matrice et inclusions permet de rendre compte de ce phénomène.

Enfin, le modèle micromécanique permet une auscultation des origines "micro" et "mésos" des phénomènes observés à l'échelle macroscopique. Cette auscultation est rendue possible par la localisation des mécanismes de déformation à toutes les échelles dans le matériau. Par ce procédé, nous avons ainsi pu identifier que la dilatation volumique provient majoritairement de la dilatance des interfaces entre grains à l'échelle "micro", tandis que les interfaces de Mohr-Coulomb entre matrice et inclusions à l'échelle "mésos" n'ont qu'une faible contribution.

Ce chapitre a proposé une modélisation originale de l'élasto-plasticité des matériaux argileux. Sur la base d'un raisonnement purement micro-mécanique, les notions d'état critique et d'écrouissage par changement de porosité, classiques en mécanique des sols, sont retrouvées. La modélisation de l'écrouissage par changement de géométrie doit tout son succès à la très grande sensibilité à la porosité du modèle de résistance d'un matériau granulaire proposé dans He *et al.* [51].

* *

*

Annexes

Annexe A

Fonctions de corrélations pour sphères pénétrables aléatoires

Cette annexe présente les fonctions de corrélation de la phase *porouse* pour une distribution aléatoire de grains solides sphériques inter-pénétrables de rayon R . Les résultats sont repris de [10] pour F_{vv} et F_{vvv} et de [67, 101] pour F_{vs} et F_{ss} (définis par (1.59) et (1.61)). Pour cette distribution, le nombre de sphères par unité de volume ρ est relié à la porosité par

$$\phi = \exp\left(-\rho\frac{4\pi R^3}{3}\right) \quad (\text{A.1})$$

La surface spécifique est

$$\gamma = 4\pi R^2 \rho \phi \quad (\text{A.2})$$

Les fonctions de corrélation à n points de la phase poreuse ($F_{vv} = F_2$, $F_{vvv} = F_3$...) sont obtenues par :

$$F_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}) = \exp(-\rho V_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1})) \quad (\text{A.3})$$

où V_n est le volume de l'union des n sphères dont les centres sont situés en $\mathbf{0}, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}$. Par exemple, $V_1 = 4\pi R^3/3$ donc $F_1 = \phi$ et¹

$$V_2(\mathbf{x}R) = \frac{4\pi R^3}{3} \times \begin{cases} 1 + \frac{3}{4}x - \frac{x^3}{16} & \text{si } x \leq 2 \\ 2 & \text{si } x \geq 2 \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

ce qui permet bien de retrouver $\lim_{r \rightarrow \infty} F_2(\mathbf{r}) = \phi^2$. Le volume de l'union de trois sphères centrées en $\mathbf{0}, \mathbf{x}_1 = \mathbf{a}R$ et $\mathbf{x}_2 = \mathbf{b}R$ est

$$V_3(\mathbf{a}R, \mathbf{b}R) = V_2(\mathbf{a}R) + V_2(\mathbf{b}R) + V_2(\mathbf{c}R) - 3V_1 + V_3^0(\mathbf{a}R, \mathbf{b}R, \mathbf{c}R) \quad \text{avec } \mathbf{c} = \mathbf{a} - \mathbf{b} \quad (\text{A.5})$$

où

$$\begin{aligned} V_3^0(\mathbf{a}R, \mathbf{b}R, \mathbf{c}R)/R^3 &= \frac{Q}{6}abc + \frac{4}{3} \arctan\left(\frac{Qabc}{a^2 + b^2 + c^2 - 8}\right) - a\left(1 - \frac{a^2}{12}\right) \arctan\left(\frac{Qbc}{b^2 + c^2 - a^2}\right) \\ &\quad - b\left(1 - \frac{b^2}{12}\right) \arctan\left(\frac{Qca}{c^2 + a^2 - b^2}\right) - c\left(1 - \frac{c^2}{12}\right) \arctan\left(\frac{Qab}{a^2 + b^2 - c^2}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

¹Attention à la faute de frappe dans [101]

avec $0 \leq \arctan \leq \pi$ et

$$Q = \frac{\sqrt{R^2 - L^2}}{L} \tag{A.7}$$

$$L/R = \frac{abc}{\sqrt{(a+b+c)(a+b-c)(b+c-a)(c+a-b)}}$$

Pour ce modèle, la fonction de corrélation à deux points surface-volume est donnée par

$$F_{vs}(\mathbf{x}R) = \frac{\gamma}{\phi} F_{vv}(\mathbf{x}R) \times \begin{cases} \frac{1}{2} + \frac{x}{4} & \text{si } x \leq 2 \\ 1 & \text{si } x \geq 2 \end{cases} \tag{A.8}$$

et la fonction de corrélation à deux points surface-surface par

$$F_{ss}(\mathbf{x}R) = \frac{\gamma^2}{\phi^2} F_{vv}(\mathbf{x}R) \times \begin{cases} \left(\frac{1}{2} + \frac{x}{4}\right)^2 + \frac{\phi}{\gamma R} \frac{1}{2x} & \text{si } x \leq 2 \\ 1 & \text{si } x \geq 2 \end{cases} \tag{A.9}$$

Ces fonctions de corrélation à deux points sont données explicitement dans [67] pour une distribution bidisperse de sphères pénétrables et dans [101] pour une distribution polydisperse continue. Une généralisation de ces concepts à des fonctions de corrélation d'ordres supérieurs est présentée dans [99].

Annexe B

Opérateurs de Green

B.1 Propriétés des opérateurs de Green

Soit un domaine Ω occupé par un matériau élastique linéaire isotrope de raideur \mathbb{C}_0 . Les déplacements sont par ailleurs soumis à la condition d'encastrement (déplacement bloqué) sur la frontière de Ω . Les chargements considérés par la suite sont des champs de force volumique \mathbf{f} et/ou de polarisation $\boldsymbol{\tau}$. Le problème est défini comme

$$\begin{aligned}\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} &= \mathbf{0} & (\Omega) \\ \boldsymbol{\sigma} &= \mathbb{C}_0 : \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\tau} & (\Omega) \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= \operatorname{grad}^s \boldsymbol{\xi} & (\Omega) \\ \boldsymbol{\xi} &= \mathbf{0} & (\partial\Omega)\end{aligned}\tag{B.1}$$

B.1.1 Opérateur d'ordre 2

Considérons dans Ω un point \mathbf{y} d'application de charge et un point \mathbf{z} d'observation des déplacements induits. Soit $\boldsymbol{\xi}_y$ le champ de déplacement solution du problème (B.1) pour le chargement ($\mathbf{f} = \mathbf{F}\delta_y$, $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{0}$) où δ_y est la distribution de Dirac centrée au point \mathbf{y} . Par linéarité du problème d'élasticité, le déplacement $\boldsymbol{\xi}_y$ dépend linéairement de la force ponctuelle \mathbf{F} appliquée en \mathbf{y} . Il existe donc un opérateur d'ordre 2 noté $\mathbf{G}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y})$ tel que $\boldsymbol{\xi}_y(\mathbf{z}) = \mathbf{G}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{F}$. L'indice 0 fait référence à la raideur \mathbb{C}_0 du milieu homogène. Par superposition, le déplacement induit par un champ de force volumique \mathbf{f} s'obtient par le produit de convolution

$$\boldsymbol{\xi}(\mathbf{z}) = \int_{\Omega} \mathbf{G}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{y}) \, dV_y = (\mathbf{G}_0 * \mathbf{f})(\mathbf{z}).\tag{B.2}$$

L'application du théorème de Maxwell-Betti permet de montrer que le tenseur de Green est symétrique :

$$\mathbf{G}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y}) = \mathbf{G}_0(\mathbf{y}, \mathbf{z}).\tag{B.3}$$

B.1.2 Opérateurs d'ordre 3

Introduisons maintenant deux opérateurs de Green d'ordre trois. Le premier opérateur, noté $\mathcal{G}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y})$, permet d'évaluer la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$ induite par un champ de force volumique \mathbf{f} suivant :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{z}) = (\mathcal{G}_0 * \mathbf{f})(\mathbf{z}).\tag{B.4}$$

Lorsque \mathbf{z} tend vers \mathbf{y} , $\mathcal{G}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y})$ est singulier mais intégrable car en $\mathcal{O}(|\mathbf{z} - \mathbf{y}|^{-2})$. Malgré cette singularité, l'opérateur \mathcal{G}_0 peut être obtenu par dérivation directe du tenseur de Green (voir [100, Annexe A]) :

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y}) = (\operatorname{grad}_z \mathbf{G}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y}))^{s(1,2)}.\tag{B.5}$$

Le deuxième opérateur, noté $\mathcal{H}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y})$, retourne le déplacement en \mathbf{z} résultant de l'application d'un champ de polarisation $\boldsymbol{\tau}$ par

$$\boldsymbol{\xi}(\mathbf{z}) = (\mathcal{H}_0 * \boldsymbol{\tau})(\mathbf{z}). \quad (\text{B.6})$$

Montrons que l'opérateur \mathcal{H}_0 peut aussi s'exprimer en fonction du tenseur de Green $\mathbf{G}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y})$. Pour tout champ de polarisation $\boldsymbol{\tau}_2$ les deux problèmes qui correspondent aux chargements ($\mathbf{f} = \mathbf{0}, \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_2$) et ($\mathbf{f} = \mathbf{div}(\boldsymbol{\tau}_2), \boldsymbol{\tau} = \mathbf{0}$) dans (B.1) ont le même champ de déplacement solution $\boldsymbol{\xi}_2$. D'après la définition (B.2) et la condition d'encastrement sur $\partial\Omega$, il vient :

$$\boldsymbol{\xi}_2(\mathbf{z}) = \int_{\Omega} \mathbf{G}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{div}_y(\boldsymbol{\tau}_2)(\mathbf{y}) \, dV_y = - \int_{\Omega} (\mathbf{grad}_y \mathbf{G}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y}))^{s(2,3)} : \boldsymbol{\tau}_2(\mathbf{y}) \, dV_y \quad (\text{B.7})$$

où la symétrisation par rapport aux indices 2 et 3 est justifiée par la symétrie de la polarisation. Par identification avec (B.6), on obtient finalement

$$\mathcal{H}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y}) = - (\mathbf{grad}_y \mathbf{G}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y}))^{s(2,3)}. \quad (\text{B.8})$$

Enfin, les opérateurs \mathcal{G}_0 et \mathcal{H}_0 entretiennent une relation d'anti-symétrie. En effet, considérons les deux problèmes qui correspondent aux chargements ($\mathbf{f} = \mathbf{f}_1, \boldsymbol{\tau} = \mathbf{0}$) et ($\mathbf{f} = \mathbf{0}, \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_2$) dans (B.1), de solutions notées respectivement $(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\varepsilon}_1, \boldsymbol{\sigma}_1)$ et $(\boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\varepsilon}_2, \boldsymbol{\sigma}_2)$. Par symétrie du tenseur \mathbb{C}_0 , l'égalité $\mathbf{d}_2 : \boldsymbol{\sigma}_1 = \mathbf{d}_1 : \boldsymbol{\sigma}_2 - \mathbf{d}_1 : \boldsymbol{\tau}_2$ est immédiate. Son intégration sur Ω puis l'application du théorème de la divergence conduisent à :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mathbf{d}_2 : \boldsymbol{\sigma}_1 \, dV &= \int_{\Omega} \mathbf{d}_1 : \boldsymbol{\sigma}_2 \, dV - \int_{\Omega} \mathbf{d}_1 : \boldsymbol{\tau}_2 \, dV \\ - \int_{\Omega} \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{div} \boldsymbol{\sigma}_1 \, dV &= - \int_{\Omega} \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{div} \boldsymbol{\sigma}_2 \, dV - \int_{\Omega} \mathbf{d}_1 : \boldsymbol{\tau}_2 \, dV \\ \int_{\Omega} \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{f}_1 \, dV &= - \int_{\Omega} \mathbf{d}_1 : \boldsymbol{\tau}_2 \, dV, \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

ce qui correspond au théorème de Maxwell-Betti. En invoquant les définitions (B.4) et (B.6) et en omettant les indices 1 et 2, une relation d'antisymétrie au sens faible est finalement obtenue :

$$\forall \mathbf{f}, \forall \boldsymbol{\tau} \quad \int_{\Omega} \int_{\Omega} \mathbf{f}(\mathbf{z}) \cdot \mathcal{H}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y}) : \boldsymbol{\tau}(\mathbf{y}) \, dV_y \, dV_z = - \int_{\Omega} \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau}(\mathbf{y}) : \mathcal{G}_0(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{z}) \, dV_y \, dV_z \quad (\text{B.10})$$

ou encore, de façon compacte :

$$\forall \mathbf{f}, \forall \boldsymbol{\tau} \quad \overline{\mathbf{f} \cdot \mathcal{H}_0 * \boldsymbol{\tau}} = - \overline{\boldsymbol{\tau} : \mathcal{G}_0 * \mathbf{f}}. \quad (\text{B.11})$$

Au sens fort, la relation d'antisymétrie s'écrit

$$\mathcal{H}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y}) = -{}^t \mathcal{G}_0(\mathbf{y}, \mathbf{z}), \quad (\text{B.12})$$

avec la convention de transposition suivante

$${}^t \mathcal{G}_{ijk} = \mathcal{G}_{jki}. \quad (\text{B.13})$$

B.1.3 Opérateur d'ordre 4

L'opérateur de Green d'ordre quatre relie le champ de polarisation au taux de déformation par

$$\mathbf{d}(\mathbf{z}) = - (\boldsymbol{\Gamma}_0 * \boldsymbol{\tau})(\mathbf{z}), \quad (\text{B.14})$$

Suivant le même procédé que pour l'opérateur \mathcal{H}_0 , il paraît naturel de penser que l'opérateur de Green d'ordre 4 est relié au tenseur de Green par

$$\boldsymbol{\Gamma}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y}) = (\mathbf{grad}_z (\mathbf{grad}_y \mathbf{G}_0(\mathbf{z}, \mathbf{y})))^{s(1,2)(3,4)} \quad (\text{B.15})$$

Cependant, les dérivations dans l'expression ci-dessus doivent être prise avec soin au sens des distributions du fait des singularités en $\mathcal{O}(|\mathbf{z} - \mathbf{y}|^{-3})$ qui apparaissent quand \mathbf{z} tend vers \mathbf{y} .

B.2 Opérateurs de Green du milieu infini isotrope

Dans le cas où le domaine Ω est l'espace \mathbb{R}^3 entier, les opérateurs ne dépendent que de la différence entre le point d'observation et le point d'application de la charge. Par exemple, pour le tenseur de Green, $\mathbf{G}_0^\infty(\mathbf{z}, \mathbf{y}) = \mathbf{G}_0^\infty(\mathbf{z} - \mathbf{y})$. Dans la suite, on pose $\mathbf{r} = \mathbf{z} - \mathbf{y}$ et $r = |\mathbf{r}|$.

Le tenseur de Green du milieu isotrope infini est donné par (voir [34, 100])

$$\mathbf{G}_0^\infty(\mathbf{r}) = \frac{(3 - 4\nu_0)\mathbf{1} + \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}}{(1 - \nu_0)\mu_0 16\pi r} \quad (\text{B.16})$$

où μ_0 est le module de cisaillement, ν_0 le coefficient de Poisson et $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$.

Par dérivation directe, l'opérateur de Green d'ordre trois \mathcal{G}_0^∞ est

$$\mathcal{G}_0^\infty(\mathbf{r}) = \frac{(4\nu_0 - 3)\mathbf{1} \otimes \mathbf{n} + 2\mathbf{n} \otimes \mathbf{1} - 3\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}}{(1 - \nu_0)\mu_0 16\pi r^2} \quad (\text{B.17})$$

Comme mentionné précédemment, l'opérateur de Green d'ordre quatre doit être dérivé avec précaution. Il est la somme d'un terme régulier $\tilde{\Gamma}_0^\infty(\mathbf{r})$ défini en notation indicielle par [19, 100] :

$$16\pi\mu_0(1 - \nu_0)r^3\tilde{\Gamma}_{0,ijkl}^\infty(\mathbf{r}) = -\delta_{ij}\delta_{kl} + (1 - 2\nu_0)(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + 3(\delta_{ij}n_k n_l + \delta_{kl}n_i n_j) \\ + 3\nu_0(\delta_{ik}n_j n_l + \delta_{il}n_j n_k + \delta_{jk}n_i n_l + \delta_{jl}n_i n_k) - 15n_i n_j n_k n_l \quad (\text{B.18})$$

et d'un terme singulier $\mathbb{P}_0\delta(\mathbf{r})$ qui fait intervenir le tenseur de Hill \mathbb{P}_0 d'une inclusion sphérique dans le milieu de raideur \mathbb{C}_0 [34, 100] défini par :

$$\mathbb{P}_0 = \frac{1}{3\mu_0(1 - \nu_0)} \left(\frac{1 - 2\nu_0}{2} \mathbb{J} + \frac{4 - 5\nu_0}{5} \mathbb{K} \right) \quad (\text{B.19})$$

Le lecteur pourra se référer par exemple à [19, 100] pour une présentation plus détaillée.

B.3 Opérateurs de Green du milieu isotrope périodique

Dans cette section, on suppose que le domaine Ω est un parallélépipède rectangle dans l'espace de dimension d . Ses longueurs sont notées L_1, \dots, L_d dans les d directions d'une base carthésienne orthonormée $(\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_d)$.

B.3.1 Conventions utilisées pour les transformées de Fourier

Les conventions et propriétés sur les transformées de Fourier ci-dessus sont celles présentées dans [20].

Transformée continue

Soient \mathbf{k} un vecteur d'onde de norme $k = |\mathbf{k}|$ et $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$. La transformée de Fourier d'une fonction f est notée \hat{f} et est calculée suivant la convention :

$$\hat{f}(\mathbf{k}) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} f(\mathbf{z}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{z}) dV_{\mathbf{z}}. \quad (\text{B.20})$$

Si la fonction f est Ω -périodique, sa transformée de Fourier est discrète et la transformée de Fourier inverse prend la forme d'une somme :

$$f(\mathbf{z}) = \sum_{\mathbf{b} \in \mathbb{Z}^d} \hat{f}(\mathbf{k}_{\mathbf{b}}) \exp(i\mathbf{z} \cdot \mathbf{k}_{\mathbf{b}}) \quad (\text{B.21})$$

avec \mathbf{b} le multi-indice qui décrit \mathbb{Z}^d et

$$\mathbf{k}_{\mathbf{b}} = \frac{2\pi b_1}{L_1} \mathbf{e}_1 + \dots + \frac{2\pi b_d}{L_d} \mathbf{e}_d. \quad (\text{B.22})$$

Rappelons deux propriétés utiles de la transformation de Fourier :

1. la dérivation spatiale devient un simple produit

$$(\widehat{\text{grad}_z f})(\mathbf{k}) = -i\hat{f}(\mathbf{k}) \otimes \mathbf{k} \quad (\text{B.23})$$

2. le produit de convolution devient un simple produit

$$(\widehat{f * g}) = \hat{f}\hat{g} \quad (\text{B.24})$$

Transformée discrète

La transformée de Fourier discrète (DFT) d'une série de donnée $(f_{\beta})_{\beta \in \mathcal{I}}$ comprenant $N_1 \times \dots \times N_d = N$ termes avec $\mathcal{I} = [0..N_1 - 1] \times \dots \times [0..N_d - 1]$ est la série de donnée $(\hat{f}_{\mathbf{b}})_{\mathbf{b} \in \mathcal{I}}$ définie par

$$\hat{f}_{\mathbf{b}} = \sum_{\beta \in \mathcal{I}} f_{\beta} \exp\left(-2i\pi \left(\frac{\beta_1 b_1}{N_1} + \dots + \frac{\beta_d b_d}{N_d}\right)\right) \quad (\text{B.25})$$

La définition ci-dessus est en fait valable pour tout $\mathbf{b} \in \mathbb{Z}^d$ avec la relation de périodicité $\hat{f}_{\mathbf{b}=b_1, \dots, b_i, \dots, b_d} = \hat{f}_{b_1, \dots, b_i+N_i, \dots, b_d}$ pour tout $i \in [1, \dots, d]$. La transformation de Fourier discrète inverse (DFT⁻¹) est définie par

$$f_{\beta} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{b} \in \mathcal{I}} \hat{f}_{\mathbf{b}} \exp\left(2i\pi \left(\frac{\beta_1 b_1}{N_1} + \dots + \frac{\beta_d b_d}{N_d}\right)\right) \quad (\text{B.26})$$

Enfin, le théorème de Plancherel indique que le produit scalaire de deux séries de données peut se calculer indifféremment dans l'espace direct ou dans l'espace de Fourier :

$$\sum_{\beta \in \mathcal{I}} f_{\beta}^* g_{\beta} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{b} \in \mathcal{I}} \hat{f}_{\mathbf{b}}^* \hat{g}_{\mathbf{b}} \quad (\text{B.27})$$

B.3.2 Opérateurs continus

Dans l'espace de Fourier, l'expression du tenseur de Green est plus simple à établir que dans l'espace direct grâce aux propriétés (B.23) et (B.24). Dans la suite, le problème (B.1) est défini sur une cellule de périodicité Ω et la condition d'adhérence est remplacée par la condition de périodicité du déplacement, avec déformation moyenne nulle. Sous réserve d'une reproduction périodique des champs, les opérateurs de Green ne dépendent plus que de la différence entre le point d'observation et le point d'application de charge, de sorte que les produits dans (B.2), (B.4), (B.6) et (B.14) deviennent des produits de convolution classiques.

Considérons l'expression dans l'espace de Fourier du problème (B.1) (avec les conditions aux limites périodiques) pour un champ de force volumique \mathbf{f} quelconque en l'absence de polarisation, suivant [72]. Le cas du problème avec polarisation $\boldsymbol{\tau}$ sans force volumique se traite de manière identique en remplaçant \mathbf{f} par $\text{div } \boldsymbol{\tau}$ dans la suite. Dans l'espace de Fourier, cela revient à remplacer $\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{k})$ par $-i\hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{k}$. En l'absence de polarisation, le problème (B.1) avec les conditions aux limites périodiques s'écrit dans l'espace de Fourier comme suit :

$$\begin{aligned} -i\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{k} + \hat{\mathbf{f}} &= 0 \\ \hat{\boldsymbol{\sigma}} &= \mathbb{C}_0 : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \\ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} &= -i\hat{\boldsymbol{\xi}} \otimes \mathbf{k} \\ \hat{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{k} = \mathbf{0}) &= \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{k} = \mathbf{0}) = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

La combinaison de la compatibilité géométrique, de la loi de comportement et de l'équilibre conduit à l'équation de Navier :

$$(\mathbf{k} \cdot \mathbb{C}_0 \cdot \mathbf{k}) \cdot \hat{\boldsymbol{\xi}} = \hat{\mathbf{f}} \quad (\text{B.29})$$

L'équation de Navier fait apparaître le tenseur acoustique $\mathbf{K}_0 = \mathbf{k} \cdot \mathbb{C}_0 \cdot \mathbf{k}$. Or la transformée de Fourier de (B.2), qui correspond ici à un véritable produit de convolution dans l'espace direct, se réécrit $\hat{\boldsymbol{\xi}} = \hat{\mathbf{G}}_0 \cdot \hat{\mathbf{f}}$. Pour $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$, la transformée de Fourier du tenseur de Green est donc l'inverse du tenseur acoustique.

Pour inverser le tenseur acoustique, posons $\mathbb{C}_0 = 3\kappa_0\mathbb{J} + 2\mu_0\mathbb{K}$ et utilisons les propriétés :

$$\mathbf{k} \cdot \mathbb{J} \cdot \mathbf{k} = \frac{1}{3}\mathbf{k} \otimes \mathbf{k} \quad ; \quad \mathbf{k} \cdot \mathbb{K} \cdot \mathbf{k} = \frac{1}{6}\mathbf{k} \otimes \mathbf{k} + \frac{k^2}{2}\mathbf{I} \quad (\text{B.30})$$

Le tenseur acoustique est alors décomposé sur la base $(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}, \mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})$ en :

$$\mathbf{K}_0 = k^2 \left[\left(\kappa_0 + \frac{4}{3}\mu_0 \right) \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + \mu_0 (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \right], \quad (\text{B.31})$$

ce qui permet l'inversion immédiate de \mathbf{K}_0

$$\mathbf{K}_0^{-1} = \hat{\mathbf{G}}_0(\mathbf{k}) = \frac{1}{k^2} \left[\left(\kappa_0 + \frac{4}{3}\mu_0 \right)^{-1} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + \frac{1}{\mu_0} (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \right]. \quad (\text{B.32})$$

Après simplification, le tenseur de Green est finalement :

$$\hat{\mathbf{G}}_0(\mathbf{k}) = \begin{cases} \frac{1}{\mu_0 k^2} \left(\mathbf{1} - \frac{1}{2(1-\nu_0)} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \right) & \text{si } \mathbf{k} \neq \mathbf{0}, \\ \mathbf{0} & \text{si } \mathbf{k} = \mathbf{0}. \end{cases} \quad (\text{B.33})$$

Cette expression est valable pour des problèmes tridimensionnels ou en déformation plane. L'annulation en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ correspond à la condition de nullité du déplacement moyen.

En remplaçant $\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{k})$ par $-i\hat{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{k}$ dans le raisonnement précédant, la transformée de Fourier de l'opérateur d'ordre trois \mathcal{H}_0 s'obtient alors comme

$$\hat{\mathcal{H}}_0(\mathbf{k}) = -i\hat{\mathbf{G}}_0(\mathbf{k}) \overset{s}{\otimes} \mathbf{k}.$$

Par dérivation du tenseur de Green, la transformée de Fourier de l'opérateur d'ordre trois \mathcal{G}_0 est directement

$$\hat{\mathcal{G}}_0(\mathbf{k}) = -i\mathbf{k} \overset{s}{\otimes} \hat{\mathbf{G}}_0(\mathbf{k}),$$

et celle l'opérateur de Green d'ordre quatre

$$\hat{\mathbf{\Gamma}}_0(\mathbf{k}) = \mathbf{k} \overset{s}{\otimes} \hat{\mathbf{G}}_0(\mathbf{k}) \overset{s}{\otimes} \mathbf{k}.$$

Toutes ces expressions ne sont valables que si $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$. Tous les opérateurs ci-dessus s'annulent en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ pour vérifier les conditions de déformation et de déplacement moyens nuls.

B.3.3 Opérateurs discrétisés

Les formulations variationnelles présentées au chapitre 2 amènent à calculer des termes quadratiques qui impliquent les différents opérateurs de Green, de la forme $\overline{\mathbf{f} \cdot \mathcal{G}_0 * \mathbf{f}}$, $\overline{\boldsymbol{\tau} : \mathbf{\Gamma}_0 * \boldsymbol{\tau}}$ ou $\overline{\boldsymbol{\tau} : \mathcal{G}_0 * \mathbf{f}}$ par exemple. La situation où les chargements \mathbf{f} et $\boldsymbol{\tau}$ sont choisis constants par morceaux suivant une grille de discrétisation régulière est ici considérée. Dans la suite, la procédure de discrétisation de l'opérateur de Green d'ordre quatre introduite par Brisard et Dormieux [20, 21] est aussi appliquée aux opérateurs d'ordre deux et trois.

Grille de discrétisation

Le domaine Ω est divisé suivant une grille régulière en $N_1 \times \dots \times N_d = N$ sous domaines Ω_{β} (pixels pour $d = 2$, voxels pour $d = 3$). La position de ces sous domaines dans les d directions de l'espace est indiquée par le multi-indice $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_d) \in \mathcal{I} = [0..N_1 - 1] \times \dots \times [0..N_d - 1]$. Chaque domaine Ω_{β} est un parallélépipède rectangle de taille (ou résolution) identique r_1, \dots, r_d suivant les d axes du repère carthésien orthonormé, avec $r_i = L_i/N_i$. La fonction indicatrice χ^{β} d'un voxel Ω_{β} est définie par

$$\chi^{\beta}(z_1 \mathbf{e}_1 + \dots + z_d \mathbf{e}_d) = \begin{cases} 1 & \text{si } \forall i, 2|z_i - r_i \beta_i| \leq r_i, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Considérons maintenant le cas de champs de force volumique et de polarisation constants par voxel. Plus précisément, à toutes séries de données $(\mathbf{f}_{\beta})_{\beta \in \mathcal{I}}$ et $(\boldsymbol{\tau}_{\beta})_{\beta \in \mathcal{I}}$ sont associées les champs de force volumique et de polarisation suivants :

$$\mathbf{f}(\mathbf{z}) = \sum_{\beta \in \mathcal{I}} \mathbf{f}_{\beta} \chi^{\beta}(\mathbf{z}) \quad ; \quad \boldsymbol{\tau}(\mathbf{z}) = \sum_{\beta \in \mathcal{I}} \boldsymbol{\tau}_{\beta} \chi^{\beta}(\mathbf{z}). \quad (\text{B.34})$$

Suivant Brisard et Dormieux [20], la transformée de Fourier continue (de la reproduction périodique) du champ \mathbf{f} est reliée à la transformée de Fourier discrète de la série de données $(\mathbf{f}_{\beta})_{\beta \in \mathcal{I}}$ par

$$\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{k}_{\mathbf{b}}) = \left[\prod_{i \in (1, \dots, d)} \frac{1}{N_i} \text{sinc} \left(\frac{\pi b_i}{N_i} \right) \right] \hat{\mathbf{f}}_{\mathbf{b}} \quad \text{avec} \quad (\forall \mathbf{b} \in \mathbb{Z}^d), \quad (\text{B.35})$$

et de même pour le champ de polarisation.

Discrétisation consistente des opérateurs

Considérons maintenant l'évaluation du terme quadratique $\overline{\boldsymbol{\tau} : \mathcal{G} * \mathbf{f}}$, par exemple. Par propriétés de la transformée de Fourier des champs périodiques, le terme quadratique se réexprime :

$$\overline{\boldsymbol{\tau} : \mathcal{G} * \mathbf{f}} = \sum_{\mathbf{b} \in \mathbb{Z}^d} \hat{\boldsymbol{\tau}}^*(\mathbf{k}_{\mathbf{b}}) : \hat{\mathcal{G}}(\mathbf{k}_{\mathbf{b}}) \cdot \hat{\mathbf{f}}(\mathbf{k}_{\mathbf{b}}),$$

où l'exposant $*$ indique le complexe conjugué et $\mathbf{k}_{\mathbf{b}}$ est un vecteur d'onde. Remarquons que si le champ \mathbf{f} ou $\boldsymbol{\tau}$ est constant, la seule valeur non nulle de sa transformée de Fourier est obtenue pour $\mathbf{k}_{\mathbf{b}} = \mathbf{0}$. Or les opérateurs de Green s'annulent pour cette valeur du vecteur d'onde : le terme quadratique est alors nul. En tirant parti de la relation (B.35) et de la périodicité des transformées de Fourier discrètes, la somme sur \mathbb{Z}^d du terme peut se réorganiser sous la forme :

$$\overline{\boldsymbol{\tau} : \mathcal{G} * \mathbf{f}} = \sum_{\mathbf{b} \in \mathcal{I}} \hat{\boldsymbol{\tau}}_{\mathbf{b}}^* : \hat{\mathcal{G}}_{\mathbf{b}}^c \cdot \hat{\mathbf{f}}_{\mathbf{b}} \quad (\text{B.36})$$

où $\hat{\mathcal{G}}_{\mathbf{b}}^c$ est la transformée de Fourier discrète de l'opérateur de Green (ici d'ordre trois) définie par :

$$\hat{\mathcal{G}}_{\mathbf{b}}^c = \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^d} \left[\prod_{i \in (1, \dots, d)} \text{sinc} \left(\frac{\pi b_i}{N_i} \right) \right]^2 \hat{\mathcal{G}}(\mathbf{k}_{b_1 + n_1 N_1, \dots, b_d + n_d N_d}), \quad (\text{B.37})$$

Cette discrétisation de l'opérateur de Green, énergétiquement *consistante*, est repérée par l'exposant c . Elle est à opposer à l'opérateur de Green *tronqué* utilisé classiquement [71, 72]. Une comparaison du comportement de ces deux opérateurs est détaillée dans [20, 21].

Introduisons le produit de convolution discret \otimes de deux séries de données défini de sorte que

$$\text{DFT} \left[(\mathcal{G}^c \otimes \mathbf{f})_\beta \right] = (\widehat{\mathcal{G}^c \otimes \mathbf{f}})_\beta = \hat{\mathcal{G}}_b^c \cdot \hat{\mathbf{f}}_b.$$

Avec ces notations, (B.36) peut se réécrire à l'aide du théorème de Plancherel (B.27) comme :

$$\overline{\boldsymbol{\tau} : \mathcal{G} * \mathbf{f}} = \frac{1}{N} \sum_{\beta \in \mathcal{I}} \tau_\beta : (\mathcal{G}^c \otimes \mathbf{f})_\beta. \quad (\text{B.38})$$

Sous réserve de savoir calculer $\hat{\mathcal{G}}_b^c$, le produit de convolution discret qui intervient dans (B.38) peut être évalué numériquement avec une grande efficacité par un aller-retour dans l'espace de Fourier :

1. Appliquer la transformation de Fourier discrète : $(\hat{\mathbf{f}}_b) = \text{DFT} [(\mathbf{f}_\beta)]$
2. Calculer le produit direct $\hat{\mathcal{G}}_b^c \cdot \hat{\mathbf{f}}_b$ pour tout $\mathbf{b} \in \mathcal{I}$
3. Appliquer la transformation de Fourier discrète inverse : $\left((\mathcal{G}^c \otimes \mathbf{f})_\beta \right) = \text{DFT}^{-1} \left[\left(\hat{\mathcal{G}}_b^c \cdot \hat{\mathbf{f}}_b \right) \right]$

En pratique, les transformées de Fourier discrètes sont calculées par l'algorithme de la transformée de Fourier rapide (FFT : Fast Fourier Transform).

Cette méthode permet de calculer de manière *exacte* les termes quadratiques qui nous intéressent pour des champs de force volumique et de polarisation constants par voxels. Cependant, le calcul des opérateurs de Green discrétisés *consistentes* définis par (B.37) fait intervenir des sommes infinies. Pour l'opérateur de Green d'ordre quatre, la convergence de ces séries est particulièrement lente et leur évaluation hors d'attente pour une grille de discrétisation tridimensionnelle fine.

Discrétisation filtrée, non consistente des opérateurs

Afin de contourner cette difficulté, Brisard et Dormieux [21] a introduit une approximation élégante et efficace des opérateurs de Green discrétisés consistents. L'idée consiste à appliquer l'opérateur de Green tronqué sur une grille de discrétisation deux fois plus fine que la grille de discrétisation des champs \mathbf{f} et $\boldsymbol{\tau}$, puis à projeter le résultat sur la grille la plus grossière. Le but est de filtrer les hautes fréquences de l'opérateur tronqué, qui sont polluées. Cette opération est réalisée théoriquement, et en pratique seule la grille la plus grossière est utilisée. Elle permet de définir un opérateur de Green discrétisé *filtré, non consistant* :

$$\hat{\mathcal{G}}_b^{\text{fnc}} = \sum_{\mathbf{n} \in \{0,1\}^d} \left[\prod_{i \in \{1, \dots, d\}} \cos \left(\frac{\pi b_i}{2N_i} \right) \right]^2 \hat{\mathcal{G}}(\mathbf{k}_{b_1+n_1N_1, \dots, b_d+n_dN_d}), \quad (\text{B.39})$$

Les sommes infinies dans (B.37) sont maintenant réduites à une somme de 2^d termes. À la différence de l'opérateur consistant, l'opérateur \mathcal{G}^{fnc} n'a donc pas besoin d'être stocké en mémoire : il peut être calculé efficacement "à la volée" (quitte à stocker seulement les cosinus qui interviennent en préfacteur dans (B.39)).

La comparaison avec les opérateurs discrétisés tronqués ou consistents proposée dans [21] montre que l'opérateur filtré, non consistant se comporte aussi bien que l'opérateur consistant : la convergence est aussi rapide, les champs de déformation et de contrainte aussi bien approximés. En particulier, les champs ne présentent pas les oscillations parfois observées lorsque l'opérateur tronqué est utilisé.

En conséquence, toutes les applications numériques présentées dans ce mémoire sont basées sur les opérateurs de Green \mathcal{G}_0 , \mathcal{G}_0 , et Γ_0 *filtrés, non consistents*.

Annexe C

Polynômes et fonctions associées de Legendre, fonctions de Gegenbauer

Les fonctions de Gegenbauer d'ordre n de premier G_n et second H_n type sont étroitement liées aux fonctions de Legendre P_n et Q_n dont les expressions sont rappelées ci dessous *pour les coordonnées prolates*.

C.1 Polynômes et fonctions associées de Legendre

Les polynômes de Legendre P_n d'ordre n vérifient

$$P_0(x) = 1$$
$$P_n(x) = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \binom{-n-1}{k} \left(\frac{1-x}{2}\right)^k \quad (n \geq 1)$$

Les polynômes de Legendre associés Q_n d'ordre n vérifient

$$Q_0(x) = \begin{cases} \operatorname{arccoth}(x) & x > 1 \\ \operatorname{arctanh}(x) & -1 \leq x \leq 1 \end{cases}$$
$$Q_1(x) = xQ_0(x) - 1$$
$$Q_n(x) = P_n(x)Q_0(x) - \sum_{m=1}^n \frac{P_{m-1}(x)P_{n-m}(x)}{m} \quad (n \geq 2)$$

Les fonctions de Legendre associées du premier type P_n^m sont définies pour n et m dans \mathbb{N} par [1]

$$P_n^0(x) = P_n(x)$$
$$P_n^m(x) = \begin{cases} \sqrt{x^2-1}^m \frac{d^m P_n(x)}{d x^m} & x > 1 \\ (-\sqrt{1-x^2})^m \frac{d^m P_n(x)}{d x^m} & -1 \leq x \leq 1 \end{cases}$$

De même, les fonctions de Legendre associées du second type Q_n^m sont définies pour n et m dans \mathbb{N} par

$$Q_n^0(x) = Q_n(x)$$
$$Q_n^m(x) = \begin{cases} \sqrt{x^2-1}^m \frac{d^m Q_n(x)}{d x^m} & x > 1 \\ (-\sqrt{1-x^2})^m \frac{d^m Q_n(x)}{d x^m} & -1 \leq x \leq 1 \end{cases}$$

C.2 Fonctions de Gegenbauer

Les fonctions de Gegenbauer d'ordre n de premier G_n et second H_n type sont étroitement liées aux fonctions de Legendre P_n et Q_n et sont définies pour n dans \mathbb{N} par [27]

$$\begin{aligned} G_0(x) = -H_1(x) = 1 & \quad ; \quad G_1(x) = H_0(x) = -x \\ G_n(x) = \frac{P_{n-2}(x) - P_n(x)}{2n-1} & \quad ; \quad H_n(x) = \frac{Q_{n-2}(x) - Q_n(x)}{2n-1} \quad (n \geq 2) \end{aligned}$$

Annexe D

Résultats expérimentaux

D.1 Porosité

échantillon	argon				eau
	confinement (MPa)				0
	1	2	9	2	
porosité (%)					
cap1-MIL-12	-	-	-	-	10,6
cap1-MIL-13	-	11,84	10,67	11,53	9,6
cap1-MIL-14	-	12,43	11,69	12,15	8,9
cap1-MIL-20	-	-	-	-	14,5
cap1-MIL-21	-	-	-	-	13,3
cap1-MIL-22	-	12,70	11,79	12,50	10,2
cap1-MIL-23	-	11,65	10,81	11,51	9,0
cap1-MIL-24	-	11,75	11,13	11,77	9,1
cap1-HAU-1	-	-	-	-	15,0
cap1-HAU-2	-	-	-	-	17,6
cap1-HAU-5	-	-	-	-	12,8
cap1-HAU-7	-	-	-	-	17,5
LW6-21	26,1	-	-	-	16,5
LW6-P1	21,4	-	-	-	-
SK2-K3	-	-	-	-	12,7 ; 15 ; 17,5 ; 17,6
SK2-K5	-	-	-	-	10,9
SK2-K11	-	-	-	-	9,1

TAB. D.1: Mesures de porosité à l'eau, sans confinement et au gaz, avec confinement

D.2 Perméabilité

D.2.1 Effet du confinement à l'état sec

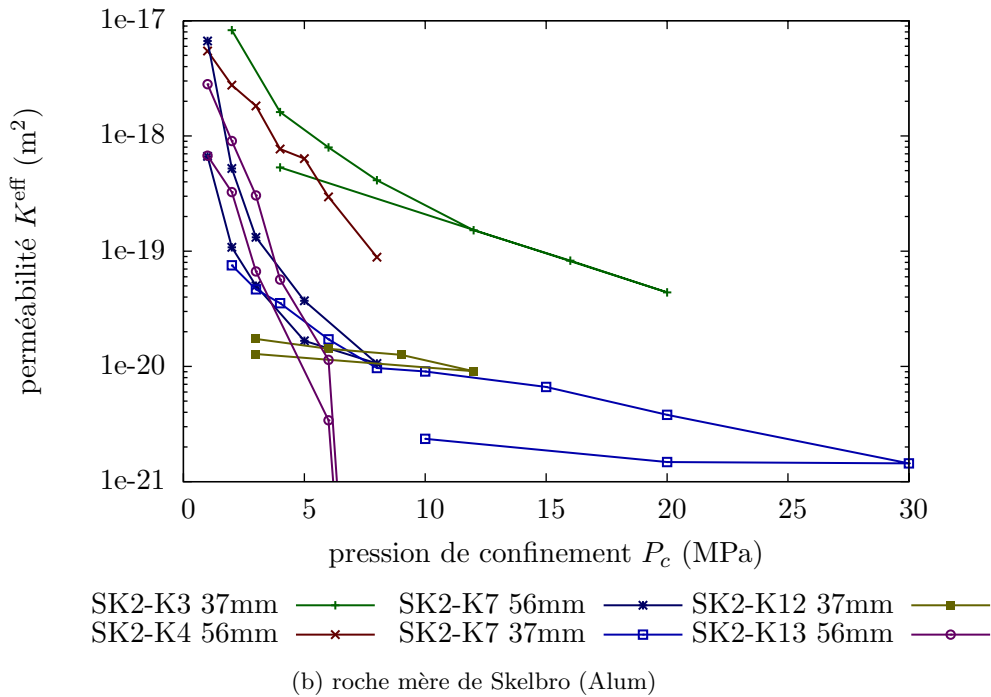
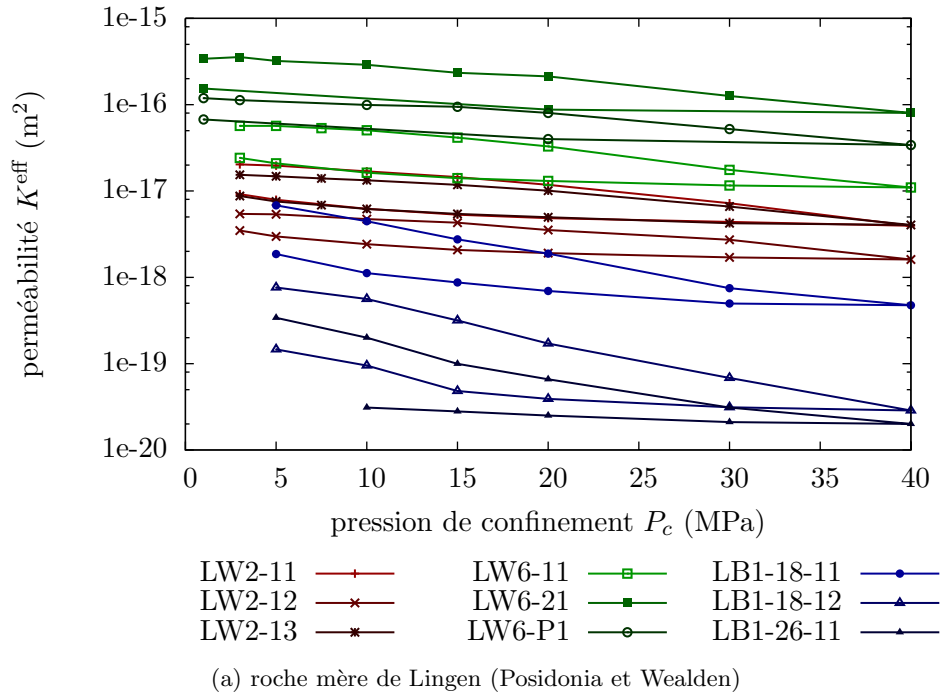


FIG. D.1: Diminution de la perméabilité au gaz avec le confinement.

D.2.2 Effet du glissement aux parois à l'état sec

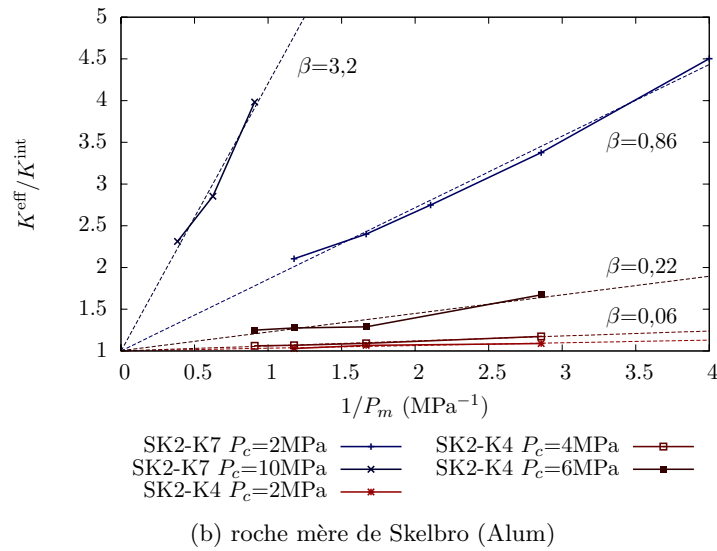
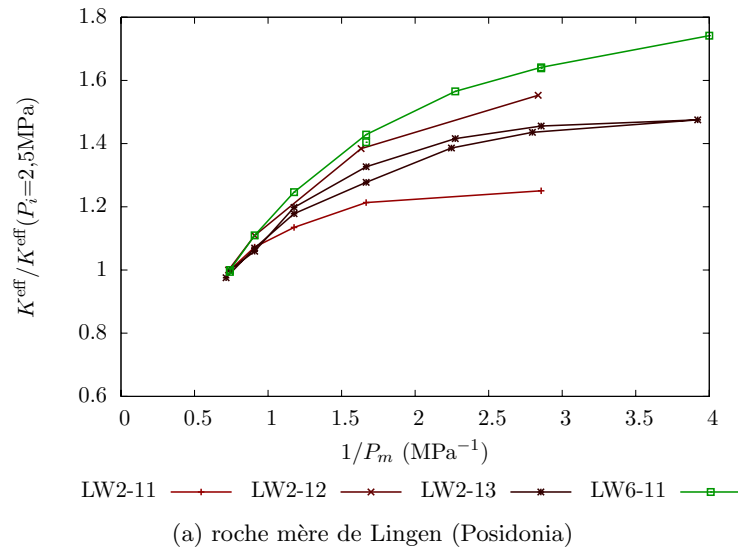


FIG. D.2: Effet du glissement aux parois en fonction de la pression de gaz.

Échantillon	Pression de confinement (MPa)				β (MPa)	
	2		9			
	$K^{\text{eff}}(P_i = 1\text{MPa}) \text{ (m}^2\text{)}$		$K^{\text{int}} \text{ (m}^2\text{)}$			
cap1-MIL-12	$1,44 \cdot 10^{-18}$	$1,28 \cdot 10^{-18}$	$2,8 \cdot 10^{-19}$	$2,3 \cdot 10^{-19}$	2,4	2,8
cap1-MIL-13	$1,20 \cdot 10^{-18}$	$1,12 \cdot 10^{-18}$	$1,8 \cdot 10^{-19}$	$1,6 \cdot 10^{-19}$	3,4	3,6
cap1-MIL-14	$1,21 \cdot 10^{-18}$	$1,13 \cdot 10^{-18}$	$1,9 \cdot 10^{-19}$	$1,8 \cdot 10^{-19}$	3,3	3,2
cap1-MIL-20	$9,41 \cdot 10^{-18}$	$3,94 \cdot 10^{-18}$	$7,0 \cdot 10^{-18}$	$2,4 \cdot 10^{-18}$	0,23	0,40
cap1-MIL-21	$2,15 \cdot 10^{-18}$	$1,83 \cdot 10^{-18}$	$5,5 \cdot 10^{-19}$	$4,4 \cdot 10^{-19}$	1,7	1,9
cap1-MIL-22	$1,36 \cdot 10^{-18}$	$1,26 \cdot 10^{-18}$	$4,2 \cdot 10^{-19}$	$3,8 \cdot 10^{-19}$	1,1	1,0
cap1-MIL-23	$1,13 \cdot 10^{-18}$	$1,05 \cdot 10^{-18}$	$1,8 \cdot 10^{-19}$	$1,6 \cdot 10^{-19}$	3,3	3,3
cap1-MIL-24	$1,16 \cdot 10^{-18}$	$1,09 \cdot 10^{-18}$	$1,9 \cdot 10^{-19}$	$2,1 \cdot 10^{-19}$	3,0	2,5

TAB. D.2: Perméabilité au gaz à l'état sec

D.2.3 Effet de la saturation en eau

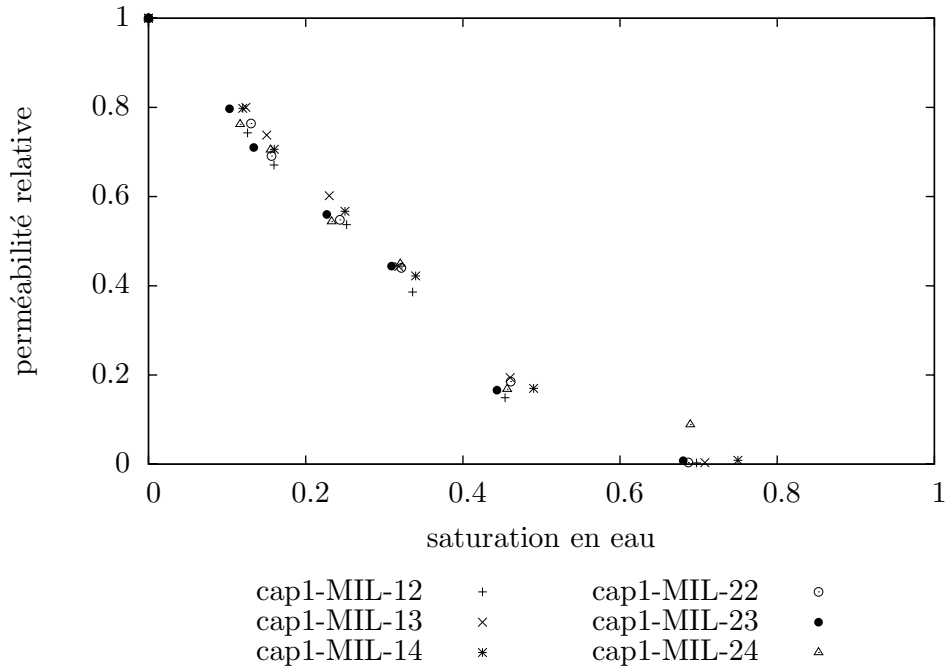
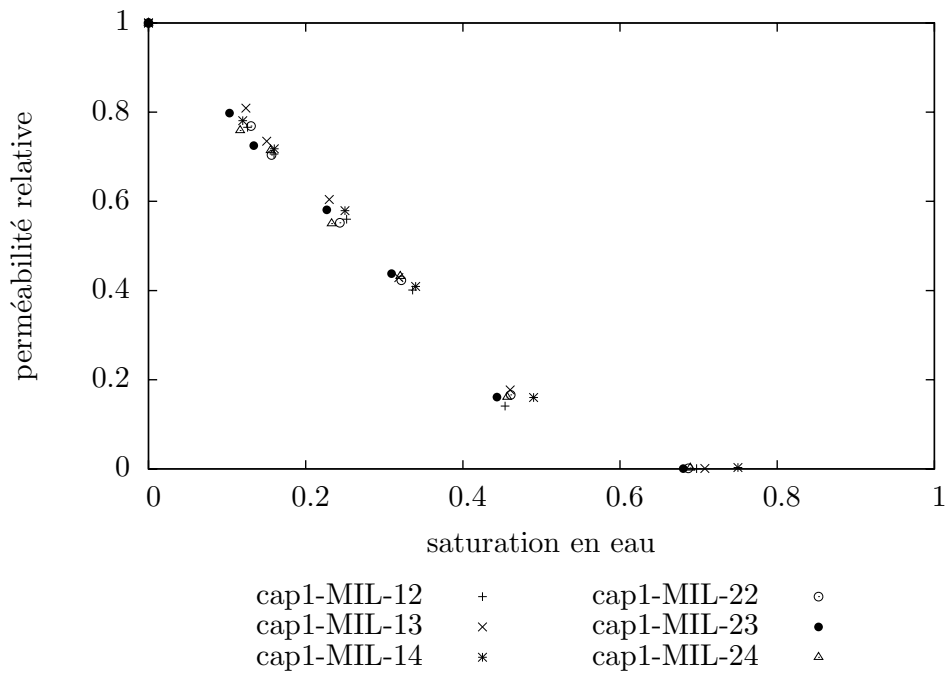
(a) $P_c = 2$ MPa(b) $P_c = 9$ MPa

FIG. D.3: Perméabilité relative en fonction de la saturation. La pression d'Argon en injection est 1 MPa, drainage à pression atmosphérique. Chaque type de point correspond à un échantillon. Seuls les 6 échantillons sains sur les 8 échantillons sont représentés.

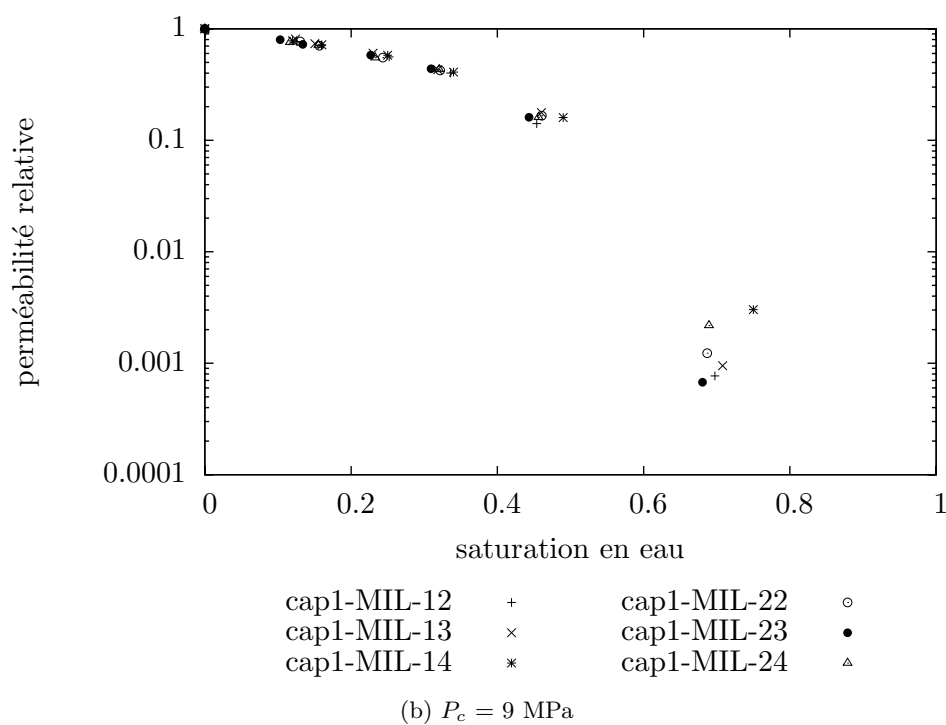
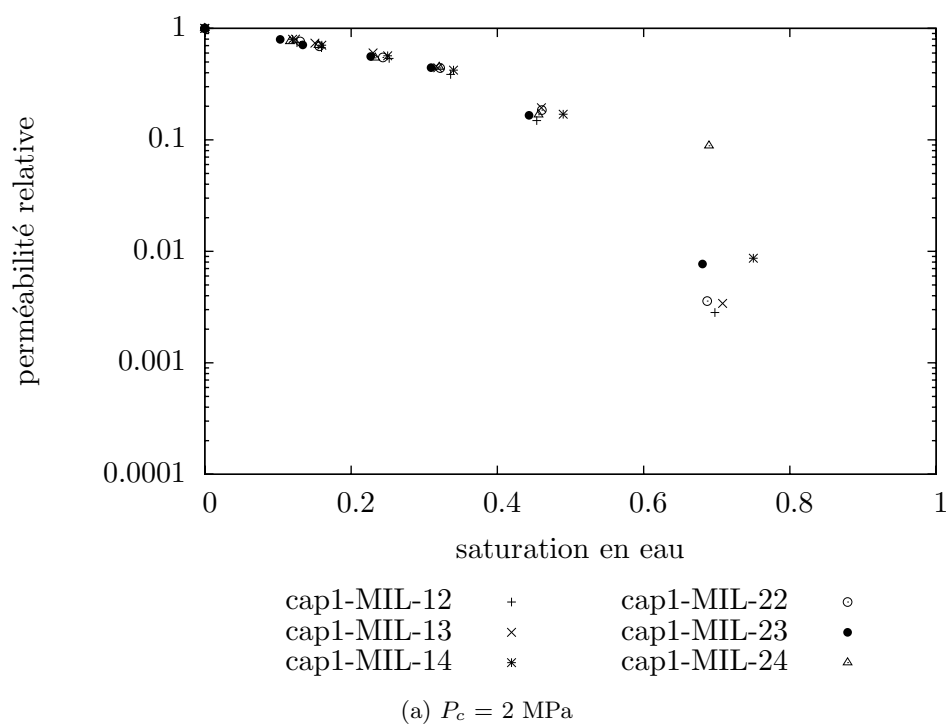


FIG. D.4: Perméabilité relative en fonction de la saturation, échelle logarithmique. La pression d'Argon en injection est 1 MPa, drainage à pression atmosphérique. Chaque type de point correspond à un échantillon. Seuls les 6 échantillons sains sur les 8 échantillons sont représentés.

D.2.4 Endommagement par un cycle hydrique

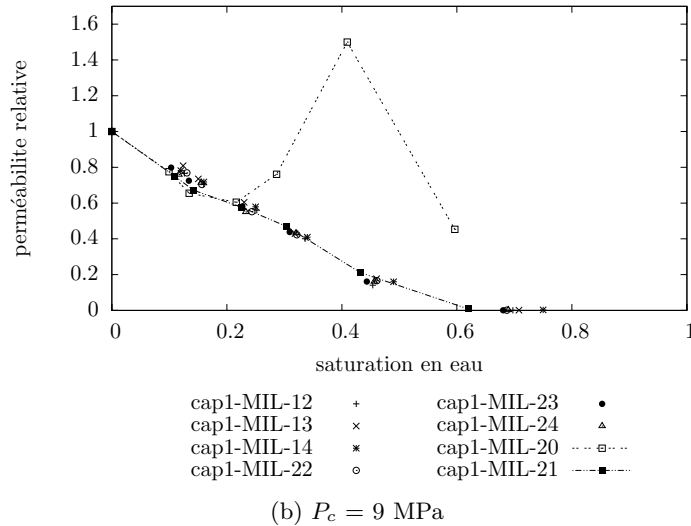
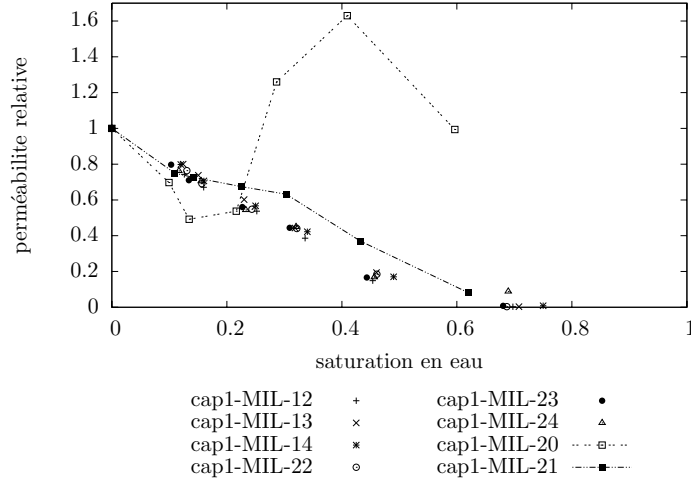


FIG. D.5: Perméabilité relative en fonction de la saturation. La pression d'Argon en injection est 1 MPa, drainage à pression atmosphérique. Chaque type de point correspond à un échantillon.

cycle saturation :	β (MPa)			
	avant		après	
P_c (MPa) =	2	9	2	9
cap1-MIL-13	3.4	3.6	2.7	2.0
cap1-MIL-14	3.3	3.2	1.9	2.1
cap1-MIL-20	0.23	0.40	0.14	0.25
cap1-MIL-21	1.7	1.9	0.19	0.95

TAB. D.3: Augmentation du coefficient de Klinkenberg après un cycle hydrique

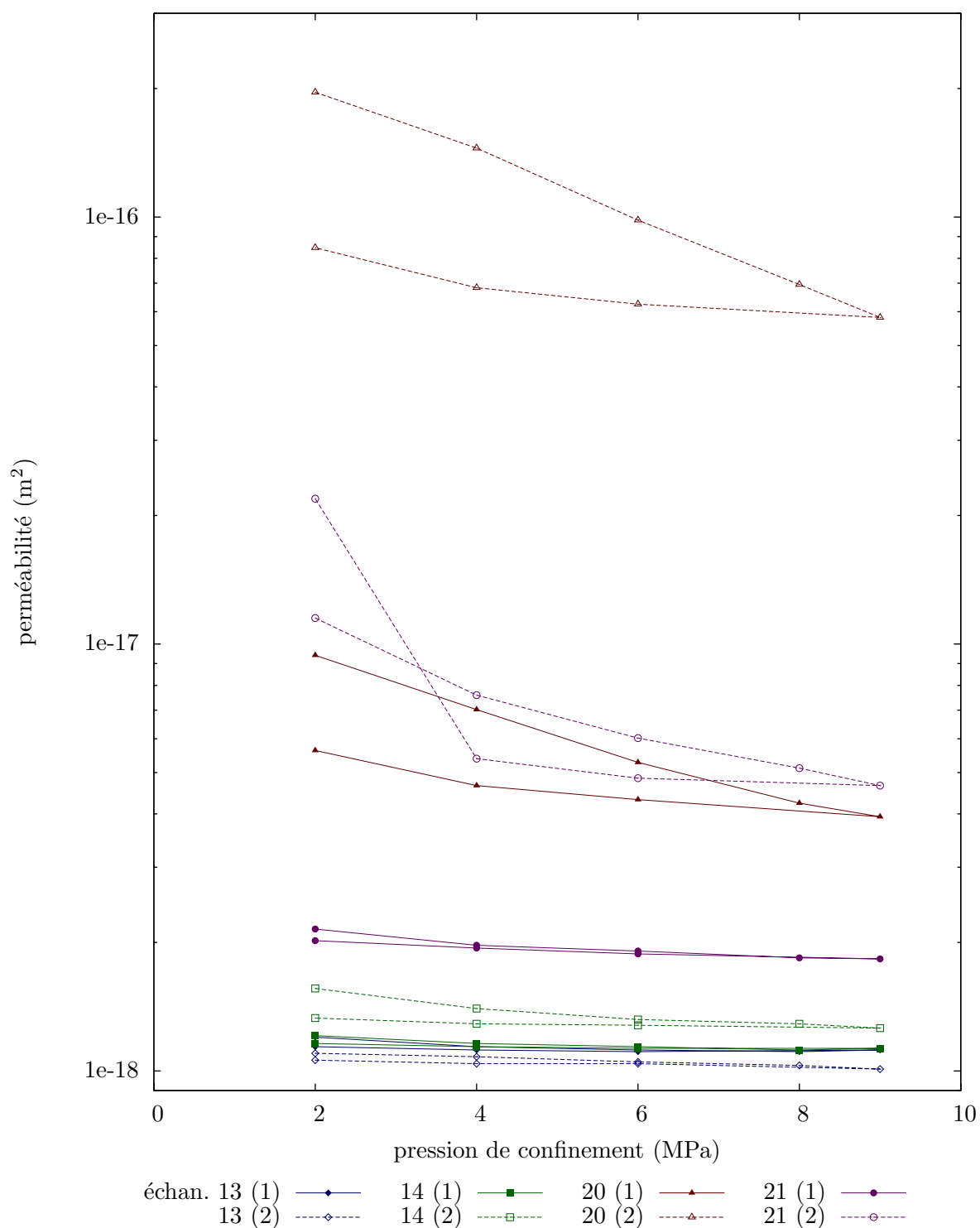


FIG. D.6: Perméabilité effective au gaz en fonction de la pression de confinement, avant (1) et après (2) cycle de saturation, pour les 4 échantillons cap1-MIL-XX avec $XX=13, 14, 20$ et 21 . La pression d'Argon en injection est 1 MPa , drainage à pression atmosphérique.

Annexe E

Convergence de l'algorithme d'Uzawa appliqué au lagrangien augmenté

Cette annexe présente une étude de la convergence de l'algorithme de résolution utilisé au chapitre 5. La convergence est étudiée dans le cas où $\partial\pi(\mathbf{d})/\partial\mathbf{d}$ conduit à une loi de comportement linéaire ($\mathbb{C}(\mathbf{d}) = \mathbb{C}$).

L'algorithme de Uzawa peut être vu comme un algorithme itératif de type point fixe. En effet, à chaque itération i , $\boldsymbol{\lambda}^i$ et \mathbf{e}^i sont connus et reliés par $\boldsymbol{\lambda}^i = \partial\pi(\mathbf{e}^i)/\partial\mathbf{e} = \mathbb{C} : \mathbf{e}^i$ d'après (5.43). À l'itération suivante, d'après (5.42)

$$(\mathbb{C} + \mathbb{C}_0) : \mathbf{e}^{i+1} = \mathbb{C} : \mathbf{e}^i + \mathbb{C}_0 : [\mathbf{D} - \boldsymbol{\Gamma}_0 * (\delta\mathbb{C} : \mathbf{e}^i)] \quad \text{avec } \delta\mathbb{C} = \mathbb{C} - \mathbb{C}_0 \quad (\text{E.1})$$

Analysons les conditions de convergence de ce point fixe. Dans la suite, \mathbf{e} et \mathbb{C} sont des champs continus (i.e. non discrets) définis sur Ω . L'opérateur linéaire associé au point fixe ci-dessus est

$$L(\mathbf{e}) = (\mathbb{C} + \mathbb{C}_0)^{-1} : [\mathbb{C} : \mathbf{e} - \mathbb{C}_0 : \boldsymbol{\Gamma}_0 * (\delta\mathbb{C} : \mathbf{e})] \quad (\text{E.2})$$

La convergence du point fixe est assurée si les valeurs propres de L appartiennent à $] - 1; 1]$ [70]. Étudions les valeurs propres de L par un raisonnement analogue à [66]. Soit \mathbf{e}_α un vecteur propre de L et α la valeur propre associée, alors

$$L(\mathbf{e}_\alpha) = \alpha\mathbf{e}_\alpha \Leftrightarrow \mathbb{T} : \mathbf{e}_\alpha = -\boldsymbol{\Gamma}_0 * (\delta\mathbb{C} : \mathbf{e}_\alpha) \quad (\text{E.3})$$

avec

$$\mathbb{T} = (\alpha\mathbb{I} + (\alpha - 1)\mathbb{C}_0^{-1} : \mathbb{C}). \quad (\text{E.4})$$

Par propriété de l'opérateur de Green, il apparaît dans (E.3) que le champ $\mathbb{T} : \mathbf{e}_\alpha$ est géométriquement compatible et de moyenne nulle. Or tout champ $\boldsymbol{\varepsilon}$ géométriquement compatible vérifie la propriété [66] :

$$\boldsymbol{\varepsilon} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{\Gamma}_0 * (\mathbb{C}_0 : \boldsymbol{\varepsilon}). \quad (\text{E.5})$$

Par conséquent, le vecteur propre \mathbf{e}_α vérifie

$$\boldsymbol{\Gamma}_0 * (\mathbb{C}'' : \mathbf{e}_\alpha) = 0 \quad \text{avec } \mathbb{C}'' = \delta\mathbb{C} + \mathbb{C}_0 : \mathbb{T} = \alpha\mathbb{C} + (\alpha - 1)\mathbb{C}_0 \quad (\text{E.6})$$

Suivant [66, 70], $\mathbb{C}'' : \mathbf{e}_\alpha$ est donc un champ de contrainte équilibré. Introduisons maintenant la raideur $\mathbb{C}' = \mathbb{C}'' : \mathbb{T}^{-1}$. Pour résumer, il a été montré que :

- le champ de déformation $\mathbf{d}_\alpha = \mathbb{T} : \mathbf{e}_\alpha$ est géométriquement compatible avec un champ de déplacement \mathbf{u}_α qui est cinématiquement admissible avec une déformation macroscopique nulle pour les conditions aux limites périodiques,

- le champ de contrainte $\boldsymbol{\sigma}_\alpha = \mathbb{C}' : \mathbf{d}_\alpha$ est à divergence nulle et périodique donc statiquement admissible.

Le couple $(\mathbf{u}_\alpha, \boldsymbol{\sigma}_\alpha)$ est donc la solution d'un problème d'homogénéisation défini sur Ω avec raideur hétérogène \mathbb{C}' , conditions aux limites périodiques et déformation moyenne nulle. Or si la forme quadratique associée au champ \mathbb{C}' est définie positive ou définie négative, ce problème admet pour unique solution $\mathbb{T} : \mathbf{e}_\alpha = 0$. Pour que \mathbf{e}_α ne soit pas nul, il faut donc nécessairement que la forme quadratique associée à \mathbb{C}' ne soit ni définie positive ni définie négative ou que \mathbb{T} s'annule. Dans le cas où \mathbb{C} et \mathbb{C}_0 sont isotropes,

$$\mathbf{e}_\alpha \neq \mathbf{0} \Leftrightarrow \begin{cases} \exists \mathbf{z}_1 \in \Omega, k_0 \frac{\alpha k + (\alpha - 1)k_0}{\alpha k_0 + (\alpha - 1)k} \leq 0 \text{ ou } \mu_0 \frac{\alpha \mu + (\alpha - 1)\mu_0}{\alpha \mu_0 + (\alpha - 1)\mu} \leq 0 \\ \exists \mathbf{z}_2 \in \Omega, k_0 \frac{\alpha k + (\alpha - 1)k_0}{\alpha k_0 + (\alpha - 1)k} \geq 0 \text{ ou } \mu_0 \frac{\alpha \mu + (\alpha - 1)\mu_0}{\alpha \mu_0 + (\alpha - 1)\mu} \geq 0 \end{cases} \quad (\text{E.7})$$

Finalement, les valeurs propres de L sont bornées car

$$\mathbf{e}_\alpha \neq \mathbf{0} \Leftrightarrow \alpha_{\min} \leq \alpha \leq \alpha_{\max} \quad (\text{E.8})$$

avec

$$\begin{aligned} \alpha_{\min} &= \min \left\{ \min_{\mathbf{z} \in \Omega} \left(\frac{1}{1+x} \right), \min_{\mathbf{z} \in \Omega} \left(\frac{1}{1+1/x} \right), \min_{\mathbf{z} \in \Omega} \left(\frac{1}{1+y} \right), \min_{\mathbf{z} \in \Omega} \left(\frac{1}{1+1/y} \right) \right\} \\ \alpha_{\max} &= \max \left\{ \max_{\mathbf{z} \in \Omega} \left(\frac{1}{1+x} \right), \max_{\mathbf{z} \in \Omega} \left(\frac{1}{1+1/x} \right), \max_{\mathbf{z} \in \Omega} \left(\frac{1}{1+y} \right), \max_{\mathbf{z} \in \Omega} \left(\frac{1}{1+1/y} \right) \right\} \\ x &= k(\mathbf{z})/k_0 \quad ; \quad y = \mu(\mathbf{z})/\mu_0 \end{aligned} \quad (\text{E.9})$$

À notre connaissance, le résultat E.9 est nouveau¹. Pour que le point fixe converge, il suffit que ces bornes vérifient $-1 < \alpha_{\min} \leq \alpha_{\max} \leq 1$. Ainsi le point fixe converge nécessairement si $k_0 > 0$, $\mu_0 > 0$ et $k \in [0; +\infty]$, $\mu \in [0; +\infty]$, ce qui permet notamment de traiter les contrastes infinis (pores et inclusions rigides). En revanche, si k et k_0 ou μ et μ_0 sont de signes opposés, la convergence n'est pas assurée.

Remarquons que cette analyse prédit que le rayon spectral $r = \max(|\alpha_{\min}|, |\alpha_{\max}|)$ de l'opérateur L peut tendre vers 1 en présence de pores ou d'inclusions rigides (voir Fig. E.1). Lorsque le contraste tend vers 1, toutes les valeurs propres tendent nécessairement vers 1/2.

¹Erratum : ce résultat vient d'être présenté par H. Moulinec à la conférence IACM-ECCOMAS, 20-25 juillet 2014, Barcelone

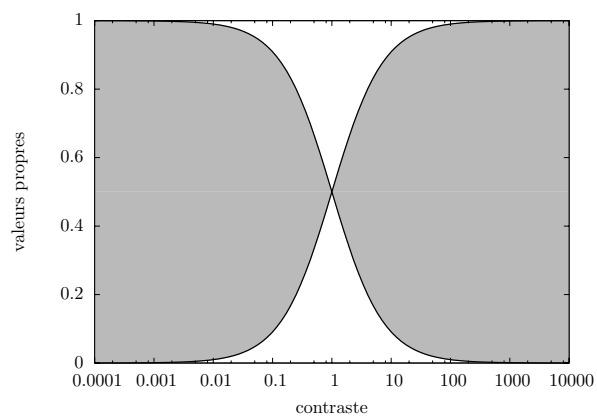


FIG. E.1: Domaine des valeurs propres de l'opérateur linéaire associé à la résolution du lagrangien augmenté par l'algorithme de Uzawa en fonction du contraste $k(\mathbf{z})/k_0$ ou $\mu(\mathbf{z})/\mu_0$.

Annexe F

Résistance d'une sphère composite

Les développements qui suivent mettent en oeuvre les approches cinématique et statique du Calcul à la Rupture [83, 84] pour établir la pression extérieure maximale supportable par une sphère composée d'un noyau rigide et d'une couronne suivant le critère de résistance elliptique (6.6).

F.1 Encadrement de la contrainte isotrope maximale supportable

On note R le rayon extérieur de la sphère, soumis à une pression uniforme Σ . Le noyau rigide est une sphère de rayon $\rho_0 R$. On note $\varepsilon = \text{signe}(\Sigma)$.

F.1.1 Approche statique

La symétrie du problème amène à choisir un champ de contraintes de la forme suivante en coordonnées sphériques

$$\boldsymbol{\sigma}(r) = \sigma_{rr}(r)\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r + \sigma_{\theta\theta}(r)(\mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{e}_\theta + \mathbf{e}_\phi \otimes \mathbf{e}_\phi) \quad (\text{F.1})$$

L'équation d'équilibre impose

$$\sigma_{\theta\theta}(r) = \frac{1}{2r} \frac{\partial r^2 \sigma_{rr}(r)}{\partial r} \quad (\text{F.2})$$

Les contraintes sont recherchées telles qu'elles saturent le critère de résistance de la matrice en tout point. En injectant la forme recherchée des contraintes dans le critère, on trouve une équation différentielle sur $\sigma_{rr}(r)$

$$\frac{\partial \sigma_{rr}(r)}{\partial r} = \frac{1}{rh(c + \sigma_{rr}(r))} \quad (\text{F.3})$$

avec

$$h(u) = \varepsilon \frac{3a + 2b}{3(-2b\varepsilon u + \sqrt{2ab\sqrt{-3u^2 + 3a + 2b}})} \quad (\text{F.4})$$

La solution est exprimée implicitement sous la forme

$$H(\sigma_{rr} + c) - H(\Sigma + c) = \ln\left(\frac{r}{R}\right), \quad (\text{F.5})$$

où H est une primitive de h , et où l'on a utilisé la continuité du vecteur contrainte entre les zones plastiques et élastiques. Une primitive de h est

$$H(u) = -\frac{1}{6} \left[\ln \left(\frac{2b + 3\sqrt{a}\varepsilon u + 3a + \sqrt{2b}\sqrt{-3u^2 + 3a + 2b}}{2b - 3\sqrt{a}\varepsilon u + 3a + \sqrt{2b}\sqrt{-3u^2 + 3a + 2b}} (\sqrt{a} - \varepsilon u)^2 \right) - \sqrt{\frac{a}{6b}} \arctan \left(\frac{\sqrt{3}\varepsilon u}{\sqrt{-3u^2 + 3a + 2b}} \right) \right] \quad (\text{F.6})$$

Remarquons que cette fonction n'est pas définie pour $\varepsilon u = \varepsilon(\sigma_{rr} + c) > \sqrt{a + 2b/3}$. Pour $\sqrt{a} < \varepsilon u < \sqrt{a + 2b/3}$, la fonction H est strictement monotone donc bijective sur cet intervalle. Dans cet intervalle, un minorant Σ^- de la charge limite en compression est obtenu en choisissant $\sigma_{rr}(r = \rho R) = -c - \sqrt{a + 2b/3}$ de sorte que

$$\Sigma^- = -c + H^{-1} \left(H(-\sqrt{a + 2b/3}) - \ln(\rho_0) \right) \quad (\text{F.7})$$

F.1.2 Approche cinématique : majorants

L'approche cinématique du Calcul à la Rupture est mise en oeuvre sur différentes classes de champs de vitesse afin de comprendre les éléments clés du mécanisme de ruine.

Champ linéaire sans discontinuité Dans un premier temps, on prend un champ de vitesse test

$$\mathbf{v} = \alpha(r - \rho_0 R)\mathbf{e}_r \quad (\text{F.8})$$

avec α négatif en compression et positif en traction, qui respecte l'adhérence à l'interface avec l'inclusion. La puissance des efforts extérieurs est

$$P_{\text{ext}} = 4\pi R^3(1 - \rho_0)\alpha\Sigma \quad (\text{F.9})$$

Les deux premiers invariants taux de déformation sont

$$d_v = \alpha(3 - \rho_0 R/r) \quad ; \quad d_d = |\alpha|\sqrt{2/3}\rho_0 R/r \quad (\text{F.10})$$

La puissance résistance maximale est obtenue en intégrant la fonction d'appui

$$P_{\text{rm}} = 4\pi \int_{r=\rho_0 R}^R \left(\sqrt{ad_v^2 + bd_d^2} - cd_v \right) r^2 dr \quad (\text{F.11})$$

L'intégrale est analytique mais trop longue pour être reportée ici. En prenant attention au signe de α , on trouve un majorant (en valeur absolue) de la charge maximale supportable

$$\Sigma_1^+ = \frac{\int_{r=\rho_0 R}^R \left(\sqrt{ad_v^2 + bd_d^2} - cd_v \right) r^2 dr}{R^3(1 - \rho_0)\alpha} \quad (\text{F.12})$$

Champ linéaire avec discontinuité Dans un second temps, on prend un champ de vitesse test

$$\mathbf{v} = \alpha(r - \rho_1 R)\mathbf{e}_r \quad (\text{F.13})$$

où $\rho_1 < \rho_0$ est un paramètre à optimiser. Ce champ fait apparaître un saut de vitesse radial $[[\mathbf{v}]] = R(\rho_0 - \rho_1)\mathbf{e}_r$ au niveau de l'inclusion. La discontinuité sur la surface S_{dis} de normale \mathbf{n} contribue à la puissance résistante maximale par le terme

$$P_{\text{rm}}^{\text{dis}} = \int_{S_{\text{dis}}} \left(\sqrt{(a + b/6)([[\mathbf{v}]] \cdot \mathbf{n})^2 + b/2[[\mathbf{v}]]^2} - c[[\mathbf{v}]] \cdot \mathbf{n} \right) dS \quad (\text{F.14})$$

La contribution du terme régulier fait intervenir les deux premiers invariants du taux de déformation

$$d_v = \alpha (3 - \rho_1 R/r) \quad ; \quad d_d = |\alpha| \sqrt{2/3} \rho_1 R/r \quad (\text{F.15})$$

La puissance résistance maximale totale est alors

$$P_{\text{rm}} = 4\pi R^3 |\alpha| \left[\int_{\rho=\rho_0}^1 \left(\sqrt{a(3 - \rho_1/\rho)^2 + 2b/3(\rho_1/\rho)^2} - \varepsilon c(3 - \rho_1/\rho) \right) \rho^2 d\rho + \rho_0^2 (\rho_0 - \rho_1) \left(\sqrt{a + 2b/3} - \varepsilon c \right) \right] \quad (\text{F.16})$$

où $\varepsilon = \text{signe}(\alpha) = \text{signe}(\Sigma)$ La puissance des efforts extérieurs est

$$P_{\text{ext}} = 4\pi R^3 |\alpha| (1 - \rho_1) |\Sigma| \quad (\text{F.17})$$

Le choix $\rho_1 = \rho_0$ conduit à la borne précédente Σ_1^+ . Un meilleur majorant de la charge maximale est obtenu en optimisant la valeur de ρ_1 de sorte que

$$|\Sigma|_2^+ = \inf_{\rho_1} \frac{1}{1 - \rho_1} \left(\int_{\rho=\rho_0}^1 \left(\sqrt{a(3 - \rho_1/\rho)^2 + 2b/3(\rho_1/\rho)^2} - \varepsilon c(3 - \rho_1/\rho) \right) \rho^2 d\rho + \rho_0^2 (\rho_0 - \rho_1) \left(\sqrt{a + 2b/3} - \varepsilon c \right) \right) \quad (\text{F.18})$$

Remarquons que le choix $\rho_1 = 0$ revient à considérer une déformation homogène correspondant à une expansion radiale avec saut de vitesse au niveau de l'inclusion. Dans ce cas, on obtient un majorant simplifié qui varie linéairement avec la fraction volumique d'inclusion

$$|\Sigma|_3^+ = (\sqrt{a} - \varepsilon c) (1 - \rho_0^3) + \rho_0^3 \left(\sqrt{a + 2b/3} - \varepsilon c \right) \quad (\text{F.19})$$

Champ radial avec discontinuité Dans un troisième temps, on choisit un champ radial avec discontinuité, dont la dépendance par rapport à r pour $\rho_0 < r \leq R$ est à optimiser par calcul des variations

$$\mathbf{v} = \alpha v(r) \mathbf{e}_r \quad (\rho_0 < r \leq R) \quad (\text{F.20})$$

avec $v(R) = 1$ et $v(\rho_0 R) = \llbracket v_0 \rrbracket$ La puissance des efforts extérieurs est

$$P_{\text{ext}} = 4\pi R^2 \alpha \Sigma \quad (\text{F.21})$$

Pour un saut de vitesse donné à l'inclusion, le champ de vitesse pour $\rho_0 < r \leq R$ doit minimiser la partie régulière de la puissance résistante maximale

$$P_{\text{rm}}^{\text{reg}} = 4\pi \int_{r=\rho_0 R}^R \left(\sqrt{ad_v^2 + bd_d^2} - cd_v \right) r^2 dr = \int_{r=\rho_0 R}^R \chi(r, v(r), v'(r)) dr \quad (\text{F.22})$$

D'après le calcul des variations, l'optimum est obtenu pour $v(r)$ solution de

$$\frac{\partial \chi(r, v, v')}{\partial v} - \frac{d}{dr} \left(\frac{\partial \chi(r, v, v')}{\partial v'} \right) = 0 \quad (\text{F.23})$$

ce qui revient à l'équation différentielle non linéaire du second ordre en $v(r)$

$$(3a + 2b)(rv'(r))^3 - 6b(rv'(r))^2 v(r) + (6b + 9a)v(r)^2 rv'(r) - 2(b + 6a)v(r)^3 + 9av(r)^2 r^2 v''(r) = 0 \quad (\text{F.24})$$

Cette équation est simplifiée par utilisation du changement de variable $\eta = \ln(r/(\rho_0 R))$ et du changement de fonction $w(\eta) = \partial \ln[v(\eta)]/\partial \eta$ en

$$9aw'(\eta) - w(\eta) (w(\eta)^2 - 3w(\eta) + 3) (2b + 3a) + 2(b + 6a) = 0 \quad (\text{F.25})$$

La solution de cette nouvelle équation différentielle est analytique, de la forme

$$\eta = \Phi(w_0) - \Phi(w) \quad (\text{F.26})$$

où Φ , connue analytiquement mais trop longue pour être reportée ici, est la primitive de ϕ qui s'annule en $+\infty$ avec

$$\phi(x) = \frac{9a}{x(x^2 - 3x + 3)(2b + 3a) + 2(b + 6a)} \quad (\text{F.27})$$

et w_0 est une valeur à optimiser qui correspond à

$$w_0 = \frac{\rho_0 R}{\llbracket v_0 \rrbracket} \left(\frac{\partial v}{\partial r}(r = \rho_0 R^+) \right) \quad (\text{F.28})$$

Pour intégrer la partie régulière de la fonction d'appui, il est plus commode d'intégrer par rapport à la variable w . La vitesse s'exprime en fonction de w par

$$\ln(v) = \Psi(w) - \Psi(w_R) \quad (\text{F.29})$$

où Ψ est une primitive de $x\phi(x)$ et $w_R = \Phi^{-1}(\Phi(w_0) + \ln(\rho_0))$ est la valeur prise par w en $r = R$.

Malheureusement, ce champ donne une borne sur la charge limite très légèrement supérieure à celle donnée par $|\Sigma|_2^+$. Une possibilité est que la condition aux limites en $r = \rho_0 R$ est mal gérée puisque l'on ne choisit pas indépendamment le saut de vitesse et la dérivée de la vitesse juste après ce point.

Champ associé La borne $|\Sigma|_2^+$ est très proche de $|\Sigma|^-$. Supposons maintenant que $|\Sigma|^-$ est la charge limite. Dans ce cas, le champ de vitesse associé doit, d'après le théorème d'association, conduire à la même charge limite.

Le taux de déformation plastique associé suit la règle de normalité

$$\mathbf{d} = \dot{\lambda} \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = d_{rr}(r) \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r + d_{\theta\theta}(r) (\mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{e}_\theta + \mathbf{e}_\phi \otimes \mathbf{e}_\phi) \quad (\text{F.30})$$

avec

$$\begin{aligned} d_{rr}(r) &= \frac{2\dot{\lambda}}{3} \left(\frac{\sigma_{rr} + 2\sigma_{\theta\theta} + 3c}{3a} + \frac{2(\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta})}{b} \right) = \frac{2\dot{\lambda}}{3} \left(\frac{u}{a} + \frac{(3a)^{-1} - b^{-1}}{h(u)} \right) \\ d_{\theta\theta}(r) &= \frac{2\dot{\lambda}}{3} \left(\frac{\sigma_{rr} + 2\sigma_{\theta\theta} + 3c}{3a} - \frac{\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}}{b} \right) = \frac{2\dot{\lambda}}{3} \left(\frac{u}{a} + \frac{(3a)^{-1} + (2b)^{-1}}{h(u)} \right) \end{aligned} \quad (\text{F.31})$$

Cherchons à savoir si ce taux de déformation est géométriquement compatible avec un champ de vitesse radial

$$\mathbf{v}(r) = v_r(r) \mathbf{e}_r \quad (\text{F.32})$$

Cette forme implique que les composantes du taux de déformation vérifient

$$d_{rr}(r) = \frac{\partial v_r(r)}{\partial r}; \quad d_{\theta\theta}(r) = \frac{v_r(r)}{r} \quad (\text{F.33})$$

soit

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_r(r)}{\partial r} &= \frac{2\dot{\lambda}}{3} \left(\frac{u}{a} + \frac{(3a)^{-1} - b^{-1}}{h(u)} \right) \\ \frac{v_r(r)}{r} &= \frac{2\dot{\lambda}}{3} \left(\frac{u}{a} + \frac{(3a)^{-1} + (2b)^{-1}}{h(u)} \right) \end{aligned} \quad (\text{F.34})$$

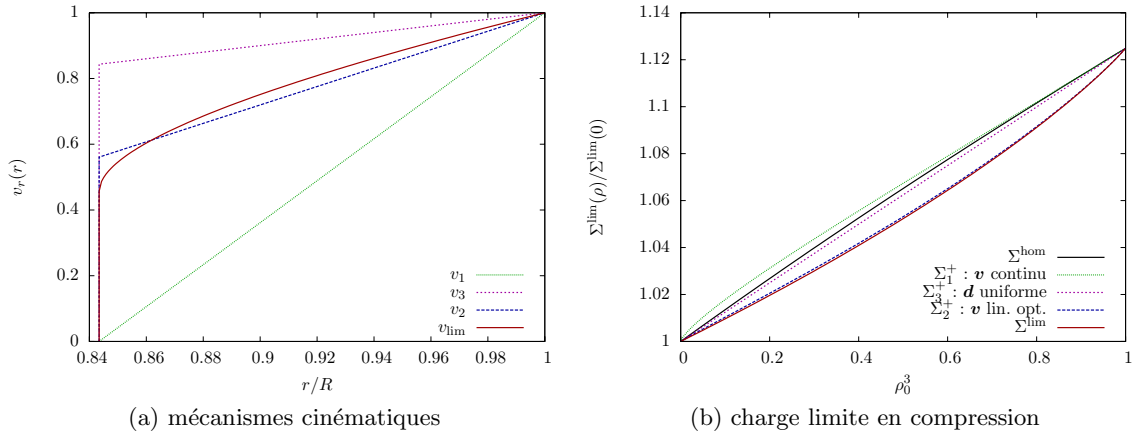


FIG. F.1: (a) Mécanismes cinématiques utilisés et (b) bornes supérieures, estimation par homogénéisation (6.61) et valeur exacte de la contrainte hydrostatique de compression maximale (F.7). Les courbes rouges correspondent au mécanisme de la charge limite exacte.

L'élimination du multiplicateur plastique $\dot{\lambda}$ conduit à une équation différentielle sur $v_r(r)$ de la forme

$$\frac{\partial v(u)}{\partial u} - q(u)v(u) = 0 \quad (\text{F.35})$$

avec

$$q(u) = \frac{2[b(1 + 3uh(u)) - 3a]h(u)}{2b(1 + 3uh(u)) + 3a} \quad (\text{F.36})$$

Rappelons que $u(r) = c + \sigma_{rr}(r)$ vérifie

$$h(u)u' = \frac{1}{r}, \quad (\text{F.37})$$

de solution

$$H(u) - H(\sigma + c) = \ln\left(\frac{r}{\rho R}\right), \quad (\text{F.38})$$

La solution de l'équation différentielle sur la vitesse est

$$\ln(v(u)) = Q(u) - Q(u_R) \quad (\text{F.39})$$

avec $u_R = \Sigma^- + c = H^{-1}(H(u_0) - \ln(\rho_0))$ et $u_0 = -\sqrt{a + 2b/3}$, ce qui prend en compte la condition aux limites $v(r = R) = 1$. Le saut de vitesse radiale à l'inclusion est alors

$$[[v]] = \exp(Q(u_0) - Q(u_R)) \quad (\text{F.40})$$

La partie régulière de la puissance résistance maximale est intégrée par changement de variable $u = u(r)$, la partie de discontinuité est traitée comme précédemment.

Tous calculs faits, on retrouve la charge limite de l'approche statique. On en conclue que $|\Sigma|^- = |\Sigma|^{\text{lim}}$. Les charges limites en traction et compression isotrope sont bien symétriques par rapport à $\Sigma = -c$.

F.2 Majorant de la contrainte déviatorique maximale supportable

Un déplacement associé au taux de déformation macroscopique homogène $\mathbf{D}_d = 1/2(\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2) - \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3$ en coordonnées cartésiennes est imposé à la frontière extérieure de la sphère composite. On note $\eta = \rho^{1/3}$ le rapport entre le rayon intérieur et le rayon extérieur.

Le champ de vitesse est recherché en coordonnées sphériques sous la forme

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \text{rot}(\zeta(r, \theta)\mathbf{e}_\phi) \\ &= \frac{-1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial \zeta(r, \theta) \sin(\theta)}{\partial \theta} \mathbf{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial \zeta(r, \theta)}{\partial r} \mathbf{e}_\theta \end{aligned} \quad (\text{F.41})$$

où $\zeta(r, \theta) = \chi(r) \sin(2\theta)$ est une fonction de courant, prise à variables séparées et χ une fonction de r à optimiser. Ce champ est à divergence nulle et ne fait pas participer la partie volumique de la partie régulière de la puissance résistance maximale de la matrice. Il présente cependant l'avantage de ne dépendre que d'une seule fonction.

Les conditions aux limites en $r = R$ imposent

$$\chi(R) = R/4 \quad ; \quad \chi'(R) = 3R^2/4 \quad (\text{F.42})$$

La condition d'adhérence au niveau de l'inclusion n'est pas imposée strictement : on se laisse la possibilité d'un saut de vitesse $[[\mathbf{v}]] = \mathbf{v}(r = \eta R^+)$, qui participe à la puissance résistance maximale comme

$$P_{\text{rm}}^s = \int_{\text{sph. } r=\eta R} \sqrt{(a+b/6)([[\mathbf{v}]] \cdot \mathbf{n})^2 + b/2[[\mathbf{v}]]^2} dS \quad (\text{F.43})$$

Afin de mener analytiquement les calculs, cette partie surfacique de la puissance résistance maximale sera majorée par application de l'inégalité de Cauchy-Schwartz

$$P_{\text{rm}}^s \leq P_{\text{rm}}^{s,\text{maj}} = \sqrt{4\pi\eta^2 R^2} \sqrt{\int_{\text{sph. } r=\eta R} (a+b/6)([[\mathbf{v}]] \cdot \mathbf{n})^2 + b/2[[\mathbf{v}]]^2 dS} \quad (\text{F.44})$$

De même, dans l'objectif d'optimiser analytiquement la fonction χ , la partie volumique de la puissance résistance maximale (dans laquelle on rappelle que $d_v = 0$ pour le champ choisi) est majorée par application de l'inégalité de Cauchy-Schwartz

$$P_{\text{rm}}^v = \int_{r=\eta R}^R \int_{\text{sph. } r} \sqrt{bd_d^2} dS dr \leq \sqrt{\frac{4\pi R^3(1-\eta^3)}{3}} \sqrt{b \int_{r=\eta R}^R \int_{\text{sph. } r} d_d^2 dS dr} = P_{\text{rm}}^{v,\text{maj}} \quad (\text{F.45})$$

Un avantage de ces deux majorations est de pouvoir intégrer analytiquement la dépendance en θ sur chaque sphère de rayon r . Le majorant de la puissance résistance maximale $P_{\text{rm}}^{v,\text{maj}}$ ne dépend alors que de la fonction χ et de ses dérivées :

$$P_{\text{rm}}^v \leq P_{\text{rm}}^{v,\text{maj}} = \sqrt{\frac{4\pi R^3(1-\eta^3)b}{3}} \sqrt{\int_{r=\eta R}^R \mathcal{L}(r, \chi, \chi', \chi'') dS} \quad (\text{F.46})$$

où \mathcal{L} est un polynôme du second degré en χ , χ' et χ'' dont les coefficients sont des puissances de r . L'intégrale sous la racine peut être minimisée par un calcul de variation, dont l'application montre que χ doit vérifier l'équation différentielle

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \chi} - \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \chi'} \right) + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \chi''} \right) = 0 \quad (\text{F.47})$$

La solution générale dépend de quatre coefficients

$$\chi(r) = C_1 + C_2(r/R)^{-2} + C_3(r/R)^3 + C_4(r/R)^5 \quad (\text{F.48})$$

Deux relations linéaires pèsent sur les coefficients afin de respecter les conditions aux limites en $r = R$. Elles sont appliquées par substitution. Les deux autres relations vont être établies afin de minimiser la puissance résistance maximale. Afin que ces relations soient linéaires, on ne

cherche pas à minimiser exactement la puissance résistance maximale car elle implique la somme de deux racines qui correspondent à P_{rm}^{v} et P_{rm}^{s} . Au contraire, on minimise une fonctionnelle quadratique des coefficients judicieusement choisie, notée \mathcal{P} et définie comme

$$\mathcal{P} = (1 - \eta^3) (P_{\text{rm}}^{\text{v,maj}})^2 + \eta^3 (P_{\text{rm}}^{\text{s,maj}})^2 \quad (\text{F.49})$$

Les pondérations $\eta^3 = \rho$ et $1 - \eta^3 = 1 - \rho$, essentielles, sont choisies afin qu'aux fortes fractions volumiques ρ le mécanisme de discontinuité de vitesse soit minimisé en priorité et qu'aux faibles fractions volumiques le mécanisme régulier dans le volume de la matrice soit minimisé en priorité. En effet, la surface spécifique de la zone de discontinuité augmente linéairement avec ρ et la fraction volumique de matrice est $1 - \rho$. La fonctionnelle \mathcal{P} est alors optimisée par rapport aux deux coefficients restants. La puissance résistance maximale P_{rm} est finalement majorée par

$$P_{\text{rm}}^{\text{maj}} = P_{\text{rm}}^{\text{v,maj}} + P_{\text{rm}}^{\text{s,maj}} \quad (\text{F.50})$$

La puissance des efforts extérieurs est

$$\begin{aligned} P_{\text{ext}} &= \int_{\text{sph}.R} (\mathbf{D} \cdot \mathbf{z}) \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \, dS = \mathbf{D} : \int_{\text{sph}.R} \mathbf{z} \otimes \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \, dS \\ &= \mathbf{D} : \boldsymbol{\Sigma} \frac{4\pi R^3}{3} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{4\pi R^3}{3} \Sigma_d \end{aligned} \quad (\text{F.51})$$

où Σ_d est la contrainte déviatorique macroscopique maximale supportable. Tous calculs fait, cette contrainte déviatorique est majorée par

$$\Sigma_d^+ = \sqrt{\frac{b}{2}} \frac{\sqrt{5\eta^3} \sqrt{f_1 b^2 + f_2 ab + f_3 a^2} + (1 - \eta) \sqrt{\eta^2 + \eta + 1} \sqrt{g_1 b^2 + g_2 ab + g_3 a^2}}{h_1 b + h_2 a} \quad (\text{F.52})$$

avec $\rho = \eta^3$ et

$$\begin{aligned} f_1 &= 5675\eta^{14} - 5880\eta^{12} + 2646\eta^{10} + 11680\eta^7 - 2352\eta^5 + 9056 \\ f_2 &= 13575\eta^{14} - 25830\eta^{12} + 11907\eta^{10} + 19680\eta^7 - 15624\eta^5 + 10992 \\ f_3 &= 324(1 - \eta)^4 (5\eta^5 + 10\eta^4 + 8\eta^3 + 6\eta^2 + 4\eta + 2)^2 \\ g_1 &= 867\eta^{17} (\eta^2 + \eta + 1) + 30092\eta^{15} (\eta + 1) - 4306\eta^{14} \\ &\quad - 9306\eta^{13} + 10044\eta^{12} + 68844\eta^{10} (\eta + 1) - 80144\eta^8 (\eta + 1) \\ &\quad + 96256\eta^7 + 125856\eta^6 + 77856\eta^5 - 96192\eta^3 (\eta + 1) + 43808(\eta^2 + \eta + 1) \\ g_2 &= 6(\eta - 1)(408\eta^{18} + 816\eta^{17} + 1224\eta^{16} + 13357\eta^{15} + 25490\eta^{14} + 13851\eta^{13} \\ &\quad - 288\eta^{12} - 1152\eta^{11} + 25284\eta^{10} + 51720\eta^9 + 1604\eta^8 - 48512\eta^7 - 12528\eta^6 \\ &\quad + 34056\eta^5 + 50640\eta^4 + 11112\eta^3 - 28416\eta^2 - 18944\eta - 9472) \\ g_3 &= 18(1 - \eta)^2 (96\eta^{17} + 288\eta^{16} + 576\eta^{15} + 3310\eta^{14} + 8490\eta^{13} + 9312\eta^{12} \\ &\quad + 5151\eta^{11} + 1317\eta^{10} + 4110\eta^9 + 13530\eta^8 + 10373\eta^7 - 5361\eta^6 - 10992\eta^5 \\ &\quad - 4920\eta^4 + 3480\eta^3 + 6144\eta^2 + 3072\eta + 1024) \\ h_1 &= -17\eta^{10} - 50\eta^7 + 294\eta^5 - 200\eta^3 + 148 \\ h_2 &= 3(1 - \eta)^3 (8\eta^7 + 24\eta^6 + 48\eta^5 + 105\eta^4 + 195\eta^3 + 192\eta^2 + 96\eta + 32) \end{aligned} \quad (\text{F.53})$$

Ce majorant ne diverge vers l'infini que dans le cas où $a/b \rightarrow \infty$ (cas du critère de Von Mises) pour $\rho \rightarrow 1$. Dans le cas ou le rapport d'aspect a/b de l'ellipse est grand (ce qui arrive lorsque $\phi \rightarrow \phi^{\text{crit+}}$), il améliore donc considérablement le majorant suivant proposé dans [50]

$$\Sigma_d^{+, \text{uni.}} = \sqrt{b} \left[(1 - \rho) + \rho \sqrt{\frac{17b + 12a}{10b}} \right] \quad (\text{F.54})$$

qui correspond à un choix de taux de déformation uniforme. Son principal inconvénient est de ne pas vérifier asymptotiquement pour $a/b \rightarrow \infty$ la condition de pertinence $\llbracket v_n \rrbracket = 0$ du saut de vitesse.

Un développement limité au premier ordre en $\rho = 0$ montre que le ratio de la pente de Σ_d^+ (F.52) en $\rho = 0$ sur celle de \sqrt{B} (6.61) de la méthode variationnelle est compris entre 0,81 et 0,93 quelques soient les valeurs de a et b , tandis que pour $\Sigma_d^{+,uni}$ (F.54) ce ratio varie entre 0,93 et $+\infty$.

Annexe G

Simulations élasto-plastiques

G.1 Algorithme d'évolution élasto-plastique

Les trajets de chargement suivant sont typiquement considérés

- triaxial : $\Sigma_m - \Sigma_m^0 = -\Sigma_d/\sqrt{6}$
- contrainte moyenne constante : $\Sigma_m = \Sigma_m^0$

L'initialisation correspond à l'état de référence et est pris comme l'itération $i = 0$. Le dernier état de contrainte dans la zone élastique est considéré comme l'itération $i = 1$. Les itérations plastiques $i \geq 2$ sont contrôlées par la déformation.

Pour les itérations plastiques, la présence de deux paramètres d'érouissage (ϕ et $\llbracket \xi_t \rrbracket_{\text{eff}}^p$) inter-dépendants et la complexité de l'expression du critère en fonction de ces paramètres d'érouissage nous conduisent à utiliser un schéma d'intégration *explicite en temps* pour les déformations et les paramètres d'érouissages. C'est à dire que les dérivées \dot{f} d'une fonction f , approchées par $d f$ numériquement entre deux pas de temps, sont affectées (calculées) à l'instant correspondant au *début* de chaque itération. La stabilité de l'algorithme proposé est alors conditionnelle : il faut un pas de temps suffisamment petit. Pour contourner cette limitation sur la stabilité, il est souvent préférable d'utiliser un schéma d'intégration *implicite en temps* où les dérivées se réfèrent à la fin d'un pas de temps. Cependant, la mise en place d'un schéma implicite en temps conduirait à résoudre un système de 3 équations non linéaires ((7.18),(7.33) et (6.69) ou (6.76)) pour 3 inconnues : $d \Sigma_d$, $d \phi$ et $d \llbracket \xi_t^p \rrbracket$, hors de portée en pratique.

initialisation

itération 0

- donnée de Σ_m^0 à l'état normalement consolidé par exemple, ou sur consolidé et $\Sigma_d^0 = 0$.

phase élastique $F(\Sigma_m, \Sigma_d, \phi, \llbracket \xi_t^p \rrbracket) \leq 0$

itération 1

- trajet de chargement : Σ_m^1 et Σ_d^1 sont liés
- bilan de variation de volume (7.33) : donne $d \phi$ en fonction de $d E_v^{e1}$ et k^{hom}
- appartenance au domaine d'élasticité initial : $F^1(\Sigma_m^1, \Sigma_d^1, \phi = \phi^0 + d \phi, \llbracket \xi_t^p \rrbracket = 0) = 0$
 - activation des interfaces inconnue à ce stade
 - supposer a priori être sur une partie de critère (7.18) avec interfaces non actives ($F^1 = F_{\text{inact}}^1$), déduire Σ_m^1 et Σ_d^1
 - si a posteriori Σ_m^1 et Σ_d^1 conduisent via (7.21) à β^1 dans la zone d'interfaces activées, recommencer le calcul précédant en prenant la portion activée du critère $F^1 = F_{\text{act}}^1$
- déformations élastiques : $E_v^{e1} = (\Sigma_m^1 - \Sigma_m^0)/k^{hom}$, $E_d^{e1} = (\Sigma_m^1 - \Sigma_m^0)/k^{hom}$
- pas de déformation plastique

phase charge plastique $F^i(\Sigma_m^i, \Sigma_d^i, \phi^i, \llbracket \xi_t^p \rrbracket^i) = 0$

itération i

- incrément de déformation totale $d E_d$: $E_d^{i+1} = E_d^i + d E_d$.
- expression de toutes les variations en fonction de $d \Sigma_d$
 - trajet de chargement : $d \Sigma_m = -d \Sigma_d / \sqrt{6}$ ou 0.
 - déformation élastique : $d E_v^e = d \Sigma_m / k^{hom}$, $d E_d^e = d \Sigma_d / 2\mu^{hom}$ et $d \varepsilon_v^e = d E_v^e / (1 - \rho)$
 - déformation plastique : $d E_d^p = d E_d - d E_d^e$
 - règle de normalité : $d E_v^p = \beta^i d E_d^p$
 - écrouissage (si interfaces actives) : $d \llbracket \xi_t^p \rrbracket$ déduit de $\llbracket V_t \rrbracket / R_0$ par (6.69) ou (6.76)
 - bilan de variation de volume (7.33) : donne $d \phi$ en fonction de $d E_v^p$ et $d E_v^e$
- appartenance nouveau critère (7.18) à l'incrément $i + 1$: $F^i(\Sigma_m^{i+1}, \Sigma_d^{i+1}, \phi^{i+1}, \llbracket \xi_t^p \rrbracket^{i+1}) = 0$ donne $d \Sigma_d$ (équation non triviale, à résoudre numériquement)
- vérification $d \Lambda \geq 0$ par (G.1)
- β^{i+1} déduit de (7.21) en utilisant Σ_m^{i+1} , ϕ^{i+1} et $\llbracket \xi_t^p \rrbracket^{i+1}$.
- β_m^{i+1} déduit de (7.35), (7.36) ou (7.37) en utilisant β^{i+1} , ϕ^{i+1} et $\llbracket \xi_t^p \rrbracket^{i+1}$.
- état de l'activation des interfaces en fonction des valeurs critiques de β^{i+1} : forme du critère F^{i+1} (7.18)

Si besoin, certaines itérations plastiques peuvent se faire en se imposant $d E_v$ au lieu de $d E_d$.

Notons que sous réserve de négliger les taux de déformations élastiques, le multiplicateur plastique peut s'explicitier en fonction du bilan de variation de volume comme :

$$\dot{\Lambda} = \left(\frac{\Sigma_m - \Sigma_{m0}}{A} + \frac{\Sigma_d - \Sigma_{d0}}{C} \right)^{-1} \frac{(1 - \rho) \dot{\phi}}{2(1 - \phi - v(\beta_m))(1 - V(\beta))}. \quad (\text{G.1})$$

G.2 Quelques résultats de simulations élasto-plastiques

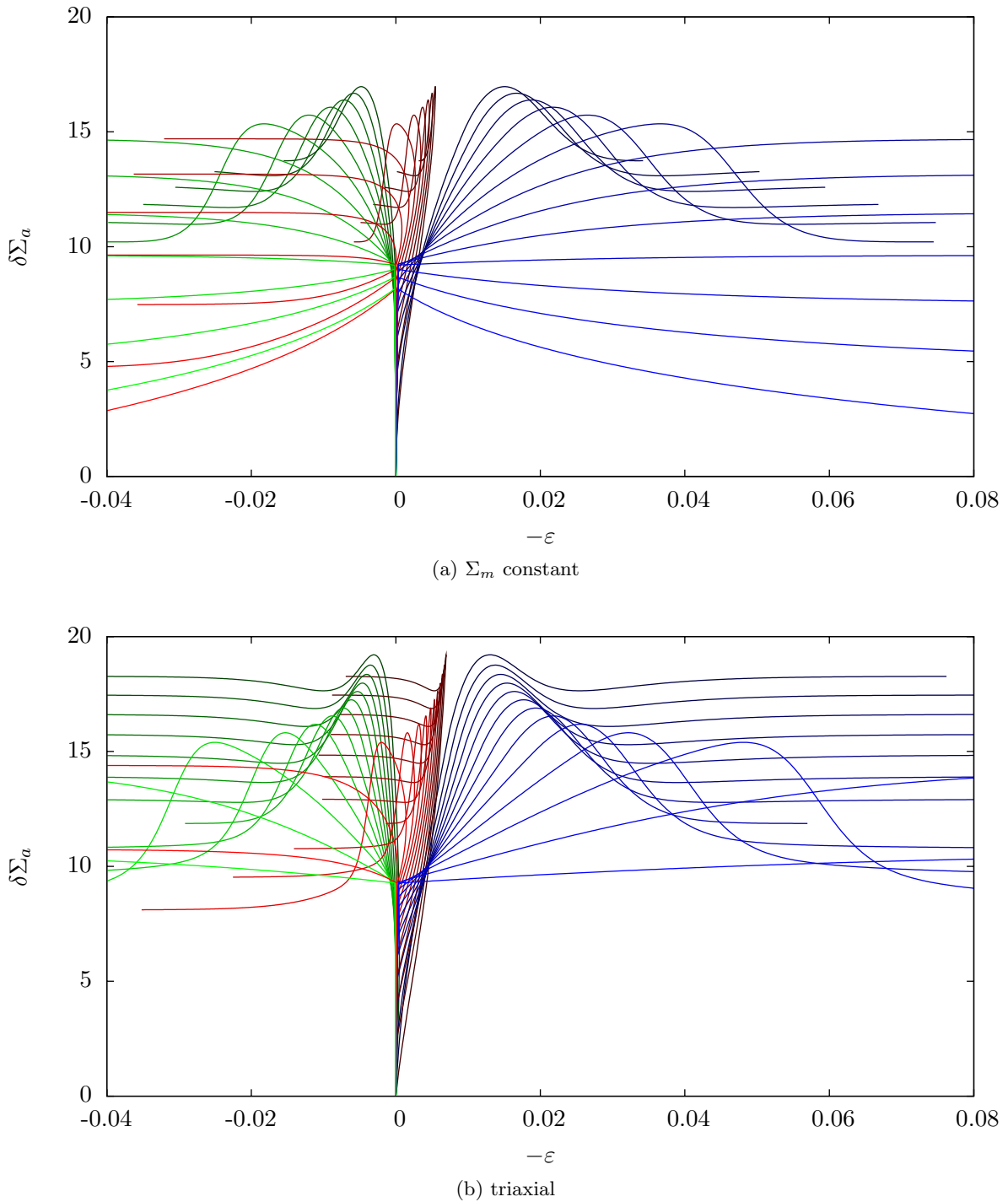
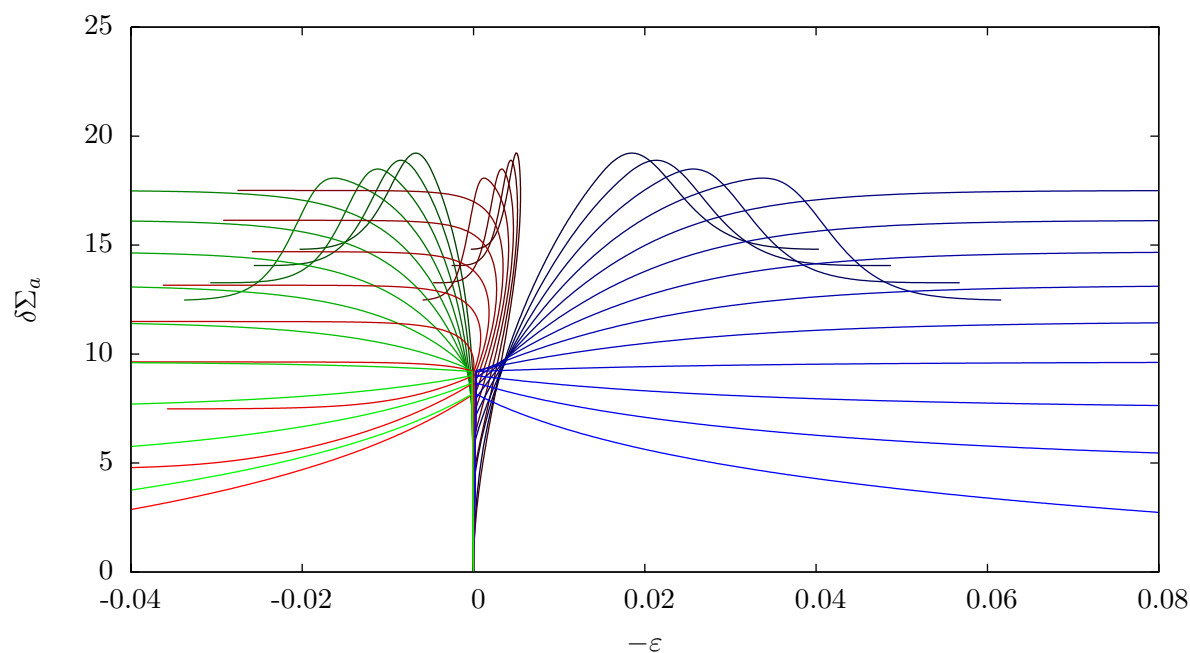
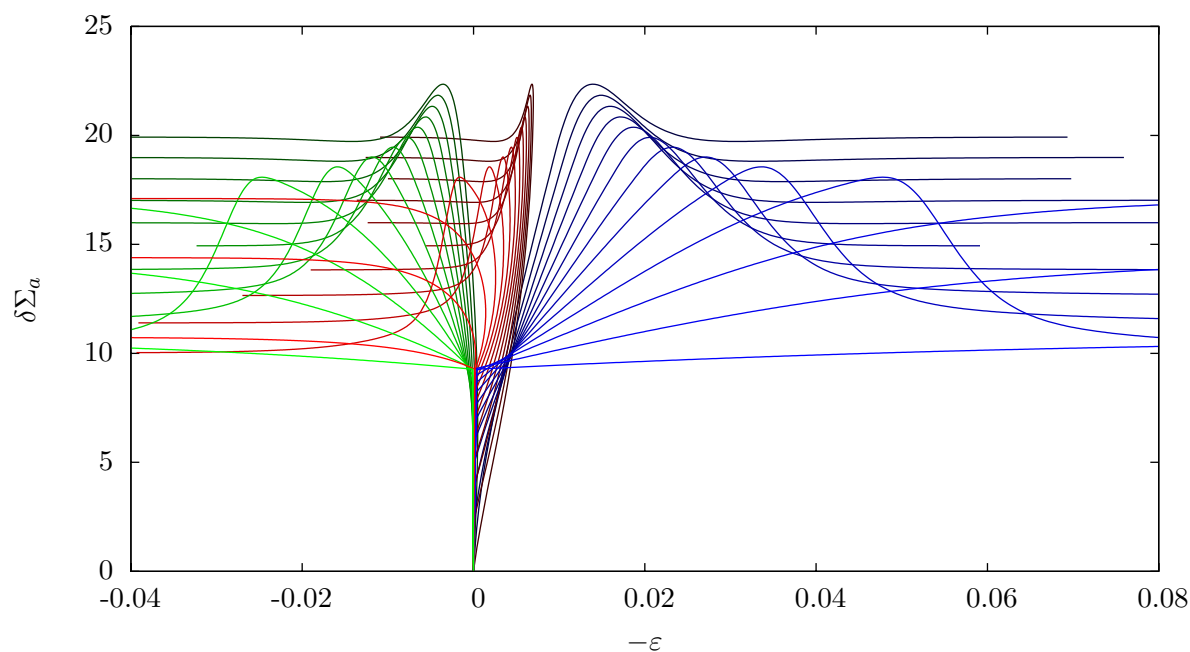


FIG. G.1: Matériau renforcé avec interfaces méso de Tresca : opposé des déformations macroscopiques totales latérale (vert), axiale (bleu) et volumique (rouge) en fonction de la variation de contrainte axiale par rapport à l'état initial. L'état initial est normalement ou sur consolidé. Chaque courbe correspond à des valeurs initiales différentes de Σ_m , de -12 MPa = normalement consolidé (foncé, courbes les plus hautes) à 0 MPa (clair, courbes les plus basses) par incrément de 1 MPa. Les paramètres sont $\phi_0 = 0.365$, $\rho = 0.6$, $\alpha_g = 0.055$, $h_g = 92.86$, $k^0 = 7$, $r_0 K_t^g = 937.25$, $R_0 K_t^i = 100050$, valeur critique d'écroutissage $(\llbracket \xi_t \rrbracket^i / R_0)^c = 0.003$.

(a) Σ_m constant

(b) triaxial

FIG. G.2: Matériau renforcé avec interfaces méso de Mohr-Coulomb : Opposé des déformations macroscopiques totales latérale (vert), axiale (bleu) et volumique (rouge) en fonction de la variation de contrainte axiale par rapport à l'état initial. L'état initial est normalement ou sur consolidé. Chaque courbe correspond à des valeurs initiales différentes de Σ_m , de -12 MPa = normalement consolidé (foncé, courbes les plus hautes) à 0 MPa (clair, courbes les plus basses) par incrément de 1 MPa. Les paramètres sont $\phi_0 = 0.365$, $\rho = 0.6$, $\alpha_g = 0.055$, $\alpha_i = 0.065$, $h_g = 92.86$, $h_i^0 = 120$, $r_0 K_t^g = 937.25$, $R_0 K_t^i = 100050$, valeur critique d'écroutissement $(\|\xi_t\|^i / R_0)^c = 0.003$.

Conclusion et perspectives

L'étude de la perméabilité et de la résistance des roches argileuses présentée s'est appuyée sur la combinaison de trois outils : la modélisation micromécanique analytique, l'expérimentation macroscopique et les simulations numériques.

Tant que possible, nous nous sommes efforcés de proposer des modèles micromécaniques analytiques. En effet, l'objectif fixé est de fournir des outils pratiques pour permettre à l'ingénieur d'améliorer sa connaissance d'un milieu géologique d'intérêt pour une application industrielle. Supposons qu'un ingénieur ait déterminé les fractions volumiques des constituants sur toute la profondeur d'un puits d'exploration à partir de logs pétro-physiques. Un modèle micromécanique analytique adapté au type de matériau et bien calé par des expériences, qui fournit une expression explicite des propriétés macroscopiques à partir des propriétés de la microstructure, lui permet directement d'estimer l'évolution d'une propriété mécanique d'intérêt le long du puits. Il est donc plus pratique à utiliser pour l'ingénieur qu'une méthode numérique qui nécessite au moins une simulation par jeu de paramètres microscopiques.

Cependant, les outils micromécaniques numériques et analytiques sont complémentaires. Une série de simulations numériques sur un ensemble de microstructures explicites permet de vérifier quantitativement la pertinence des simplifications concédées à l'établissement d'un modèle analytique, tout en conservant les mêmes hypothèses sur les mécanismes physiques microscopiques. Par exemple, les simulations numériques conduites sur des centaines de réalisations d'assemblages de grains inter-pénétrables ont permis de juger de la qualité des estimations analytiques de la perméabilité de ce type de microstructures. De même, l'étude de la résistance d'un matériau constitué d'une matrice avec un critère de résistance elliptique renforcé par des inclusions infiniment résistantes sphériques a montré que si le modèle analytique reproduit de manière satisfaisante l'allure du domaine de résistance, les résistances déviatoriques et celles en traction-compression isotrope, il passe à côté d'un effet du troisième invariant du tenseur des contraintes qui a été capturé par les simulations numériques.

De même, la modélisation micromécanique et l'expérimentation permettent d'avancer de pair sur la compréhension des propriétés d'un matériau. Nous espérons avoir illustré par ce travail qu'il s'agit bien d'un dialogue à deux sens. D'un côté, l'expérience est souvent source d'idées sur les mécanismes prépondérants à considérer dans un modèle micromécanique. Par exemple, la culture expérimentale de la mécanique des sols a inspiré la prise en compte d'un écrouissage par changement de porosité dans le modèle de plasticité des matériaux argileux. D'un autre côté, à partir du moment où les bons mécanismes physiques sont identifiés, la modélisation permet d'orienter les expérimentations vers l'étude de phénomènes mal compris. Par exemple, le modèle de cellule perméable équivalente sphérique avec prise en compte du glissement aux parois a suggéré que la perméabilité apparente au gaz peut dépendre de la pression suivant d'autres lois que celle de Klinkenberg. Cette stratégie pourrait aussi être adoptée pour discriminer entre plusieurs hypothèses de mécanismes microscopiques.

Le volet numérique de ce travail s'est consacré à l'extension des méthodes basées sur la FFT, initialement introduites en élasticité, à la perméabilité et à la résistance. Les méthodes FFT sont séduisantes par leur efficacité et par leur relative facilité d'emploi due à l'absence de maillage. Par rapport à d'autres méthodes numériques, leur plus grand intérêt réside dans leur

capacité à traiter des géométries complexes de la microstructure. Cependant, il faut garder à l'esprit qu'elles sont intrinsèquement limitées à la résolution de problèmes en conditions aux limites périodiques, avec une grille de discrétisation régulière : cela ne permet ni le raffinement local de la discrétisation ni la prise en compte de discontinuités des champs cinématiques. Or les discontinuités des champs cinématiques sont cruciales dans de nombreuses situations : glissement aux parois d'un gaz parfait, mécanisme de ruine optimal avec discontinuité du champ de vitesse ou interface imparfaite sont autant d'exemples rencontrés dans ce travail.

La première partie de ce mémoire a été consacrée à l'homogénéisation de la perméabilité à partir de la description de la géométrie du réseau poreux et la résolution des équations de Stokes en régime permanent. Un trait marquant de l'homogénéisation de la perméabilité est qu'elle ne fait intervenir que des paramètres géométriques du réseau poreux. La première difficulté rencontrée est qu'en dehors du contexte périodique, il n'est pas évident de définir les conditions aux limites à appliquer sur la frontière d'un volume élémentaire représentatif. De par leurs restrictions d'utilisation, les conditions aux limites uniformes en vitesse ou mixte n'apportent qu'une réponse partiellement satisfaisante. Néanmoins, nous nous sommes appuyés sur ces trois types de conditions aux limites pour présenter les formulations variationnelles classiques du problème d'homogénéisation. L'avantage des formulations variationnelles est de proposer une méthode pour la construction d'encadrements rigoureux de la perméabilité. L'utilisation de ces cadres variationnels a été illustrée pour rappeler et proposer des bornes sur la perméabilité de microstructures aléatoires. Le principe de construction de ces bornes repose sur la définition d'un problème auxiliaire avec une viscosité uniforme, mais avec un chargement (champ de force volumique) à optimiser. L'expression du champ de contrainte test utilisé pour construire ces bornes repose alors sur l'introduction de la fonction de Green. Une voie d'amélioration des bornes existantes serait de considérer des chargements "tests" plus sophistiqués, par exemple un terme de distribution de forces surfaciques dont l'intensité dépend de l'orientation de la normale à la surface. La difficulté sera alors de quantifier les informations géométriques statistiques requises pour expliciter les bornes. Pour cet exemple de chargement, on s'attend à voir apparaître de nouveaux types de fonctions de corrélations à 2 ou 3 points qui portent une information supplémentaire sur l'orientation de l'interface entre solide et fluide. Enfin, le principe d'introduire un milieu uniforme et d'optimiser le chargement peut être vu comme les prémices des techniques de polarisation proposées ensuite dans ce mémoire.

L'introduction d'un principe variationnel analogue au principe de Hashin et Shtrikman en élasticité a été motivée par la difficulté de construire systématiquement des champs tests admissibles de contrainte ou de vitesse. In fine, le principe permet de travailler sur un milieu homogène en transférant l'hétérogénéité du problème et une partie des conditions aux limites sur des paramètres de chargement additionnels : les champs de polarisation et de force volumique. Le choix du champ de polarisation présente l'avantage de n'être soumis à aucune condition. Par rapport à l'élasticité, les forces volumiques sont une spécificité de la perméabilité et visent à assurer l'immobilité de la phase solide. Le nouveau principe variationnel a été mis à profit pour proposer une méthode numérique basée sur une discrétisation régulière du chargement et l'utilisation de transformées de Fourier rapides. La méthode numérique a été appliquée sur des microstructures modèles pour juger de la qualité des bornes analytiques : celles-ci s'avèrent encore trop mauvaises pour servir d'estimateurs. Les perspectives que nous souhaitons poursuivre sont l'application de la méthode numérique à des représentations tridimensionnelles de microstructures obtenues par des techniques d'imagerie. Pour cela, plusieurs points restent à régler. D'une part, les microstructures observées sont non périodiques. Or contrairement à l'élasticité, l'utilisation de conditions aux limites périodiques pose un problème majeur pour les problèmes d'écoulement si la structure n'est pas périodique : les chemins d'accès par une face peuvent être bloqués par l'autre face. D'autre part, il est incertain de pouvoir observer par imagerie un volume représentatif du milieu poreux, en particulier pour les roches argileuses.

Nos tentatives de construire des estimations de la perméabilité montrent bien les différences importantes qui existent entre l'homogénéisation des propriétés élastiques et l'homogénéisation de la perméabilité à partir des équations de Stokes. La perméabilité montre une sensibilité à la morphologie de l'espace poreux beaucoup plus grande que les propriétés élastiques. Les schémas basés sur la résolution d'un problème auxiliaire avec conditions aux limites reportées à l'infini se révèlent inappropriés car ils ne permettent pas de rendre compte d'une taille caractéristique des pores. En revanche, la définition de problèmes auxiliaires sur un domaine borné et la définition de cellules perméables équivalentes permettent dans une certaine mesure d'améliorer la qualité des estimations. Cette technique a donc été développée pour étudier l'effet du rapport d'aspect des grains solides et le phénomène de glissement aux parois d'après la théorie cinétique des gaz. Nous ne sommes malheureusement pas parvenus à proposer des expressions explicites des perméabilités pour les cellules perméables équivalentes en géométrie sphéroïdale. Toutefois, l'utilisation des principes variationnels a permis de proposer une stratégie efficace permettant un bon encadrement de ces perméabilités. Par la suite, il serait intéressant de quantifier l'effet du glissement aux parois pour les cellules perméables équivalentes sphéroïdales.

La campagne expérimentale menée sur plusieurs types de roches argileuses illustre leur grande variabilité. En particulier, la perméabilité, très faible, peut varier de plusieurs d'ordre de grandeurs d'une origine d'échantillons à l'autre. Par ailleurs, la porosité et la perméabilité mesurées au gaz sur échantillon sec sont très sensibles au confinement. Les modèles développés en début de partie ne nous ont pas permis de rendre compte des valeurs de perméabilité absolue : la morphologie de l'espace poreux doit être modélisée très finement sous peine de se tromper de plusieurs ordres de grandeurs. De même, la modélisation de la perméabilité relative au gaz pour une saturation partielle en eau n'est pas entièrement satisfaisante quantitativement. Cependant, le modèle de glissement aux parois a permis de proposer une interprétation d'observations qui dévient de la loi de Klinkenberg. Notamment, l'ordre de grandeur de la taille médiane des pores est bien rendu. Enfin, les mesures de perméabilité relative sur les roches de couverture ont mis en évidence une saturation critique en eau au delà de laquelle s'annule la perméabilité au gaz.

La deuxième partie de ce mémoire a été consacrée à l'homogénéisation des propriétés de résistance. Dans un premier temps, le cadre micromécanique a été rappelé en portant l'accent sur la définition d'un problème visqueux non linéaire fictif pour la détermination des états de contrainte sur la frontière du domaine de résistance macroscopique. Une stratégie originale basée sur les méthodes type FFT en élasticité non linéaire a été proposée pour l'homogénéisation des propriétés de résistance de microstructures complexes en conditions aux limites périodiques. La méthode a été appliquée avec succès pour des constituants "micro" régis par un critère de résistance de Von Mises ou elliptique, mais rencontre des problèmes pour traiter le critère de Drucker-Prager. De plus, les mécanismes discontinus et les interfaces imparfaites ne peuvent pas être traités par la méthode numérique. Une piste de recherche future est l'utilisation de solveurs itératifs qui permettraient de traiter les critères frottants, pour lesquels le module de compression sécant est de signe variable.

Dans un second temps, un modèle à trois échelles ("micro", "méso", "macro") a été proposé pour rendre compte des propriétés de résistance de roches argileuses composées d'une matrice et d'inclusions. La matrice argileuse "méso" résulte elle-même d'un assemblage à l'échelle inférieure (microscopique) de pores et de grains rigides dont les interfaces sont frottantes. Le travail s'est concentré sur l'effet d'une imperfection des interfaces entre matrice et inclusions à l'échelle "méso". L'imperfection d'une interface est décrite par un critère portant sur le vecteur contrainte appliqué sur l'interface ; les critères de Tresca et de Mohr-Coulomb sont successivement considérés. L'homogénéisation méso-macro a été conduite à l'aide de la méthode sécante modifiée et d'un schéma de Mori-Tanaka basé sur un problème d'Eshelby avec interfaces imparfaites. L'imperfection des interfaces se traduit à l'échelle macroscopique par une diminution conditionnelle des propriétés de résistance par rapport au cas où les interfaces sont parfaites. En

effet, deux états d'interfaces sont distingués : elles sont dites activées ou inactivées. L'activation des propriétés d'interfaces dépend du taux de triaxialité du taux de déformation macroscopique. Lorsque la direction de chargement n'active pas les interfaces, la résistance macroscopique du cas des interfaces parfaites est retrouvée. Au contraire, lorsque la direction de chargement active les interfaces, la résistance macroscopique est amoindrie. Néanmoins, la frontière du domaine de résistance macroscopique est sans point anguleux. La qualité de ces estimations des critères de résistances macroscopiques a par ailleurs été évaluée dans le cas où les interfaces sont parfaites. Une comparaison du domaine de résistance "macro" a été effectuée avec ceux obtenus soit par le calcul à la rupture sur une sphère composite, soit par la méthode numérique présentée précédemment sur un réseau périodique d'inclusions. Les résistances maximales en compression isotrope et en déviateur sont proches pour les différentes méthodes, mais seule la méthode numérique permet de capturer un effet du troisième invariant du tenseur des contraintes. Une piste de réflexion est de comprendre pourquoi la stratégie basée sur la méthode sécante modifiée ne permet pas de rendre compte de cet effet.

Enfin, la troisième partie de ce mémoire propose une modélisation originale de la plasticité de roches argileuses. Le modèle reprend la description à trois échelles utilisée pour l'homogénéisation des propriétés de résistance ainsi que les mécanismes cinématiques utilisés à cet effet. L'idée de départ a été de considérer un écrouissage par changement de géométrie sur la base de ces mécanismes cinématiques. Pour la transition micro-méso, la grande sensibilité à la porosité du critère de résistance de l'assemblage de pores et de grains rigides interfacés permet de retrouver un écrouissage important pour une très faible variation de porosité, conforme aux observations classiques en mécanique des sols. Un résultat extrêmement intéressant est que la présente approche conduit à une justification micromécanique du concept d'état critique. De plus, le modèle permet de rendre compte du caractère dilatant ou contractant suivant l'état de sur-consolidation et d'un pic de contrainte seulement pour les états fortement sur-consolidés. Pour la transition méso-macro, un deuxième phénomène d'écrouissage lié à la dégradation des interfaces entre matrice et inclusions est pris en compte. Pour un essai triaxial à partir de l'état normalement consolidé, la compétition entre l'écrouissage positif par diminution de porosité et l'écrouissage négatif par dégradation des interfaces conduit à un pic de contrainte déviatorique, puis à un écoulement plastique libre à un état critique qui correspond au cas des interfaces totalement dégradées. Le modèle permet de rendre compte des phénomènes majeurs observés macroscopiquement sur l'argilite, notamment : alternance d'une phase contractante et d'une phase dilatante et présence d'un pic de contrainte même pour un essai à partir de l'état normalement consolidé. De plus, le modèle permet de localiser les contributions de chaque mécanisme "micro" ou "méso" aux observations macroscopiques. Pour valider le modèle, il reste à identifier les paramètres microstructuraux par identification inverse sur un essai, puis à comparer les résultats du modèle calé par rapport à des expériences indépendantes pour d'autres configurations : états de sur-consolidation ou fractions volumiques de constituants différents.

* *

*

Bibliographie

- [1] M. ABRAMOWITZ et I. A. STEGUN, édés. *Handbook of mathematical functions*. Applied Mathematics Series - 55. National Bureau of Standards, 10^e éd., 1972.
- [2] J. ATKINSON : *The Mechanics of Soils and Foundations*. McGraw-Hill, 1993.
- [3] J. L. AURIAULT et E. SANCHEZ-PALENCIA : Etude du comportement macroscopique d'un milieu poreux saturé déformable. *Journal de Mécanique*, 16:575–603, 1977.
- [4] R. BARRETT, M. BERRY, T. F. CHAN, J. DEMMEL, J. DONATO, J. DONGARRA, V. EIJKHOUT, R. POZO, C. ROMINE et H. V. der VORST : *Templates for the Solution of Linear Systems : Building Blocks for Iterative Methods, 2nd Edition*. SIAM, Philadelphia, PA, 1994.
- [5] J.-F. BARTHÉLÉMY : *Approche micromécanique de la rupture et de la fissuration dans les géomatériaux*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 2005.
- [6] J.-F. BARTHÉLÉMY et L. DORMIEUX : A micromechanical approach to the strength criterion of drucker-prager materials reinforced by rigid inclusions. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 28(7-8):565–582, 2004.
- [7] J.-F. BARTHÉLÉMY : Effective permeability of media with a dense network of long and micro fractures. *Transp. Porous Media*, 76:153–178, 2009.
- [8] J.-F. BARTHÉLÉMY, L. DORMIEUX et S. MAGHOUS : Micromechanical approach to the modelling of compaction at large strains. *Computers and Geotechnics*, 30(4):321–338, 2003.
- [9] J. G. BERRYMAN : Computing variational bounds for flow through random aggregates of sphere. *Journal of Computational Physics*, 52(1):142–162, 1983.
- [10] J. G. BERRYMAN : Measurement of spatial correlation functions using image processing techniques. *J. Appl. Phys.*, 57:2374–2384, 1985.
- [11] J. G. BERRYMAN et G. W. MILTON : Normalization constraint for variational bounds on fluid permeability. *J. Chem. Phys.* 83, 754, 83:754–760, 1985.
- [12] F. BIGNONNET et L. DORMIEUX : FFT-based homogenization of permeability using a hashin-shtrikman type variational framework. *In Poromechanics V*, p. 1245–1254, 2013.
- [13] F. BIGNONNET et L. DORMIEUX : FFT-based bounds on the permeability of complex microstructures. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 38(16):1707–1723, 2014.
- [14] F. BIGNONNET, L. DORMIEUX et E. LEMARCHAND : Strength of a matrix with elliptic criterion reinforced by rigid inclusions with imperfect interfaces. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 2014. soumis.

- [15] F. BIGNONNET, K. SAB, L. DORMIEUX, S. BRISARD et A. BISSON : Macroscopically consistent non-local modeling of heterogeneous media. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 278:218–238, 2014.
- [16] J. BLEYER et P. de BUHAN : Yield surface approximation for lower and upper bound yield design of 3d composite frame structures. *Computers & Structures*, 129:86 – 98, 2013.
- [17] M. J. BLUNT, M. D. JACKSON, M. PIRI et P. H. VALVATNE : Detailed physics, predictive capabilities and macroscopic consequences for pore-network models of multi-phase flow. *Advances in Water Resources*, 25:1069–1089, 2002.
- [18] C. BOUTIN : Study of permeability by periodic and self-consistent homogenisation. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 19:603–632, 2000.
- [19] S. BRISARD : *Analyse morphologique et homogénéisation numérique - application à la pâte de ciment*. Thèse de doctorat, Université Paris-Est, 2011.
- [20] S. BRISARD et L. DORMIEUX : Fft-based methods for the mechanics of composites : A general variational framework. *Computational Materials Science*, 49:663–671, 2010.
- [21] S. BRISARD et L. DORMIEUX : Combining galerkin approximation techniques and the principle of hashin and shtrikman to improve two fft-based numerical methods for the homogenization of composites. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 217-220:197–212, 2012.
- [22] S. CARIOU : *Couplage hydro-mécanique et transfert dans l'argilite de Meuse/Haute-Marne : approches expérimentale et multi-échelle*. Thèse de doctorat, École Nationale des Ponts et Chaussées, 2010.
- [23] W. CHEN, J. LIU, F. BRUE, F. SKOCZYLAS, C. DAVY, X. BOURBON et J. TALANDIER : Water retention and gas relative permeability of two industrial concretes. *Cement and Concrete Research*, 42:1001–1013, 2012.
- [24] A. T. CHWANG et T. Y.-T. WU : Hydromechanics of low-Reynolds-number flow. Part 2. singularity method for Stokes flows. *J. Fluid Mech.*, 67(4):787–815, 1975.
- [25] G. DASSIOS : The fundamental solutions for irrotational and rotational stokes flow in spheroidal geometry. *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.*, 143(243), 2007.
- [26] G. DASSIOS, M. HADJINICOLAOU, F. COUTELIERIS et A. PAYATAKES : Stokes flow in spheroidal particle-in-cell models with happel and kuwabara boundary conditions. *Int. J. Engng Sci.*, 33:1465–1490, 1995.
- [27] G. DASSIOS et P. VAFEAS : On the spheroidal semiseperation for stokes flow. *Research Letters in Physics*, 2008.
- [28] P. de BUHAN : *Approche fondamentale du Calcul à la Rupture des ouvrages en sols renforcés*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris, 1986.
- [29] P. de BUHAN et L. DORMIEUX : On the validity of the effective stress concept for assessing the strength of saturated porous materials : a homogenization approach. *J. Mech. Phys. Solids*, 44(10):1649–1667, 1996.
- [30] D. N. DEWHURST, R. M. JONES et M. D. RAVEN : Microstructural and petrophysical characterization of muderong shale : application to top seal risking. *Petroleum Geoscience*, 8:371–383, 2002.

- [31] M. DOI : A new variational approach to the diffusion and flow problem in porous media. *J. Phys. Soc. Japan*, 40:567–572, 1976.
- [32] L. DORMIEUX, L. JEANNIN, E. BEMER, T. H. LE et J. SANAHUJA : Micromechanical models of the strength of a sandstone. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 34:249–271, 2010.
- [33] L. DORMIEUX, L. JEANNIN et N. GLAND : Homogenized models of stress-sensitive reservoir rocks. *Int. J. Eng. Science*, 49:386–396, 2011.
- [34] L. DORMIEUX, D. KONDO et F.-J. ULM : *Microporomechanics*. Wiley, 2006.
- [35] L. DORMIEUX, A. MOLINARI et D. KONDO : Micromechanical approach to the behavior of poroelastic materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(10):2203–2231, 2002.
- [36] L. DORMIEUX et D. KONDO : Approche micromécanique du couplage perméabilité-endommagement. *C. R. Mécanique*, 332(135-140), 2004.
- [37] L. DORMIEUX et K. SAB : Micromécanique, polycopié de cours du Master MMS. École Nationale des Ponts et Chaussées, 2012.
- [38] H. ENE et E. SANCHEZ-PALENCIA : Equations et phénomènes de surface pour l'écoulement dans un modèle de milieu poreux. *Journal de Mécanique*, p. 73–108, 1975.
- [39] E. FATHI, A. TINNI et I. Y. AKKUTLU : Correction to klinkenberg slip theory for gas flow in nano-capillaries. *Int. J. Coal Geol.*, 103:51–59, 2012.
- [40] M. FRÉMOND et A. FRIAÀ : Analyse limite. comparaison des méthodes statique et cinématique. *C.R. Acad. Sci. Paris*, 286:107–110, 1978.
- [41] M. FRIGO et S. G. JOHNSON : The design and implementation of FFTW3. *Proceedings of the IEEE*, 93(2):216–231, 2005. Special issue on “Program Generation, Optimization, and Platform Adaptation”.
- [42] Y. C. FUNG et P. TONG : *Classical and computational solid mechanics*. World Scientific Publishing, 2001.
- [43] J. A. GIVEN et G. STELL : Improved permeability bounds for highly polydisperse materials. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 2:1929–1936, 1990.
- [44] S. GOUNAND : *Introduction la méthode des éléments finis en mécanique des fluides incompressibles*. Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives, 2012.
- [45] M. GUEGUIN, G. HASSEN, J. BLEYER et P. DE BUHAN : An optimization method for approximating the macroscopic strength criterion of stone column reinforced soils. *In Proceedings of the 3rd International Symposium on Computational Geomechanics*, p. 484–494, Pologne, 2013.
- [46] A. GURSON : Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth. Part I : Yield criteria and flow rules for porous ductile media. *J. Engng. Matl. Tech. Trans. ASME*, 99:2–15, 1977.
- [47] J. HAPPEL : Viscous flow in multiparticle systems : slow motion of fluids relative to beds of spherical particles. *AIChE J.*, 4:197–201, 1958.

- [48] Z. HASHIN : The spherical inclusion with imperfect interface. *Journal of Applied Mechanics*, 58:444–449, 1991.
- [49] Z. HASHIN et S. SHTRIKMAN : On some variational principles in anisotropic and non-homogeneous elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 10(4):335–342, 1962.
- [50] Z. HE, L. DORMIEUX et D. KONDO : Strength properties of a drucker-prager porous medium reinforced by rigid particles. *Int. J. Plasticity*, 51:218–240, 2013.
- [51] Z. HE, L. DORMIEUX, E. LEMARCHAND et D. KONDO : Cohesive mohr-coulomb interface effects on the strength criterion of materials with granular-based microstructure. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 42:430–440, 2013.
- [52] H. A. JAKOBSEN : *Chemical Reactor Modeling : Multiphase Reactive Flows*. Springer, 2008. ISBN 9783540686224.
- [53] Y. JUNG et S. TORQUATO : Fluid permeabilities of triply periodic minimal surfaces. *Physical Review*, 72(5), 2005.
- [54] E. H. KENNARD : *Kinetic theory of gases*. McGraw-Hill, New-York, 1938.
- [55] L. J. KLINKENBERG : The permeability of porous media to liquid and gases. *In API Drilling and Production Practices, New York*, p. 200–213. API 11th mid-year meeting, Tulsa, 1941.
- [56] D. KONG, Z. CUI, Y. PAN et K. ZHANG : On the papkovitch-neuber formulation for stokes flows driven by a translating/rotating prolate spheroid at arbitrary angles. *Int. J. Pure App. Math.*, 75:455–483, 2012.
- [57] K. KRABBENHOFT, A. LYAMIN et S. SLOAN : Formulation and solution of some plasticity problems as conic programs. *International Journal of Solids and Structures*, 44:1533–1549, 2007.
- [58] W. KREHER : Residual stresses and stored elastic energy of composites and polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 38:115–128, 1990.
- [59] S. KUWABARA : The forces experienced by randomly distributed parallel circular cylinders or spheres in a viscous flow at small reynolds numbers. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 14:527–532, 1959.
- [60] J.-B. LEBLOND, G. PERRIN et P. SUQUET : Exact results and approximate models for porous viscoplastic solids. *Int. J. Plast.*, 10(3):213–235, 1994.
- [61] L. B. LOEB : *The Kinetic Theory of Gases*. McGraw-Hill Book Company, 1927.
- [62] Y. MAALEJ, L. DORMIEUX et J. SANAHUJA : Elastic nonlinear behaviour of a granular medium : micromechanical approach. *Comptes Rendus Mécanique*, 8:461–466, 2007.
- [63] Y. MAALEJ, L. DORMIEUX et J. SANAHUJA : Micromechanical approach to the failure criterion of granular media. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 28:647–653, 2009.
- [64] S. MAGHOUS, L. DORMIEUX et J.-F. BARTHÉLÉMY : Micromechanical approach to the strength properties of frictional geomaterials. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 28:179–188, 2009.

- [65] S. MAGHOUS : *Détermination du critère de résistance macroscopique d'un matériau hétérogène à structure périodique*. Thèse de doctorat, École Nationale des Ponts et Chaussées, 1991.
- [66] J. C. MICHEL, H. MOULINEC et P. SUQUET : A computational scheme for linear and non-linear composites with arbitrary phase contrast. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 52:139–160, 2001.
- [67] C. A. MILLER et S. TORQUATO : Diffusion-controlled reactions among spherical traps : effect of polydispersity in trap size. *Physical Review B*, 40(10):7101–7108, 1989.
- [68] C. J. MODICA et S. G. LAPIERRE : Estimation of kerogen porosity in source rocks as a function of thermal transformation : Example from the mowry shale in the powder river basin of wyoming. *AAPG Bulletin*, 96(1):87–108, 2012.
- [69] A. MOGHADAM et R. CHALATURNYK : Expansion of the klinkenberg's slippage equation to low permeability porous media. *Int. J. Coal Geol.*, 123:2–9, 2013.
- [70] V. MONCHIET et G. BONNET : A polarization-based fft iterative scheme for computing the effective properties of elastic composites with arbitrary contrast. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 89:1419–1436, 2012.
- [71] H. MOULINEC et P. SUQUET : A fast numerical method for computing the linear and non linear properties of composites. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, 2(318):1417–1423, 1994.
- [72] H. MOULINEC et P. SUQUET : A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computational Methods in Applied Mechanical Engineering*, 157:69–94, 1998.
- [73] N. I. MUSKHELISHVILI : *Some basic problems of the mathematical theory of elasticity*. Noordhoff International Publishing, 1954.
- [74] J. NADAH, F. BIGNONNET, C. A. DAVY, F. SKOCZYLAS, D. TROADEC et S. BAKOWSKI : Microstructure and poro-mechanical performance of haubourdin chalk. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 58:149–165, 2013.
- [75] T.-K. NGUYEN, V. MONCHIET et G. BONNET : A fourier based numerical method for computing the dynamic permeability of periodic porous media. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 37, 2013.
- [76] F. PASTOR, D. KONDO et J. PASTOR : 3D-FEM formulations of limit analysis methods for porous pressure-sensitive materials. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 95:847–870, 2013.
- [77] B. T. PORODNOV, P. E. SUETIN, S. F. BORISOV et V. D. AKINSHIN : Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels. *Journal of Fluid Mechanics*, 64(3):417–438, 1974.
- [78] S. PRAGER : Viscous flow through porous media. *Phys. Fluids*, 4:1477–1482, 1961.
- [79] B. REVIL-BAUDARD et O. CAZACU : New three-dimensional strain-rate potentials for isotropic porous metals : Role of the plastic flow of the matrix. *Int. J. Plasticity*, 60:101–117, 2014.
- [80] A. RICHELSEN et V. TVERGAARD : Dilatant plasticity or upper bound estimates for porous ductile solids. *Acta Metallurgica et Materialia*, 42(8):2561–2577, 1994.

- [81] J.-C. ROBINET, P. SARDINI, D. COELHO, jean CLAUDE PARNEIX, D. PRET, S. SAMMARTINO, E. BOLLER et S. ALTMANN : Effects of mineral distribution at mesoscopic scale on solute diffusion in a clay-rich rock : Example of the callovo-oxfordian mudstone (bure, france). *Water Resources Research*, 48, 2012.
- [82] J. RUBINSTEIN et S. TORQUATO : Flow in random porous media : mathematical formulation, variational principles, and rigorous bounds. *J. Fluid Mech.*, 206:25–46, 1989.
- [83] J. SALENÇON : An introduction to the yield design theory and its applications to soil mechanics. *European Journal of Mechanics*, 9:477–500, 1990.
- [84] J. SALENÇON : *Calcul à la rupture et analyse limite*. Presses de l'École Nationale des Ponts et Chaussées, 1983.
- [85] J. SANAHUJA : *Impact de la morphologie structurale sur les performances mécaniques des matériaux de construction : application au plâtre et à la pâte de ciment*. Thèse de doctorat, École Nationale des Ponts et Chaussées, 2008.
- [86] J. SANAHUJA et L. DORMIEUX : Résistance d'un milieu poreux à phase solide hétérogène. *Comptes Rendus de Mécanique*, 333:818–823, 2005.
- [87] A. SANGANI et A. ACRIVOS : Slow flow through a periodic array of spheres. *International Journal of Multiphase Flow*, 8:343–360, 1982.
- [88] A. SCHOFIELD et P. WROTH : *Critical State Soil Mechanics*. McGraw-Hill, 1968.
- [89] F. SHARIPOV : Data on the velocity slip and temperature jump coefficients. In *Thermal and Mechanical Simulation and Experiments in Micro-Electronics and Micro-Systems. Proc. 5th Int. Conf. EuroSimE (Belgium)*, p. 243–249, 2004.
- [90] W. SHEN, L. DORMIEUX, D. KONDO et J. SHAO : A closed-form three scale model for ductile rocks with a plastically compressible porous matrix. *Mech. Mater.*, 59:73–86, 2012.
- [91] F. SKOCZYLAS et E. DANA : Gas relative permeability and pore structure of sandstones. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 1999.
- [92] Y. SONG : *Rétention d'eau et microstructure fine de l'argilite de Bure*. Thèse de doctorat, École Centrale de Lille, 2014.
- [93] P. SUQUET : Analyse limite et homogénéisation. *CRAS*, 296:1355–1358, 1983.
- [94] P. SUQUET : Effective behavior of nonlinear composites. In *Continuum Micromechanics*. Springer-Verlag, 1997.
- [95] P. TARDIF-D'HAMONVILLE : *Modélisation et simulation du transport advectif et diffusif en milieu poreux monophasique et diphasique*. Thèse de doctorat, École Nationale des Ponts et Chaussées, 2006.
- [96] V. TARNOW : Air flow resistivity of models of fibrous acoustic materials. *J. Acoust. Soc. Am.*, 100:3706–3713, 1996.
- [97] S. TIMOSHENKO et J. N. GOODIER : *Theory of elasticity*. McGraw-Hill Book Company, 1951.
- [98] J. TÖLKE, C. BALDWIN, Y. MU, N. D. Q. FANG, A. GRADER et J. DVORKIN : Computer simulations of fluid flow in sediment : from images to permeability. *The Leading Edge*, p. 68–74, January 2010.

-
- [99] S. TORQUATO : Microstructure characterization and bulk properties of disordered two-phase media. *Journal of Statistical Physics*, 45(5/6):843–873, 1986.
- [100] S. TORQUATO : Effective stiffness tensor of composite media-I. Exact series expansions. *J. Mech. Phys. Solids*, 45(9):1421–1448, 1997.
- [101] S. TORQUATO et B. LU : Rigorous bounds on the fluid permeability : Effect of polydispersivity in grain size. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 2:487–490, 1990.
- [102] P. VAPEAS et G. DASSIOS : Stokes flows in ellipsoidal geometry. *J. Math. Physics*, 47, 2006.
- [103] P.-G. VINCENT, P. SUQUET, Y. MONERIE et H. MOULINEC : Effective flow surface of porous materials with two populations of voids under internal pressure : II. full-field simulations. *Int. J. Plasticity*, 56:74–98, 2014.
- [104] H. L. WEISSBERG et S. PRAGER : Viscous flow through porous media. III. Upper bounds on the permeability for a simple random geometry. *Physics of Fluids*, 13(12):2958–2965, 1970.
- [105] A. WIEGMANN : Computation of the permeability of porous materials from their microstructure by fff-stokes. *Berichte des Fraunhofer ITWM*, 129, 2007.
- [106] J. WILLIS : Bounds and self-consistent estimates for the overall properties of anisotropic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 25:185–202, 1977.