



Contribution de la Micromécanique à l'étude des phénomènes de transport et de couplage poromécanique dans les milieux poreux: Application aux phénomènes de gonflement des géomatériaux

Éric Lemarchand

► To cite this version:

Éric Lemarchand. Contribution de la Micromécanique à l'étude des phénomènes de transport et de couplage poromécanique dans les milieux poreux: Application aux phénomènes de gonflement des géomatériaux. domain_other. Ecole des Ponts ParisTech, 2001. English. NNT : . pastel-00001487

HAL Id: pastel-00001487

<https://pastel.hal.science/pastel-00001487>

Submitted on 18 Jul 2006

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.

THÈSE
présentée pour l'obtention du diplôme de

DOCTEUR
DE
L'ÉCOLE NATIONALE DES PONTS ET CHAUSSÉES
Spécialité : Structures et Matériaux

par

ERIC LEMARCHAND

Sujet de la thèse :

**Contribution de la micromécanique à l'étude des phénomènes de
transport et de couplage poromécanique dans les milieux poreux :**

Application aux phénomènes de gonflement des géomatériaux

soutenue le 21 Mars 2001
devant le jury composé de :

J-L. Auriault	<i>Président</i>
D. Kondo	<i>Rapporteur</i>
F-J. Ulm	<i>Rapporteur</i>
O. Coussy	<i>Examineur</i>
E. Leca	<i>Examineur</i>
L. Dormieux	<i>Directeur de thèse</i>

(...) *"Il reste à aborder la question de la condition et du statut des étudiants. Et d'abord quelles sont les clés ou règles principales que l'on doit respecter pour se forger une image de la vérité, principalement en science. On en compte généralement six ou sept : un esprit humble, le désir d'apprendre, une vie tranquille, une recherche silencieuse, la pauvreté, un pays étranger."* (...) *"A ces six clés, s'en ajoute une autre : l'amour de ceux qui enseignent. En effet, il faut aimer et respecter ses précepteurs comme ses parents. De même que ceux-ci sont les géniteurs du corps, ceux-là sont les géniteurs de l'esprit, non pas parce qu'ils propagent la substance de leur esprit, mais parce qu'ils engendrent la sagesse dans l'esprit de leur auditoire, en améliorant leur nature."* (...)

Simone da Borsano, humaniste italien du XIV^{ème} siècle, prologue à la *Lectura Clementinarum*.

Je souhaite remercier Monsieur Jean-Louis Auriault, qui m'a fait l'honneur de présider mon jury de thèse ainsi que Messieurs Djimédo Kondo et Franz-Josef Ulm, qui ont accepté la lourde tâche d'être rapporteurs de ce mémoire. Je tiens également à remercier Messieurs Olivier Coussy et Eric Leca d'avoir participé à l'évaluation de ce travail.

Ce travail de thèse tient son fondement dans la créativité, la rigueur et la pédagogie du Professeur Luc Dormieux, à qui j'adresse, ici, mes plus profonds remerciements. Il est un exemple que je m'efforcerai de suivre du mieux possible tout au long de ma carrière scientifique.

Je souhaite également remercier Patrick de Buhan, directeur du CERMMO, qui m'a accueilli dans son équipe où j'ai bénéficié de conditions de travail remarquables pour préparer cette thèse. Un grand merci à Denise, Samir, Denis, Jérôme, Vincent, Bruno, Guy, Mohammed et Ano (dans le désordre).

Je profite de l'occasion pour saluer les doctorants et chercheurs des autres centres d'enseignement et de recherche de l'Ecole nationale des ponts et chaussées. Merci aussi à tous ceux qui m'ont aidé ou soutenu d'une manière ou d'une autre. Je pense notamment à tous mes proches (ils se reconnaîtront ici), ma famille et *mes meilleurs copains*.

Mon grand-père est sans aucun doute à la base de cette réalisation. Il a su m'entraîner dans la voie périlleuse des longues études qu'il aurait mérité de suivre.

Je n'oublie pas, bien évidemment, Séverine qui a dû supporter mes humeurs et qui a su rendre cette expérience plus facile. Je leur dédie à tous deux ce travail.

Table des matières

I	Introduction générale	17
II	Modélisation macroscopique des phénomènes de transport	25
1	Modélisation macroscopique du transport diffusif	27
1.1	Introduction	29
1.2	Conservation de la masse	29
1.2.1	dérivations spatiale et temporelle de grandeurs moyennes	31
1.2.2	formulation macroscopique du principe	33
1.2.3	flux de masse advectif, diffusif, dispersif	33
1.3	Modélisation macroscopique de la diffusion	34
1.3.1	hypothèses de la modélisation	35
1.3.2	structure de la modélisation macroscopique	36
1.4	Estimations du coefficient de diffusion	38
1.4.1	le schéma de Mori-Tanaka	40
1.4.2	le schéma différentiel	45
1.5	La diffusion macroscopique par l’homogénéisation périodique	48
1.5.1	principe de l’homogénéisation périodique	48
1.5.2	approche variationnelle de l’homogénéisation périodique	50
1.5.3	interprétation géométrique du coefficient de tortuosité	52
1.5.4	estimations numériques du coefficient de diffusion dans le cas périodique	60
1.6	Conclusions	64
2	Influence de la fissuration sur les phénomènes de diffusion et d’advection	67
2.1	Introduction	69
2.2	Les différentes échelles du problème	70
2.3	Traction et ouverture de fissure	72
2.4	Transport diffusif dans un milieu poreux fissuré	74
2.4.1	le passage <i>micro</i> → <i>méso</i>	74

2.4.2	le passage <i>méso</i> $\rightarrow$ <i>macro</i>	75
2.4.3	estimations du tenseur de diffusion du milieu non-fissuré (micro $\rightarrow$ méso)	76
2.4.4	estimations du tenseur de diffusion macroscopique (méso $\rightarrow$ macro)	78
2.5	Transport advectif dans un milieu poreux fissuré	82
2.6	Conclusions	85
3	Diffusion de vapeur d'eau dans un milieu poreux en présence d'advection	87
3.1	Introduction	89
3.2	Modélisation à l'échelle microscopique	90
3.2.1	définitions générales	90
3.2.2	le mélange air-vapeur	91
3.3	Modélisation à l'échelle macroscopique	93
3.3.1	le mouvement d'ensemble	93
3.3.2	le mouvement relatif de la vapeur d'eau	96
3.3.3	modélisation macroscopique du flux diffusif	100
3.3.4	modélisation macroscopique du flux dispersif mécanique	101
3.3.5	modélisation macroscopique du flux dispersif total	102
3.4	Conclusions	103
4	Annexes de la partie II	105
4.1	Interprétation mécanique de la loi de Fick	107
4.2	Le problème d'Eshelby pour le transport diffusif	109
4.2.1	inclusion ellipsoïdale dans un milieu isotrope transverse	109
4.2.2	inhomogénéité ellipsoïdale dans un milieu isotrope transverse	111
4.2.3	estimation de Mori-Tanaka dans le cas ellipsoïdal de révolution	112
4.3	Principes de minimisation	113
4.3.1	principe du minimum en flux	113
4.3.2	principe de minimum en concentration	113
4.4	Prise en compte de l'interaction entre les fissures	115
4.5	Annexe 5	119
4.6	Annexe 6	121
4.7	Annexe 7	123
4.8	Annexe 8	125
4.9	Annexe 9	127

III	Approche micromécanique des comportements poroélastiques linéaires	129
5	Approche micromécanique en élasticité linéaire	131
5.1	Comportement élastique à état initial naturel	133
5.2	Comportement élastique à état initial non-naturel	136
6	Approche micromécanique en poroélasticité linéaire	141
6.1	Introduction	143
6.2	Homogénéisation du comportement poroélastique linéaire	144
6.2.1	équations d'état de la poroélasticité linéaire	144
6.2.2	approche alternative des équations de la poroélasticité linéaire . . .	147
6.2.3	extension au cas non saturé	149
IV	Application au gonflement des argiles	153
7	Introduction	155
7.1	Le gonflement des argiles	157
7.1.1	un aperçu sur la microstructure des argiles	157
7.1.2	le phénomène d'hydratation	160
7.1.3	le gonflement osmotique	161
7.1.4	bilan	162
7.2	Manifestation du gonflement osmotique des argiles	163
8	Interprétation physique du gonflement osmotique	167
8.1	Étude de l'interaction particules/soluté	169
8.2	Théorie de la double couche diffuse	172
8.3	Approche mécanique du gonflement osmotique	174
8.3.1	l'approche classique (du type Van't Hoff)	174
8.3.2	définition tensorielle de la contrainte de gonflement	180
8.4	Conclusions	185
9	Lois constitutives macroscopiques	187
9.1	Une approche thermodynamique macroscopique	189
9.1.1	équations d'état macroscopiques	190
9.1.2	modélisation d'un essai de gonflement	194
9.1.3	extension aux transformations finies	196
9.2	Une approche micromécanique	199
9.2.1	définition des contraintes locales	199

9.2.2	principe de la méthode d'homogénéisation	200
9.2.3	comparaison avec l'approche macroscopique	202
9.2.4	application au comportement des argilites	205
10	Simulation de l'essai œdométrique en phase transitoire	215
10.1	Introduction	217
10.2	Approche phénoménologique du transport	217
10.2.1	l'approche (usuelle) thermodynamique	218
10.2.2	l'approche mécanique	222
10.3	Simulation de l'essai	227
10.3.1	le dispositif expérimental	227
10.3.2	analyse des résultats expérimentaux	230
10.3.3	les équations du problème	234
10.3.4	tassement de l'échantillon	236
10.4	Résolution	237
10.4.1	problème sans couplage	238
10.4.2	présentation des simulations théoriques	242
10.4.3	problème avec couplage	243
10.4.4	présentation des résultats théoriques	248
11	Annexes de la partie IV	253
11.1	A1 : Caractérisation des principaux groupes d'argiles	255
11.2	A2 : Définition du potentiel chimique	257
11.3	A3 : Résolution numérique de l'équation de Poisson-Boltzmann	259
11.3.1	le cas linéaire	260
11.3.2	le cas non linéaire	263
11.4	A4 : Solutions approchées du problème de la double couche	271
11.5	A5 : Positivité de π^g et $\pi^{g'}$	275
11.6	A6 : Extension aux transformations finies	277
11.7	A7 : Quelle définition de l'efficacité osmotique ?	281
11.8	A8 : Résolution de l'équation de la chaleur	283
11.8.1	résolution de l'équation de la chaleur avec terme de source	284
11.8.2	processus de diagonalisation	286
V	Application à l'alcali-réaction dans les bétons	289
12	Origine microscopique de l'alcali-réaction	291
12.1	Introduction	293

12.2 Mécanismes de formation du gel	295
12.2.1 le mécanisme trans-solution	296
12.2.2 le mécanisme topochimique	297
13 Modélisation micromécanique de l'alcali-réaction	299
13.1 Modélisation du gonflement libre	301
13.1.1 pression de gel uniforme	302
13.1.2 pression de gel non uniforme	308
13.2 Modélisation du remplissage de la porosité connectée	316
13.2.1 cas d'une même morphologie de pores	318
13.2.2 cas de deux morphologies de pores	324
13.2.3 généralisation à n familles de pores de même morphologie	327
13.3 Conclusions	330
 VI Conclusions et Perspectives	 335

Table des figures

1.1	représentation d'un milieu biphasique : cas d'un fluide à deux composantes	30
1.2	définition des différentes échelles	31
1.3	estimations du coefficient de diffusion : le cas sphérique.	43
1.4	influence de l'anisotropie.(Mori-Tanaka)	44
1.5	influence de l'aplatissement sur l'anisotropie du tenseur de tortuosité . . .	45
1.6	représentation du schéma différentiel	46
1.7	anisotropie du tenseur de diffusion : $a_1/a_3 = 3$	48
1.8	tronçons rectilignes perpendiculaires	54
1.9	cellule de base	56
1.10	approche en flux	57
1.11	approche en concentration	59
1.12	cellule de base cubique avec inclusion sphérique ou cubique	60
1.13	cas périodique : inclusion solide sphérique ou cubique.	61
1.14	cellule de base parallélépipédique avec inclusion ellipsoïdale ou parallépi- pédique	62
1.15	cas périodique : inclusion solide ellipsoïdale $a_1/a_3 = 10$	63
1.16	variations de D_{33}^{per} , D_{33}^{MT} et D_{33}^{min}	64
2.1	orientation des fissures	69
2.2	représentation des différentes échelles du problème	71
2.3	ouverture d'une fissure sous traction	72
2.4	simulation numérique du processus diffusif	80
2.5	flux advectif à l'échelle mésoscopique	83
2.6	simulation numérique du processus advectif	86
5.1	décomposition du problème élastique : $(P)=(P')+(P'')$	138
6.1	décomposition du problème poroélastique : $(P)=(P')+(P'')$	145
7.1	schématisation d'une argile	158
7.2	gonflement intracristallin d'une Montmorillonite (d'après Madsen et Von- moos [87])	161

7.3	mesure expérimentale de la pression de gonflement	164
8.1	modèle conceptuel de la microstructure d'une argile gonflante au NaCl . .	170
8.2	origine de la pression de gonflement	173
8.3	évolution de la pression de gonflement en fonction de n_{ext}^s	176
8.4	simulation des essais de compression	178
8.5	bilan des efforts dans le plan des particules	181
8.6	état de contrainte moyen dans un pore	182
8.7	bilan des forces	184
9.1	représentation macroscopique d'un milieu poreux saturé par une solution saline	189
9.2	gonflement osmotique libre	196
9.3	écart au principe de la contrainte effective	197
9.4	un modèle conceptuel pour les argilites	206
9.5	représentation schématique d'une argilite	207
9.6	évolution du module de compression de l'argilite	211
9.7	évolution de la déformation "osmotique" de l'argilite	211
9.8	correspondance des écarts à l'unité	214
10.1	approximation linéaire de $\pi^g = \pi^g(p^s)$	227
10.2	cellule œdométrique (d'après Mody et Hale [96])	228
10.3	déplacement vertical expérimental (KCl) : $s_\infty \approx 0.25$ mm	230
10.4	déplacement vertical expérimental (CaCl_2) : $s_\infty \approx 0.06$ mm	231
10.5	évolution expérimentale de la pression de pore (KCl)	232
10.6	évolution expérimentale de la pression de pore (CaCl_2)	233
10.7	schématisation de l'évolution de la déformation de l'échantillon ($\Delta n^s > 0$) .	241
10.8	évolution théorique de la pression de pore (KCl) [$\omega = 1$]	243
10.9	évolution théorique de la pression de pore (CaCl_2) [$\omega = 1$]	244
10.10	évolution théorique du déplacement vertical (KCl) [$\omega = 1$]	245
10.11	évolution théorique du déplacement vertical (CaCl_2) [$\omega = 1$]	246
10.12	évolution théorique de la pression de pore (KCl)	248
10.13	évolution théorique de la pression de pore (CaCl_2)	249
10.14	évolution théorique du déplacement vertical (KCl)	250
10.15	évolution théorique du déplacement vertical (CaCl_2)	251
11.1	interprétation mécanique du potentiel chimique	257
11.2	réduction du domaine d'étude	259
11.3	maillage du domaine d'étude	261
11.4	distribution anionique et cationique (Montmorillonite)	268

11.5 distribution anionique et cationique (Illite)	269
11.6 distribution anionique et cationique (Kaolinite)	269
11.7 comparaison solution approchée/solution exacte	272
13.1 influence de k ($\mu^g = 0.25\%$)	306
13.2 évolution de la déformation macroscopique	308
13.3 orientation des fissures	309
13.4 $T_{33}^f = T_{33}^f(\omega_f, \epsilon)$ pour $\epsilon = 1, 0.1, 0.025, 0.01$	312
13.5 influence de la porosité initiale	314
13.6 mécanisme de remplissage de l'espace poreux (configuration relâchée) . . .	317
13.7 schématisation du remplissage de l'espace poreux	319
13.8 cinétique simplifiée de formation du gel	322
13.9 évolution de la déformation macroscopique	323
13.10 les différentes séquences du comportement	324
13.11 schématisation du remplissage n familles de pores	327
13.12 remplissage de n familles de pores	329

Première partie

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Les géomatériaux, qu'ils soient naturels (sols, roches) ou artificiels (béton), sont caractérisés par l'existence d'une porosité dans laquelle un fluide interagit avec la phase solide. On les groupe sous la dénomination commune de *Milieux Poreux*.

D'un point de vue mécanique, la porosité représente une absence de matière qui favorise la déformabilité d'un géomatériau. Dans une logique de transport, elle représente le domaine théoriquement accessible au fluide.

Terzaghi est le premier à avoir formulé le comportement mécanique d'un milieu poreux dans la perspective d'applications au domaine de la Mécanique des Sols. Son apport essentiel est d'avoir introduit le concept de contrainte effective¹ $\underline{\underline{\sigma}}' = \underline{\underline{\sigma}} + p\underline{\underline{\delta}}$ définie comme l'effort intérieur responsable des déformations du squelette solide en présence d'un fluide sous pression saturant l'espace poreux connecté.

On doit à Biot ([15], [16], [17]) d'avoir établi la première formulation générale du comportement réversible des milieux poreux qui s'affranchissait des hypothèses spécifiques de la Mécanique des Sols. La théorie élastique linéaire de Biot fait désormais référence et a donné lieu à de très nombreux développements.

Dans la vision du poreux tel que Biot l'envisage, le milieu poreux est défini par la superposition de plusieurs milieux continus en interaction : le squelette solide et le (ou les) fluide(s) saturant l'espace poreux connecté.

A cette échelle, que nous appellerons *macroscopique*, un volume élémentaire est lui aussi la superposition de plusieurs particules matérielles. On y trouve donc la particule de squelette qui constitue la perception macroscopique de la phase solide, et la(les) particule(s) de fluide. Elles sont indiscernables géométriquement, c'est-à-dire toutes situées au même point macroscopique.

L'approche macroscopique a largement fait la preuve de son efficacité dans l'analyse du comportement des géomatériaux et des géostructures. Mais par nature, ces théories ne sont cependant pas en mesure d'exploiter de façon précise les données locales sur le comportement des constituants, la morphologie de l'espace poreux et plus généralement sur la physique qui se joue à la petite échelle. C'est à ce stade que l'approche micromécanique entre en scène.

Le pari relevé par la micromécanique est la prévision des données géométriques et mécaniques relatives à l'échelle inférieure, *i.e.* celle où l'on distingue géométriquement les différentes phases.

La difficulté de cette démarche réside dans le caractère forcément statistique, voire approximatif, de ces données. Il convient par ailleurs de développer les outils mathématiques et mécaniques permettant le passage de l'échelle des hétérogénéités à l'échelle macroscopique.

¹écrit ici avec la convention de contrainte positive en traction de la MMC

pique. En tout état de cause, cette démarche repose sur la condition de séparation des échelles détaillée ci-après.

Dans le cadre heuristique de l'homogénéisation des milieux périodiques, si l'on vérifie la séparation des échelles microscopique et macroscopique, il est possible d'identifier le comportement macroscopique à partir d'un problème posé sur la cellule de base dont la géométrie est connue.

En revanche, pour les matériaux hétérogènes à structure aléatoire, la faisabilité de la démarche d'homogénéisation repose sur la possibilité de définir à une échelle plus fine un volume représentant statistiquement le géomatériau, appelé *volume élémentaire représentatif* (v.e.r.). On identifie alors le comportement macroscopique à partir de la résolution d'un problème mécanique posé sur le v.e.r..

Soit d la taille caractéristique de l'échelle microscopique, *i.e.* celle des hétérogénéités. Soit L la taille caractéristique de l'échelle macroscopique, *i.e.* celle de la structure. La légitimité de l'existence d'un v.e.r. est assurée si sa taille caractéristique ℓ vérifie les conditions suivantes :

- $\ell \ll L$: condition nécessaire pour envisager une représentation continue de la structure,
- $\ell \gg d$: condition nécessaire pour pouvoir définir un comportement mécanique homogène équivalent à partir de la réponse du v.e.r..

Dans ce cas, c'est-à-dire si l'on suppose réalisée *la séparation des échelles*, un matériau hétérogène pourra être remplacé par un milieu homogène équivalent déduit de la résolution d'un problème aux limites posé sur le v.e.r.. La représentation des contraintes et des déformations dans le v.e.r. à l'échelle macroscopique est déduite des champs locaux de ces grandeurs par une opération de moyenne.

En particulier, pour un v.e.r. Ω , la définition la plus simple de la moyenne sur Ω d'une grandeur a , notée $\langle a \rangle_\Omega$, est la suivante :

$$\langle a \rangle_\Omega (\underline{x}) = \frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega a(\underline{z}) d\Omega \quad (1)$$

où $\underline{z}$ (resp. $\underline{x}$) désigne l'échelle d'espace locale (resp. globale). Dans certains cas (cf. 1.6), des définitions plus sophistiquées pourront être utiles.

Dans la suite, on s'attachera à préciser avec soin les diverses échelles du problème et à vérifier la séparation de celles-ci.

Historiquement, les méthodes d'analyse micromécanique ont été d'abord largement utilisées pour étudier le comportement mécanique des solides hétérogènes. Puis, plusieurs auteurs ont ouvert la voie vers l'étude des milieux poreux saturés, tant en ce qui concerne

les propriétés de transport que le couplage fluide/squelette ([53], [54]). Le présent document s'inscrit dans le prolongement de ces travaux. La problématique du transport est abordée dans le cadre de l'étude des phénomènes de diffusion et de dispersion. Le couplage fluide/solide est abordé dans des situations où une interaction physico-chimique se superpose à l'interaction mécanique traitée classiquement.

- **La première partie** de ce mémoire est consacrée à la problématique de la modélisation macroscopique du transport.

Le premier chapitre s'intéresse plus précisément au transport d'une espèce en solution dans la porosité des milieux poreux saturés. L'écriture du principe de conservation de la masse de cette espèce à l'échelle du pore constitue le point de départ. Elle permet d'identifier les contributions advective, diffusive et éventuellement dispersive du flux de masse. Une analyse dimensionnelle permet alors de caractériser un régime d'advection modérée et suffisamment lent pour lequel, sous l'hypothèse d'incompressibilité de la phase fluide, le flux diffusif macroscopique peut être déterminé à partir d'un problème purement diffusif à l'échelle microscopique. On exploite alors l'analogie avec les problèmes thermique et mécanique usuels pour déterminer les propriétés diffusives à l'échelle macroscopique ([125], [126]). Dans la perspective d'assurer la connexité du réseau poreux, le milieu poreux est représenté par une matrice fluide dans laquelle on introduit des inclusions solides. On fournit une interprétation micromécanique du concept de tortuosité pour lequel on propose des estimations issues de schémas classiques (Mori-Tanaka, Schéma Différentiel). Les résultats obtenus sont finalement confrontés aux résultats de l'homogénéisation périodique ([4], [6]) en utilisant le logiciel de calcul par Éléments Finis CASTEM2000 sur différentes morphologies tridimensionnelles de l'échelle microscopique.

Le deuxième chapitre soulève la question du transport dans les milieux poreux fissurés. En utilisant des résultats classiques de la mécanique linéaire de la rupture, on s'attache à estimer l'influence de la microfissuration sur la perméabilité et le coefficient de diffusion macroscopiques de ces matériaux. La modélisation micromécanique proposée permet de déterminer, dans le cas d'évolutions réversibles, l'effet des contraintes macroscopiques sur ces paramètres.

On étudie, dans le troisième chapitre, la question du transport de la vapeur d'eau dans l'air à la base d'une modélisation du séchage dans les géomatériaux. Ce point est abordé en utilisant la technique d'homogénéisation périodique à variables séparées ([4], [6]). On identifie les contributions advective, diffusive et dispersive macroscopiques.

piques. On montre, en particulier, que le gradient de la pression du mélange gazeux intervient de façon explicite dans l'expression du flux de masse dispersif.

- **La deuxième partie** de ce mémoire présente la démarche micromécanique conduisant à la détermination des comportements élastique et poroélastique linéaires des matériaux. Les raisonnements abordés et les résultats présentés seront largement exploités dans les troisième et quatrième parties de ce mémoire consacrées à la problématique du gonflement des géomatériaux.
- Le gonflement osmotique des argiles constitue une première application possible de la démarche micromécanique. C'est l'objet de la **troisième partie**.

Le premier chapitre s'intéresse à la microstructure de l'argile à une échelle où elle se présente comme un enchevêtrement de particules solides. On se penche en particulier sur le lien entre la microstructure et les phénomènes de gonflement. On rappelle que le gonflement osmotique auquel est consacrée cette partie intervient chronologiquement après une première phase de gonflement liée à l'hydratation.

Le deuxième chapitre analyse la physique à l'échelle microscopique. Une première modélisation (théorie de la double couche électrique) est présentée dans le cadre d'une représentation de la microstructure comme un amas de particules parallèles. Elle offre un cadre théorique permettant d'expliquer le mécanisme de gonflement osmotique et de discerner les paramètres qui influent sur lui. On montre que les efforts intérieurs dans le fluide en interaction physico-chimique et mécanique avec le solide peuvent être représentés par un tenseur de contrainte de gonflement, uniforme à l'échelle d'un pore.

L'objectif du troisième chapitre est de proposer une modélisation macroscopique capable d'intégrer la physique comprise par la théorie de la double couche, tout en s'affranchissant des diverses insuffisances de celle-ci liées au caractère simpliste de la représentation géométrique.

Ce travail est d'abord présenté dans un cadre thermodynamique conduisant à une écriture sous forme différentielle de la loi de comportement macroscopique. Celle-ci prend en compte l'existence d'un gonflement osmotique par le biais d'une déviation par rapport à une formulation classique en contrainte effective de Terzaghi. En outre, l'amplitude du gonflement dans certains cas nous a incité à étendre l'analyse au cadre des transformations finies.

On aborde ensuite la modélisation macroscopique dans le cadre d'une approche micromécanique. Son originalité réside dans la représentation des efforts intérieurs dans

la phase fluide qui intègrent, en plus de la pression totale du fluide, la contrainte de gonflement définie à l'échelle du pore. Elle confirme la structure des équations d'état obtenues avec l'approche thermodynamique. Elle démontre, en outre, que l'élasticité macroscopique d'une argile est la combinaison de deux contributions : l'une purement mécanique et l'autre de nature physico-chimique.

On s'intéresse finalement à la formulation du comportement des argilites. L'argilite est interprétée comme un composite à deux phases : l'une identifiée à un matériau argileux potentiellement gonflant et l'autre à une phase complémentaire composée essentiellement de grains inertes sur le plan physico-chimique. En exploitant les résultats de la micromécanique, on discute l'effet de la morphologie, de la fraction d'argile et du contraste des caractéristiques élastiques des deux phases. On propose finalement une relation très simple permettant de passer du potentiel de gonflement osmotique d'une argile à celui d'une argilite.

Le quatrième chapitre constitue une validation de la loi de comportement macroscopique établie au chapitre précédent dans le cas des argilites. Pour les faibles concentrations salines, une représentation continue du sel à l'échelle du pore est illusoire. Par conséquent, l'approche par homogénéisation des lois de transport est impossible. On opte donc pour un raisonnement macroscopique et l'on établit les lois de transport de l'eau et du sel à partir des équations exprimant l'équilibre de ces constituants de la phase fluide à l'échelle macroscopique. Elles rendent compte non seulement de l'interaction eau/solide (Darcy) et de l'interaction eau/sel (Fick) comme cela est fait classiquement, mais aussi de l'interaction sel/solide à l'origine du gonflement osmotique. Au passage, on examine les aspects thermodynamiques de cette problématique (positivité de la dissipation, symétries d'Onsager).

La combinaison de ces lois de transport avec la loi de comportement macroscopique fournit alors un cadre pour l'étude des régimes transitoire et asymptotique d'un essai de gonflement osmotique à l'œdomètre. Ce travail a été effectué dans le cadre d'une collaboration avec la société TOTAL.

- **La dernière partie** de ce mémoire se consacre à la modélisation micromécanique du phénomène d'alcali-réaction. Ce phénomène se caractérise par la mise en pression d'une substance hydrophyle à l'intérieur de l'espace poreux d'un béton. Partant des observations et interprétations effectuées à l'échelle microscopique par de nombreux auteurs, la modélisation proposée se focalise sur l'aspect proprement mécanique en considérant la masse de gel formée comme une donnée du problème. Dans le cas du gonflement libre, on aboutit alors à une relation donnant la déformation macroscopique en fonction de cette donnée. Le rôle essentiel de la fraction de l'espace poreux

saturé par le gel et de sa morphologie est mis en évidence.

Deuxième partie

**MODÉLISATION MACROSCOPIQUE
DES PHÉNOMÈNES DE
TRANSPORT**

Chapitre 1

Modélisation macroscopique du transport diffusif

Sommaire

1.1	Introduction	29
1.2	Conservation de la masse	29
1.2.1	dérivations spatiale et temporelle de grandeurs moyennes	31
1.2.2	formulation macroscopique du principe	33
1.2.3	flux de masse advectif, diffusif, dispersif	33
1.3	Modélisation macroscopique de la diffusion	34
1.3.1	hypothèses de la modélisation	35
1.3.2	structure de la modélisation macroscopique	36
1.4	Estimations du coefficient de diffusion	38
1.4.1	le schéma de Mori-Tanaka	40
1.4.2	le schéma différentiel	45
1.5	La diffusion macroscopique par l'homogénéisation périodique	48
1.5.1	principe de l'homogénéisation périodique	48
1.5.2	approche variationnelle de l'homogénéisation périodique	50
1.5.3	interprétation géométrique du coefficient de tortuosité	52
1.5.4	estimations numériques du coefficient de diffusion dans le cas périodique	60
1.6	Conclusions	64

1.1 Introduction

Le présent chapitre a pour principal objectif d'établir à l'échelle macroscopique la loi de diffusion d'un soluté dans une phase fluide d'un milieu poreux. Lorsque l'on aborde la description géométrique d'un milieu poreux multiphasique, deux points de vue sont possibles. Le premier consiste à se placer à une échelle d'espace suffisamment fine, dite microscopique dans la suite, pour que les diverses phases constituant un volume élémentaire de milieu poreux apparaissent comme des domaines géométriques distincts. A un instant donné, un point géométrique se trouve donc, à cette échelle, dans une phase bien identifiée. Le second point de vue, dit macroscopique, considère le même volume élémentaire comme la superposition d'autant de particules matérielles qu'il y a de phases, à présent indiscernables géométriquement, c'est-à-dire localisées à cette échelle au même point géométrique.

A l'une ou l'autre de ces deux échelles, la description du transport diffusif d'une espèce dans une phase (par exemple du sel dans de l'eau) repose sur le principe de conservation de la masse et sur une modélisation du phénomène de diffusion moléculaire. Partant de l'écriture de ces deux arguments à l'échelle microscopique, un changement d'échelle d'espace permet d'obtenir la formulation homologue à l'échelle macroscopique.

Après avoir rappelé le principe du changement d'échelle pour la loi de conservation, on se penche sur la structure de la modélisation macroscopique du phénomène de diffusion dont on précise le domaine de validité à l'aide de paramètres adimensionnels.

Il s'agit ensuite d'estimer la valeur des tenseurs de diffusion et de tortuosité qu'elle introduit en fonction des paramètres morphologiques à l'échelle microscopique qui caractérisent la géométrie de l'espace occupé par la phase siège de la diffusion.

A cet effet, on met en œuvre d'une part les méthodes d'estimation en matériaux hétérogènes et d'autre part les résultats de l'homogénéisation périodique ([56], [8], [7]), que l'on applique à des descriptions bi- et tridimensionnelles de la géométrie.

1.2 Conservation de la masse

Partant de l'écriture à l'échelle microscopique d'une loi de conservation, cette section rappelle, sur l'exemple de la conservation de la masse, comment l'on obtient l'écriture du même principe à l'échelle macroscopique. On pourra se reporter par exemple à Gilbert [62] et Bear & Bachmat [14] pour une application systématique de cette démarche à l'ensemble des lois de conservation.

Dans le cadre de ce travail, il s'agit tout particulièrement d'établir la relation entre les descriptions microscopique et macroscopique de la cinématique. Ce point constitue en effet un préalable indispensable dans la perspective de déduire la modélisation macroscopique du phénomène de diffusion de sa modélisation à l'échelle microscopique.

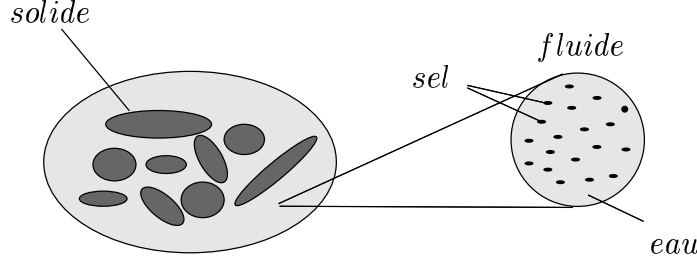


FIG. 1.1: représentation d'un milieu biphasique : cas d'un fluide à deux composantes

Pour simplifier l'exposé, on se place dans le cas biphasique : les exposants f et s désignent respectivement la phase fluide siège de la diffusion et la phase solide. On note ρ^γ et $\underline{V}^\gamma$ la masse volumique et la vitesse à l'échelle microscopique de l'espèce γ de la phase f dans laquelle on étudie la diffusion de cette espèce γ . L'équation de conservation de la masse à cette échelle, dans le domaine $\mathcal{P}^f$ occupé par la phase f , s'écrit :

$$\frac{\partial \rho^\gamma}{\partial t} + \text{div}_z \rho^\gamma \underline{V}^\gamma = 0 \quad (\mathcal{P}^f) \quad (1.1)$$

où l'opérateur de divergence porte sur la variable d'espace à l'échelle microscopique, notée $\underline{z}$. On note I^{fs} l'interface de la phase fluide avec la phase solide.

Par ailleurs, ρ_M^γ et $\underline{V}_M^\gamma$ désignant maintenant la masse volumique (intrinsèque) et la vitesse de l'espèce γ à l'échelle macroscopique, la loi de conservation macroscopique s'écrit classiquement sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi^f \rho_M^\gamma) + \text{div}_x \varphi^f \rho_M^\gamma \underline{V}_M^\gamma = c(\underline{x}, t) \quad (1.2)$$

où la divergence opère à présent sur la variable d'espace macroscopique notée $\underline{x}$, φ^f désignant la fraction volumique de la phase f et $c(\underline{x}, t)$ une éventuelle source de masse de l'espèce γ à l'échelle macroscopique. La question soulevée est celle de la relation entre le

¹'M' pour macroscopique

champ $\underline{V}^\gamma$ dans un volume élémentaire représentatif et le vecteur $\underline{V}_M^\gamma$, en sorte que la compatibilité de (1.1) et (1.2) soit assurée.

1.2.1 dérivations spatiale et temporelle de grandeurs moyennes

On admet qu'il est possible de définir un volume élémentaire représentatif du milieu poreux. Les dimensions caractéristiques des hétérogénéités, du v.e.r. et du système macroscopique étudié, notées respectivement d , $\mathcal{R}$ et $\mathcal{L}$ sont soumises aux conditions $d \ll \mathcal{R} \ll \mathcal{L}$.

On introduit tout d'abord l'opérateur de moyenne sur un v.e.r. . Plus précisément, soit U_o un v.e.r. centré à l'origine de l'espace et $U(\underline{x}) = U_o + \underline{x}$ le domaine élémentaire obtenu par la translation de vecteur $\underline{x}$ à partir de U_o . Soit encore $f(\underline{z})$ une fonction infiniment dérivable à support borné dans U_o , d'intégrale unité. On définit la moyenne $\bar{e}$ au point macroscopique $\underline{x}$ d'une grandeur e par :

$$\bar{e}(\underline{x}, t) = \int e(\underline{z}, t) f(\underline{z} - \underline{x}) dV_z \quad (1.3)$$

Cette définition est évidemment conditionnée par le choix de la fonction f .

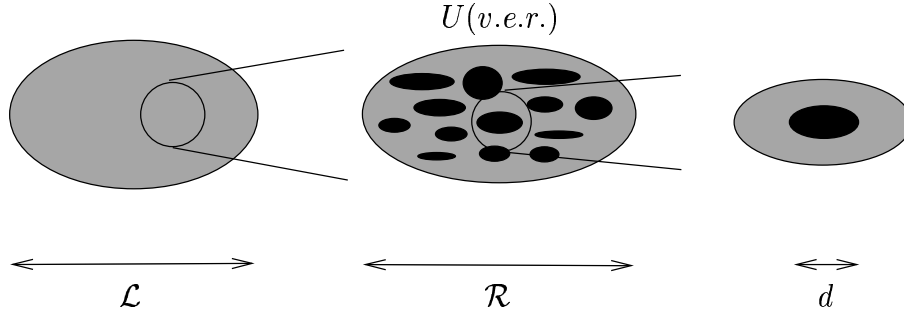


FIG. 1.2: définition des différentes échelles

Dans la pratique, f peut être choisie arbitrairement proche de la fonction $C_{U_o} / |U_o|$, où C_{U_o} est la fonction caractéristique du domaine U_o de volume $|U_o|$. $C^f(\underline{z}, t)$ désignant la fonction caractéristique du domaine $\mathcal{P}^f$, on introduit également les moyennes apparente $\langle e \rangle_f$ et intrinsèque $\bar{e}^f$ au point macroscopique $\underline{x}$ d'une grandeur e définie sur $\mathcal{P}^f$:

$$\langle e \rangle_f(\underline{x}, t) = \overline{C^f e}(\underline{x}, t) = \int C^f(\underline{z}, t) e(\underline{z}, t) f(\underline{z} - \underline{x}) dV_z \quad (1.4)$$

$$\bar{e}^f(\underline{x}, t) = \frac{1}{\varphi^f} \langle e \rangle_f(\underline{x}, t) \quad (1.5)$$

$\langle e \rangle_f$ et $\bar{e}^f$ sont rapportées respectivement au volume total du v.e.r. et au volume occupé dans le v.e.r. par la phase f . Avec ces notations, $\bar{\rho}^f$ n'est autre que la masse volumique intrinsèque ρ_M^γ introduite en (1.2).

En vue d'établir (1.2) en tant que correspondant macroscopique de (1.1), il reste à préciser les règles d'échange des opérations de dérivations spatiale et temporelle avec celle de moyenne. On voit tout d'abord que :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \langle e \rangle_f = - \int C^f(\underline{z}, t) e(\underline{z}, t) \frac{\partial f}{\partial z_i}(\underline{z} - \underline{x}) dV_z \quad (1.6)$$

ou encore, en intégrant par parties au sens de la théorie des distributions :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \langle e \rangle_f(\underline{x}, t) = \int \frac{\partial}{\partial z_i} (C^f e)(\underline{z}, t) f(\underline{z} - \underline{x}) dV_z \quad (1.7)$$

Notant δ_{Ifs} la distribution de Dirac dont le support est l'interface I^{fs} et n_i la i -ième composante de la normale unitaire à I^{fs} orientée de f vers s , on montre que $\partial C^f / \partial z_i = -n_i \delta_{Ifs}$. Il en résulte que :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \langle e \rangle_f(\underline{x}, t) = \langle \frac{\partial e}{\partial z_i}(\underline{z}, t) \rangle_f - \int_{Ifs} e(\underline{z}, t) n_i(\underline{z}, t) f(\underline{z} - \underline{x}) dS_z \quad (1.8)$$

D'une manière analogue, la dérivation par rapport au temps de $\langle e \rangle_f$ fait apparaître un terme supplémentaire à coté de $\langle \partial e / \partial t \rangle_f$. En effet, compte tenu de (1.4), on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle e \rangle_f(\underline{x}, t) = \langle \frac{\partial e}{\partial t}(\underline{z}, t) \rangle_f + \int \frac{\partial C^f}{\partial t}(\underline{z}, t) e(\underline{z}, t) f(\underline{z} - \underline{x}) dV_z \quad (1.9)$$

L'intégrale dans (1.9) tient compte du mouvement de la frontière de la phase f , en l'absence duquel la quantité $\partial C^f / \partial t$ est nulle. Plus précisément, en notant $\underline{u}$ la célérité de l'interface I^{fs} , on montre que :

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle e \rangle_f(\underline{x}, t) = \langle \frac{\partial e}{\partial t}(\underline{z}, t) \rangle_f + \int_{Ifs} e(\underline{z}, t) (\underline{u} \cdot \underline{n})(\underline{z}, t) f(\underline{z} - \underline{x}) dS_z \quad (1.10)$$

1.2.2 formulation macroscopique du principe

En appliquant (1.8) avec $e = \rho^\gamma V_i^\gamma$ et (1.10) avec $e = \rho^\gamma$, on obtient par sommation, compte tenu de (1.1), la formulation macroscopique du principe de conservation de la masse sous la forme suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi^f \overline{\rho^\gamma}^f) + \text{div}_x(\varphi^f \overline{\rho^\gamma V^\gamma}^f) = \int_{I^{fs}} \rho^\gamma (\underline{u} - \underline{V}^\gamma) \cdot \underline{n} f(\underline{z} - \underline{x}) dS_z \quad (1.11)$$

La confrontation de (1.11) avec (1.2) fournit d'abord la relation recherchée entre les descriptions de la cinématique aux deux échelles d'espace. La compatibilité de (1.1) et (1.2) impose en effet que l'on définisse la vitesse macroscopique $\underline{V}_M^\gamma$ comme la moyenne (intrinsèque) pondérée par les fractions massiques des vitesses dans $\mathcal{P}^f$:

$$\overline{\rho^\gamma}^f \underline{V}_M^\gamma = \overline{\rho^\gamma V^\gamma}^f \quad (1.12)$$

Par ailleurs, le membre de droite de (1.11) permet d'interpréter le terme de source de masse c introduit dans (1.2). Ce dernier représente le flux de masse de l'espèce γ rentrant dans la phase f à travers l'interface I^{fs} . Il est nul en l'absence d'échange de l'espèce γ entre les phases f et s .

1.2.3 flux de masse advectif, diffusif, dispersif

On désigne par² $\underline{V} = f^\gamma \underline{V}^\gamma$ la vitesse de la phase définie à l'échelle microscopique dans $\mathcal{P}^f$ comme la moyenne des vitesses $\underline{V}^\gamma$ des diverses espèces de la phase, pondérée par les poids f^γ .

On notera que la définition de $\underline{V}$ n'est pas unique, divers choix des f^γ étant possibles [88]. Il peut s'agir par exemple des fractions volumique, molaire ou encore massique des espèces dans le mélange. On utilisera dans la suite la moyenne intrinsèque $\overline{\underline{V}}^f$ pour représenter la cinématique de la phase à l'échelle macroscopique.

On peut scinder la quantité $\rho^\gamma \underline{V}^\gamma$ apparaissant dans (1.1) et dans (1.11) en un flux de masse *diffusif* $\underline{j}^\gamma = \rho^\gamma (\underline{V}^\gamma - \underline{V})$ se rapportant au mouvement relatif de l'espèce γ par rapport à celui de la phase f et un flux de masse *advectif* $\rho^\gamma \underline{V}$. Pour des raisons qui apparaîtront à la section 1.3.1, on décompose de plus ce dernier comme la somme de $\overline{\rho^\gamma}^f \underline{V}$ et d'un terme complémentaire $(\rho^\gamma - \overline{\rho^\gamma}^f) \underline{V}$ si bien que (1.1) s'écrit aussi :

$$\frac{\partial \rho^\gamma}{\partial t} + \text{div}_z(\overline{\rho^\gamma}^f \underline{V} + (\rho^\gamma - \overline{\rho^\gamma}^f) \underline{V} + \underline{j}^\gamma) = 0 \quad (1.13)$$

²avec sommation sur γ

On montre [14] que l'on retrouve cette décomposition à l'échelle macroscopique :

$$\overline{\rho^\gamma \underline{V}^{\gamma f}} = \overline{\rho^\gamma}^f \underline{V}^f + \underline{\overline{j}^{\gamma f}} + \overline{\widetilde{\rho^\gamma \underline{V}^{\gamma f}}}^f \quad (1.14)$$

où $\widetilde{a} = a - \overline{a}^f$ désigne l'écart de la grandeur a à sa moyenne intrinsèque $\overline{a}^f$.

Le terme $\overline{\widetilde{\rho^\gamma \underline{V}^{\gamma f}}}^f$ dans (1.14) représente classiquement la *dispersion d'origine mécanique*. On notera en particulier qu'il est d'usage de définir à l'échelle macroscopique la **dispersion totale** comme la somme d'un terme d'origine mécanique ($\overline{\widetilde{\rho^\gamma \underline{V}^{\gamma f}}}^f$) et d'un terme de diffusion moléculaire ($\underline{\overline{j}^{\gamma f}}$).

Le flux de masse macroscopique est ainsi décomposé en flux respectivement advectif ($\overline{\rho^\gamma}^f \underline{V}^f$), diffusif ($\underline{\overline{j}^{\gamma f}}$) et dispersif (mécanique) ($\overline{\widetilde{\rho^\gamma \underline{V}^{\gamma f}}}^f$), de sorte que (1.11) s'écrit encore :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi^f \overline{\rho^\gamma}^f) + \text{div}_x(\varphi^f \overline{\rho^\gamma}^f \underline{V}^f + \underline{\overline{j}^{\gamma f}} + \overline{\widetilde{\rho^\gamma \underline{V}^{\gamma f}}}^f) = \int_{I f s} \rho^\gamma (\underline{u} - \underline{V}^\gamma) \cdot \underline{n} f(\underline{z} - \underline{x}) dS_z \quad (1.15)$$

Par rapport à (1.11), (1.15) met en avant les diverses contributions au flux de masse de l'espèce γ . *A priori*, tous les termes doivent être pris en compte. La possibilité de négliger l'un ou l'autre de ces derniers doit être discutée au cas par cas, en fonction du phénomène étudié.

1.3 Modélisation macroscopique de la diffusion

Le chapitre précédent a précisé la correspondance entre la loi de la conservation de la masse écrite aux échelles microscopique (1.1) et macroscopique (1.15) en présence d'advection, de diffusion et de dispersion.

Dans ce chapitre, on s'intéresse plus particulièrement au flux diffusif macroscopique $\underline{\overline{j}^{\gamma f}}$. A partir d'hypothèses formulées à la petite échelle, où la diffusion est modélisée par la loi de Fick, on montre de quelle façon on aboutit à l'écriture d'une loi de Fick homogénéisée. Deux méthodes sont utilisées : les méthodes d'estimation, classiquement appliquées aux problèmes thermique et mécanique de matériaux hétérogènes, et les méthodes d'homogénéisation des milieux périodiques.

1.3.1 hypothèses de la modélisation

La suite de notre propos fait l'hypothèse de la validité de la loi de diffusion de Fick à l'échelle microscopique où elle s'applique dans tout le volume fluide.

Plus précisément, pour un choix approprié de la vitesse $\underline{V}$ de la phase, on suppose que la diffusion moléculaire de l'espèce γ dans la phase f est contrôlée par le gradient de la masse volumique ρ^γ . La loi de Fick prend donc la forme suivante³ :

$$\underline{j}^\gamma = \rho^\gamma (\underline{V}^\gamma - \underline{V}) = -D^\gamma \underline{\text{grad}}_z \rho^\gamma \quad (\mathcal{P}^f) \quad (1.16)$$

où D^γ est le coefficient de diffusion de γ dans un milieu infini rempli de la phase f . Par construction, cette écriture n'intègre d'aucune façon le fait que le phénomène se déroule dans la phase fluide d'un poreux.

Soient à présent $\mathbf{V}$ et $\mathbf{G}$ l'ordre de grandeur de la vitesse $\underline{V}$ et du gradient de masse volumique microscopique $\underline{\text{grad}}_z \rho^\gamma$ dans le système étudié, $\mathcal{R}$ et $\mathcal{L}$ représentant respectivement comme en 1.2.1 la dimension du v.e.r. et celle du système. On pose $\varepsilon = \mathcal{R}/\mathcal{L}$ et $\mathbf{V}_o = D^\gamma/\mathcal{L}$.

On admet que le gradient macroscopique $\underline{\text{grad}}_x \overline{\rho}^{\gamma f}$ est également de l'ordre de $\mathbf{G}$ (voir à ce sujet les sections 1.4 et 1.5.1).

Avec ces notations, l'ordre de grandeur du flux advectif $\overline{\rho}^{\gamma f} \underline{V}$ dans (1.13) est $\mathbf{G} \mathbf{V} \mathcal{L}$, le flux diffusif $\underline{j}^\gamma$ étant de l'ordre de $D^\gamma \mathbf{G}$ et le terme complémentaire $(\rho^\gamma - \overline{\rho}^{\gamma f}) \underline{V}$ de l'ordre de $\mathbf{G} \mathbf{V} \mathcal{R}$. On a donc :

$$\frac{|(\rho^\gamma - \overline{\rho}^{\gamma f}) \underline{V}|}{|\overline{\rho}^{\gamma f} \underline{V}|} \approx \varepsilon ; \quad \frac{|(\rho^\gamma - \overline{\rho}^{\gamma f}) \underline{V}|}{|\underline{j}^\gamma|} \approx \varepsilon \frac{\mathbf{V}}{\mathbf{V}_o} ; \quad \frac{|\overline{\rho}^{\gamma f} \underline{V}|}{|\underline{j}^\gamma|} \approx \frac{\mathbf{V}}{\mathbf{V}_o} \quad (1.17)$$

D'après (1.17), si $\mathbf{V} \approx \mathbf{V}_o$ le terme complémentaire est négligeable vis-à-vis des flux advectif et diffusif. La condition $\mathbf{V} \leq \mathbf{V}_o$ correspond à un régime d'advection "modérée".

En revanche, si $\mathbf{V}/\mathbf{V}_o = O(1/\varepsilon^i)_{i \geq 1}$, ce terme complémentaire devient au moins du même ordre que les deux autres flux. Il doit par conséquent être pris en compte dans l'écriture de la loi de conservation de la masse de l'espèce γ à l'échelle microscopique. On écartera ces situations dans la suite de notre propos.

Par ailleurs, soit t_c le temps caractéristique des variations de ρ^γ . On pourra négliger

³l'annexe 4.1 présente une interprétation mécanique de la loi de diffusion de Fick

$\partial\rho^\gamma/\partial t$ dans (1.13) au même ordre d'approximation que précédemment si :

$$\frac{\partial\rho^\gamma}{\partial t} / \left| \frac{\partial\underline{j}^\gamma}{\partial x_i} \right| \approx O(\varepsilon) \quad (1.18)$$

Les dérivées spatiales de $\underline{j}^\gamma$ étant de l'ordre de $D^\gamma \mathbf{G}/\mathcal{R}$ et la dérivée temporelle de ρ^γ de l'ordre de $\mathcal{L}\mathbf{G}/t_c$, on voit que (1.18) a lieu si $t_c > \mathcal{L}^2/D^\gamma$.

En conclusion, la conservation de la masse d'une espèce γ dans une phase f soumise à un régime transitoire suffisamment lent ($t_c \geq \mathcal{L}^2/D^\gamma$) et une advection modérée ($\mathbf{V} \leq D^\gamma/\mathcal{L}$) s'exprime donc à l'échelle microscopique par l'équation :

$$(\mathcal{P}^f) \quad \text{div}_z (\underline{j}^\gamma + \overline{\rho}^{\gamma f} \underline{V}) = 0 \quad (1.19)$$

On limitera la suite de cette étude au cas où la phase f est incompressible, ce qui ajoute la condition cinématique $\text{div}_z \underline{V} = 0$. (1.19) se réduit alors à :

$$(\mathcal{P}^f) \quad \text{div}_z \underline{j}^\gamma = 0 \quad (1.20)$$

On suppose enfin que le flux de masse à travers l'interface fluid-solide $\partial\mathcal{P}^f$ est nul pour toutes les espèces de la phase f :

$$(\forall \gamma') \quad \rho^{\gamma'} (\underline{V}^{\gamma'} - \underline{u}) \cdot \underline{n} = 0 \quad (1.21)$$

ce qui se traduit par l'égalité de la vitesse normale de la phase et de la célérité de l'interface $\partial\mathcal{P}^f$:

$$(\partial\mathcal{P}^f) \quad \underline{u} \cdot \underline{n} = \underline{V} \cdot \underline{n} \quad (1.22)$$

En particulier, pour l'espèce γ , on déduit de (1.21) et (1.22) la nullité du flux diffusif normal à $\partial\mathcal{P}^f$:

$$(\partial\mathcal{P}^f) \quad \underline{j}^\gamma \cdot \underline{n} = 0 \quad (1.23)$$

1.3.2 structure de la modélisation macroscopique

D'après les considérations précédentes, l'hypothèse d'advection modérée permet de négliger le terme dispersif $\langle \tilde{\rho}^\gamma \tilde{\underline{V}} \rangle_f$ de (1.15). En outre, compte tenu de (1.21), le membre de

droite de cette équation s'annule. La formulation macroscopique du principe de conservation de la masse prend maintenant la forme suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi^f \overline{\rho}^{\gamma f}) + \text{div}_x(\varphi^f \overline{\rho}^{\gamma f} \underline{V}^f + \langle \underline{j}^{\gamma} \rangle_f) = 0 \quad (1.24)$$

Considérant la quantité $\underline{V}^f$ comme une donnée caractérisant l'advection, la résolution du problème de transport de l'espèce γ à l'échelle macroscopique passe par une modélisation à cette échelle du flux diffusif macroscopique apparent $\langle \underline{j}^{\gamma} \rangle_f$.

Le flux diffusif $\underline{j}^{\gamma}$ et la masse volumique ρ^{γ} sont soumis dans $\mathcal{P}^f$ à l'équation de champ (1.20), la condition aux limites (1.23) et la loi de comportement (1.16).

S'inspirant des méthodes utilisées classiquement en Mécanique des matériaux hétérogènes, on représente l'existence d'un gradient macroscopique $\underline{H}(\underline{x}) = \underline{\text{grad}}_x \overline{\rho}^{\gamma f}$ sur le v.e.r. $U(\underline{x})$ par des conditions aux limites "de type Hashin" écrites sur la partie de la frontière $\partial U(\underline{x})$ du v.e.r. contenue dans la phase f :

$$(\partial U(\underline{x}) \cap \mathcal{P}^f) \quad \rho^{\gamma}(\underline{z}) - \rho^{\gamma}(\underline{x}) = \underline{H}(\underline{x}) \cdot \underline{z} \quad (1.25)$$

L'ensemble des équations (1.16)-(1.20)-(1.23)-(1.25) constitue un problème bien posé (à une constante près sur le champ ρ^{γ}). Bien que l'advection et la variable temps n'y apparaissent pas, il convient de rappeler que les présents développements sont applicables en présence d'advection et en régime transitoire, dans les limites fixées par les inégalités $\mathbf{V} < D^{\gamma}/\mathcal{L}$ et $t_c > \mathcal{L}^2/D^{\gamma}$.

En vertu de la linéarité du problème (1.16)-(1.20)-(1.23)-(1.25), dans lequel le gradient macroscopique $\underline{H}$ apparait comme le paramètre de chargement, le gradient local $\underline{\text{grad}}_z \rho^{\gamma}$ s'exprime linéairement en fonction de $\underline{H}$ à l'aide d'un tenseur dit de localisation noté $\underline{\underline{A}}(\underline{z})$ tel que :

$$(\mathcal{P}^f) \quad \underline{\text{grad}}_z \rho^{\gamma}(\underline{z}) = \underline{\underline{A}}(\underline{z}) \cdot \underline{H} \quad (1.26)$$

Confirmant la modélisation classique du phénomène de diffusion à l'échelle macroscopique, on déduit de (1.26), compte tenu de (1.16), l'existence d'une relation linéaire entre le flux diffusif macroscopique $\langle \underline{j}^{\gamma} \rangle_f$ et $\underline{H}$:

$$\langle \underline{j}^{\gamma} \rangle_f = -\underline{\underline{D}}^{\text{hom}} \cdot \underline{H} \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{D}}^{\text{hom}} = \varphi^f D^{\gamma} \overline{\underline{\underline{A}}}^f \quad (1.27)$$

qui introduit le coefficient de diffusion homogénéisé $\underline{\underline{D}}^{hom}$, de nature tensorielle. On définit classiquement ([14], [112], [113]) le tenseur de tortuosité par la relation :

$$\underline{\underline{T}} = \frac{1}{\varphi^f D^\gamma} \underline{\underline{D}}^{hom} \quad (1.28)$$

L'apport du processus de changement d'échelle proposé ici réside dans le fait qu'il permet d'interpréter le tenseur $\underline{\underline{T}}$ de (1.28) comme la moyenne intrinsèque du tenseur de localisation :

$$\underline{\underline{T}} = \overline{\underline{\underline{A}}}^f \quad (1.29)$$

Sous cette forme, la tortuosité $\underline{\underline{T}}$ ne dépend manifestement à travers $\underline{\underline{A}}$ que de la géométrie de l'espace poreux. L'intérêt de (1.29) est d'ouvrir la voie à la détermination d'estimations des tenseurs de diffusion et de tortuosité en fonction des paramètres caractérisant la morphologie de $\mathcal{P}^f$ à l'échelle microscopique. C'est l'objet de la section 1.4.

1.4 Estimations du coefficient de diffusion

Il est fructueux pour les développements qui vont suivre de remplacer le problème “réel” (1.16)-(1.20)-(1.23)-(1.25) posé sur $\mathcal{P}^f$ par un *problème fictif posé sur la totalité du v.e.r.* $U(\underline{x})$. L'idée consiste en fait à considérer le v.e.r. comme une structure hétérogène du point de vue de ses propriétés diffusives en attribuant un coefficient de diffusion D^s au complémentaire $\mathcal{P}^s$ de $\mathcal{P}^f$.

A cet effet, on introduit un prolongement continu et différentiable de la fonction $\rho^\gamma(\underline{z})$ dans $\mathcal{P}^s$ et un prolongement continu par morceaux de $\underline{j}^\gamma$ dans $\mathcal{P}^s$. Ce dernier est soumis à la condition de continuité du flux diffusif normal $\underline{j}^\gamma \cdot \underline{n}$ à la traversée d'une éventuelle surface de discontinuité.

La loi de conservation (1.20), les conditions aux limites (1.25) et la loi de Fick (1.16) peuvent alors être *étendues à tout le v.e.r.* :

$$(U(\underline{x})) \operatorname{div}_z \underline{j}_F^\gamma = 0 \quad (1.30)$$

$$(\partial U(\underline{x})) \rho_F^\gamma(\underline{z}) - \rho_F^\gamma(\underline{x}) = \underline{H}(\underline{x}) \cdot \underline{z} \quad (1.31)$$

$$(U(\underline{x})) \underline{j}_F^\gamma(\underline{z}) = -D(\underline{z}) \underline{\operatorname{grad}}_z \rho_F^\gamma \quad (1.32)$$

avec $D(\underline{z}) = D^\gamma$ dans $\mathcal{P}^f$ et $D(\underline{z}) = D^s$ dans $\mathcal{P}^s$.

L'indice F dans (1.30)-(1.31)-(1.32) fait référence au problème fictif. Le passage à la limite $D^s \rightarrow 0$ dans (1.30)-(1.31)-(1.32) permet de retrouver les équations du problème réel (1.16)-(1.20)-(1.23)-(1.25).

Dans le cadre du problème fictif prolongé à $U(\underline{x})$ tout entier, la relation (1.23) ne joue plus le rôle de condition aux limites. Compte tenu de $D^s \rightarrow 0$, (1.23) est maintenant une conséquence de la condition de régularité imposée à $\underline{j}^\gamma$ prescrivant en particulier la continuité de la composante normale de ce vecteur à la traversée de l'interface I^{fs} . En ce sens, le problème fictif (1.30)-(1.31)-(1.32) constitue bien une reformulation du problème réel équivalente à ce dernier. Son intérêt réside dans le fait qu'il est mathématiquement de même nature que les problèmes d'élasticité ou de conductivité thermique dans les matériaux hétérogènes qui ont été largement étudiés dans la littérature et dont il est aisé d'adapter les méthodes (sections 1.4.1 et 1.4.2).

Le gradient local de la solution ρ_F^γ du problème fictif étant clairement une fonction linéaire de $\underline{H}$, on généralise (1.26) en introduisant un champ de tenseurs de localisation $\underline{\underline{A}}_F(\underline{z})$ défini sur la totalité de $U(\underline{x})$:

$$(U(\underline{x})) \quad \underline{\underline{grad}}_z \rho_F^\gamma(\underline{z}) = \underline{\underline{A}}_F(\underline{z}) \cdot \underline{H} \quad (1.33)$$

En vertu de (1.31), il est facile de vérifier que le gradient moyen $\overline{\underline{\underline{grad}}_z \rho_F^\gamma}$ sur $U(\underline{x})$ n'est autre que $\underline{H}$. Il en résulte que $\overline{\underline{\underline{A}}_F} = \underline{\underline{\delta}}$, ce qui s'écrit encore :

$$\varphi^f \overline{\underline{\underline{A}}_F}^f + (1 - \varphi^f) \overline{\underline{\underline{A}}_F}^s = \underline{\underline{\delta}} \quad (1.34)$$

Le coefficient de diffusion homogénéisé $\underline{\underline{D}}_F^{hom}$ du problème fictif est défini par la relation :

$$\overline{\underline{\underline{j}}_F^\gamma} = -\underline{\underline{D}}_F^{hom} \cdot \underline{H} \quad (1.35)$$

En prenant la moyenne de (1.33) et en utilisant (1.34), on voit que :

$$\underline{\underline{D}}_F^{hom} = \varphi^f D^\gamma \overline{\underline{\underline{A}}_F}^f + (1 - \varphi^f) D^s \overline{\underline{\underline{A}}_F}^s = D^\gamma \underline{\underline{\delta}} + (1 - \varphi^f)(D^s - D^\gamma) \overline{\underline{\underline{A}}_F}^s \quad (1.36)$$

On revient au problème réel à l'aide du passage à la limite $D^s \rightarrow 0$ dans (1.36), en observant que $\underline{\underline{D}}_F^{hom}$ tend vers le coefficient de diffusion homogénéisé du problème réel $\underline{\underline{D}}^{hom}$ introduit en (1.27) :

$$\underline{\underline{D}}^{hom} = \lim_{D^s \rightarrow 0} \underline{\underline{D}}_F^{hom} = D^\gamma \underline{\underline{\delta}} - (1 - \varphi^f) D^\gamma \lim_{D^s \rightarrow 0} \overline{\underline{\underline{A}}_F}^s \quad (1.37)$$

Conformément à la définition donnée en (1.28), on déduit de (1.37) que :

$$\underline{T} = \frac{1}{\varphi^f} \left(\underline{\delta} - (1 - \varphi^f) \lim_{D^s \rightarrow 0} \overline{\underline{A}_F}^s \right) \quad (1.38)$$

Les estimations du coefficient de diffusion homogénéisé et de la tortuosité sont ainsi ramenées à celle de la quantité $\overline{\underline{A}_F}^s$. En d'autres termes, il s'agit (d'après (1.33)) d'estimer le gradient moyen dans le domaine $\mathcal{P}^s$. Afin d'assurer la connexité de la phase fluide, on considère la phase solide comme une phase inclusionnaire vis à vis de la phase fluide. Dans cet esprit, nous présentons successivement l'estimation dite de Mori-Tanaka et le résultat du schéma différentiel qui sont dédiés à ce type de morphologie.

1.4.1 le schéma de Mori-Tanaka

On considère d'abord la situation extrême où la fraction volumique de $\mathcal{P}^s$ est suffisamment faible pour que l'on puisse négliger les interactions des inclusions constituant $\mathcal{P}^s$. Il est alors possible d'estimer $\underline{\text{grad}}_z \rho_F^\gamma$ en considérant que l'inclusion élémentaire de solide, de coefficient de diffusion D^s , est placée dans un milieu infini de coefficient de diffusion D^γ , avec la condition $\rho_F^\gamma \rightarrow \underline{H} \cdot \underline{z}$ à l'infini.

La solution de ce problème dit de l'inhomogénéité a été donnée par Eshelby [47] dans le cas où la particule est de forme ellipsoïdale : on montre alors que $\underline{\text{grad}}_z \rho_F^\gamma$ est uniforme dans l'ellipsoïde $\mathcal{E}$ et donné par :

$$(\underline{\text{grad}}_z \rho_F^\gamma)^\mathcal{E} = \left(\underline{\delta} + (D^s - D^\gamma) \underline{R}_\gamma^\mathcal{E} \right)^{-1} \cdot \underline{H} \quad (1.39)$$

Le tenseur $\underline{R}_\gamma^\mathcal{E}$ intervenant dans (1.39) dépend de D^γ ainsi que de la forme et l'orientation de l'ellipsoïde $\mathcal{E}$. Plus précisément, on introduit le potentiel $\phi(\underline{z})$ de $\mathcal{E}$ défini par :

$$\phi(\underline{z}) = \int_{\mathcal{E}} \frac{dV_Z}{|\underline{z} - \underline{Z}|} \quad (1.40)$$

On montre classiquement que la restriction à $\mathcal{E}$ de $\phi(\underline{z})$ est un polynôme du second degré en z_i . Dans un repère orthonormé dont les axes coïncident avec ceux de l'ellipsoïde, $\phi(\underline{z})$ est de la forme :

$$\phi(\underline{z}) = \frac{1}{2} (I_1(a_1 - z_1)^2 + I_2(a_2 - z_2)^2 + I_3(a_3 - z_3)^2) \quad (1.41)$$

où les a_i sont les longueurs des demis-axes de l'ellipsoïde et les I_i sont des coefficients constants fonctions des a_i . On montre (cf. 4.2.1) que les composantes du tenseur $\underline{\underline{R}}_\gamma^\mathcal{E}$ sont données par :

$$R_{\gamma ij}^\mathcal{E} = -\frac{1}{4\pi D^\gamma} \phi_{,ij} \quad (1.42)$$

ce qui implique que ces quantités sont des constantes dans $\mathcal{E}$. L'uniformité de $\underline{\underline{grad}}_z \rho_F^\gamma$ dans l'ellipsoïde en résulte. On verra par la suite qu'il est commode d'introduire le tenseur d'Eshelby $\underline{\underline{S}}_\mathcal{E}^{Esh}$, qui est indépendant du coefficient de diffusion D^γ :

$$S_{\mathcal{E}ij}^{Esh} = R_{\gamma ij}^\mathcal{E} D^\gamma = -\frac{1}{4\pi} \phi_{,ij} \quad (1.43)$$

Le coefficient de diffusion homogénéisé du problème fictif, dans le cas dilué, est déduit de (1.36) et de (1.39)⁴ :

$$\underline{\underline{D}}_F^D = D^\gamma \underline{\underline{\delta}} + (1 - \varphi^f)(D^s - D^\gamma) \left(\underline{\underline{\delta}} + (D^s - D^\gamma) \underline{\underline{R}}_\gamma^\mathcal{E} \right)^{-1} \quad (1.44)$$

Le passage à la limite $D^s \rightarrow 0$ donne donc d'après (1.37), (1.38) et (1.43) :

$$\begin{cases} \underline{\underline{D}}^D = D^\gamma \left(\underline{\underline{\delta}} - (1 - \varphi^f) \left(\underline{\underline{\delta}} - \underline{\underline{S}}_\mathcal{E}^{Esh} \right)^{-1} \right) \\ \underline{\underline{T}}^D = \frac{1}{\varphi^f} \left(\underline{\underline{\delta}} - (1 - \varphi^f) \left(\underline{\underline{\delta}} - \underline{\underline{S}}_\mathcal{E}^{Esh} \right)^{-1} \right) \end{cases} \quad (1.45)$$

Rappelons que sa validité repose sur l'hypothèse que la fraction volumique de $\mathcal{P}^s$ est infinitésimale. Elle porte à ce titre le nom d'estimation diluée. Pour dépasser cette restriction, il convient de gérer l'interaction entre les particules de $\mathcal{P}^s$.

A cet effet, le schéma classique [125] introduit une adaptation de la démarche précédente. Il propose d'estimer $\underline{\underline{grad}}_z \rho_F^{\gamma s}$ par la valeur du gradient (uniforme) qui s'établit dans une inclusion ellipsoïdale de forme et d'orientation bien choisies placée comme précédemment dans un milieu infini de coefficient de diffusion D^γ , la condition à l'infini étant à présent $\rho_F^\gamma \rightarrow \underline{\underline{H}}_f \cdot \underline{\underline{z}}$, où $\underline{\underline{H}}_f$ est le gradient moyen dans la phase f . On a donc :

$$\underline{\underline{grad}}_z \rho_F^{\gamma s} = \left(\underline{\underline{\delta}} + (D^s - D^\gamma) \underline{\underline{R}}_\gamma^\mathcal{E} \right)^{-1} \cdot \underline{\underline{H}}_f \quad (1.46)$$

⁴exposant "D" pour dilué

Puis la relation (1.34) permet d'éliminer $\underline{H}_f$ au profit de $\underline{H}$:

$$\underline{H}_f = \left(\varphi^f \underline{\underline{\delta}} + (1 - \varphi^f) \left(\underline{\underline{\delta}} + (D^s - D^\gamma) \underline{\underline{R}}_\gamma^\mathcal{E} \right)^{-1} \right)^{-1} \cdot \underline{H} \quad (1.47)$$

En reportant ce résultat dans (1.46), on trouve donc, compte tenu de (1.33) que :

$$\overline{\underline{A}}_F^s = \left(\underline{\underline{\delta}} + (D^s - D^\gamma) \underline{\underline{R}}_\gamma^\mathcal{E} \right)^{-1} \cdot \left(\varphi^f \underline{\underline{\delta}} + (1 - \varphi^f) \left(\underline{\underline{\delta}} + (D^s - D^\gamma) \underline{\underline{R}}_\gamma^\mathcal{E} \right)^{-1} \right)^{-1} \quad (1.48)$$

Compte tenu de (1.38), l'estimation de $\underline{\underline{T}}$ correspondant à (1.48) est⁵ :

$$\underline{\underline{T}}^{MT} = \frac{1}{\varphi^f} \left(\underline{\underline{\delta}} - (1 - \varphi^f) \left(\underline{\underline{\delta}} - \underline{\underline{S}}_\mathcal{E}^{Esh} \right)^{-1} \cdot \left(\varphi^f \underline{\underline{\delta}} + (1 - \varphi^f) \left(\underline{\underline{\delta}} - \underline{\underline{S}}_\mathcal{E}^{Esh} \right)^{-1} \right)^{-1} \right) \quad (1.49)$$

Examinons le cas particulier où la phase s est représentée par des inclusions de forme sphérique. La restriction à la sphère de rayon a du potentiel $\phi(\underline{z})$ de (1.40) ne dépend que de la distance r du point $\underline{z}$ au centre de la sphère et (1.41) se simplifie :

$$\phi(\underline{z}) = \frac{2}{3} \pi (3a^2 - r^2) \quad (1.50)$$

Il résulte de (1.42), (1.43) et (1.50) que $\underline{\underline{R}}_\gamma^\mathcal{E}$ et $\underline{\underline{S}}_\mathcal{E}^{Esh}$ sont des tenseurs sphériques :

$$\underline{\underline{R}}_\gamma^{sph} = \frac{1}{3D^\gamma} \underline{\underline{\delta}} \quad ; \quad \underline{\underline{S}}_{sph}^{Esh} = \frac{1}{3} \underline{\underline{\delta}} \quad (1.51)$$

En utilisant (1.51) dans (1.49), on obtient les expressions suivantes du coefficient de diffusion homogénéisé et de la tortuosité, conformes aux résultats classiques de Maxwell [89] qui le premier a obtenu des expressions similaires dans la détermination de la conductivité électrique de matériaux hétérogènes; elles sont, en outre, analogues à celles obtenues par Hashin [67] sur l'exemple de l'équation de la chaleur :

$$\underline{\underline{D}}_{sph}^{MT} = \frac{2\varphi^f}{3 - \varphi^f} D^\gamma \underline{\underline{\delta}} \quad ; \quad \underline{\underline{T}}_{sph}^{MT} = \frac{2}{3 - \varphi^f} \underline{\underline{\delta}} \quad (1.52)$$

La variation de $\underline{\underline{D}}_{sph}^{MT}$ en fonction de la porosité est représentée à la figure 1.3. Les estimations données ci-dessus ont évidemment l'attrait de la simplicité. De plus, *pour toute morphologie satisfaisant l'hypothèse de répartition isotrope des phases f et s* , $\underline{\underline{T}}_{sph}^{MT}$ possède

⁵'MT' pour Mori-Tanaka

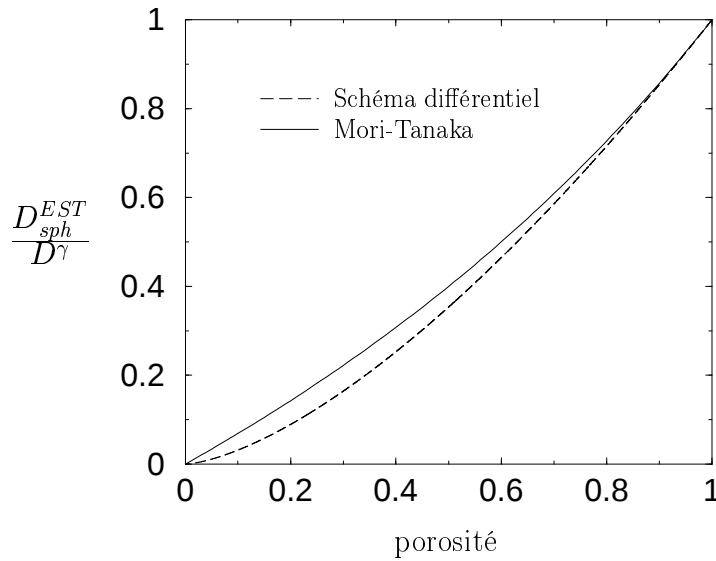


FIG. 1.3: estimations du coefficient de diffusion : le cas sphérique.

le statut de majorant de la valeur exacte de la tortuosité, au sens mathématique suivant :

$$(\forall \underline{x}, |\underline{x}| = 1) \quad \underline{x} \cdot \underline{\underline{T}} \cdot \underline{x} \leq T_{sph}^{MT} = \frac{2}{3 - \varphi^f} \quad (1.53)$$

(1.53) est la transposition d'un résultat classique dû à Hashin et Shtrikman [69] au problème de la détermination du tenseur $\underline{\underline{D}}^{hom}$ de (1.27).

On vérifie en utilisant (1.51) dans (1.45) que les estimations diluées $\underline{\underline{D}}_{sph}^D$ et $\underline{\underline{T}}_{sph}^D$ ne sont autres que les développements limités au voisinage de $\varphi^f = 1$ de $\underline{\underline{D}}_{sph}^{MT}$ et $\underline{\underline{T}}_{sph}^{MT}$:

$$\underline{\underline{D}}_{sph}^D = \frac{1}{2}(3\varphi^f - 1)D^\gamma \underline{\underline{\delta}} ; \quad \underline{\underline{T}}_{sph}^D = \frac{1 + \varphi^f}{2} \underline{\underline{\delta}} \quad (1.54)$$

Les estimations de Mori-Tanaka dans le cas non sphérique sont évidemment plus complexes, bien que demeurant analytiques. Elles sont données en 4.2.3. Notons qu'un résultat dû à Willis [122] généralise le statut de borne (majorant) de l'estimation de Mori-Tanaka vis-à-vis de la valeur exacte du tenseur $\underline{\underline{D}}^{hom}$ pour le cas d'inclusions ellipsoïdales de mêmes forme et orientation, dans l'hypothèse d'une répartition ellipsoïdale des phases.

Il résulte de (1.41), (1.42) et (1.49) que les directions principales de $\underline{\underline{D}}^{MT}$ et $\underline{\underline{T}}^{MT}$ coïncident avec les axes de l'ellipsoïde $\mathcal{E}$. L'orientation et la forme de ce dernier contrôlent l'anisotropie de ces tenseurs.

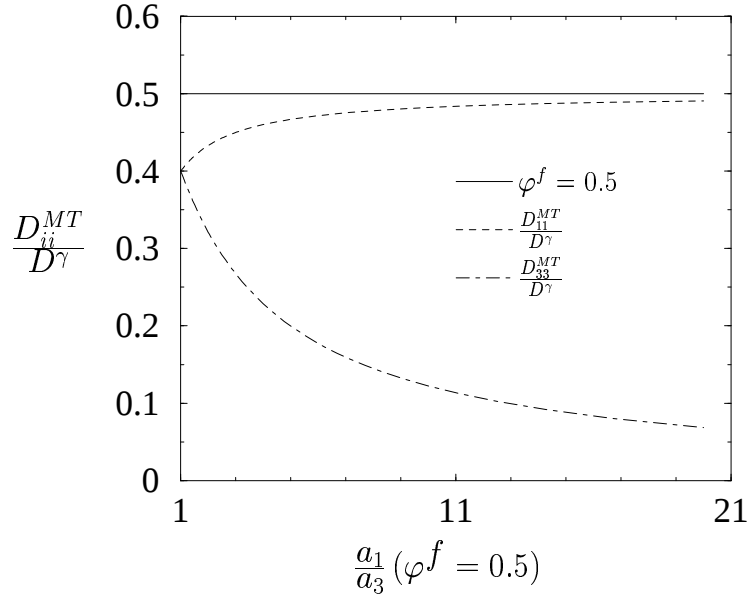


FIG. 1.4: influence de l'anisotropie.(Mori-Tanaka)

A titre d'exemple, on s'intéresse au cas où l'ellipsoïde $\mathcal{E}$ possède la symétrie de révolution autour de l'axe $\underline{e}_3$ d'un repère orthonormé $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$ et l'on examine l'effet sur l'anisotropie du tenseur de diffusion d'un aplatissement de l'ellipsoïde.

Désignant par a_i la demi-longueur de l'axe de $\mathcal{E}$ de vecteur $\underline{e}_i$ (avec $a_1 = a_2$), les figures 1.4 et 1.7 représentent les estimations des coefficients D_{11}^{MT} et D_{33}^{MT} du tenseur de diffusion respectivement fonctions des rapports d'axe pour $\varphi^f = 0.5$ et fonctions de la porosité pour $a_1/a_3 = 3$.

Comme prévu, l'anisotropie du phénomène de diffusion mesurée par le rapport D_{11}^{MT}/D_{33}^{MT} croît avec le rapport a_1/a_3 .

Pour un aplatissement croissant, on note également que le coefficient D_{11}^{MT} qui représente le coefficient de diffusion pour un gradient macroscopique orienté parallèlement au plan $\underline{e}_1, \underline{e}_2$ (grands axes de l'ellipsoïde) tend vers $\varphi^f D^\gamma$ ("loi des mélanges").

Pour un gradient macroscopique parallèle au plan $(\underline{e}_1, \underline{e}_2)$, cela signifie que l'aplatissement des particules solides autorise un mouvement quasi-rectiligne des molécules parallèlement à la direction du gradient macroscopique et supprime la tortuosité de leurs trajectoires. Au contraire, pour un gradient macroscopique colinéaire à $\underline{e}_3$, l'aplatissement fait croître la tortuosité.

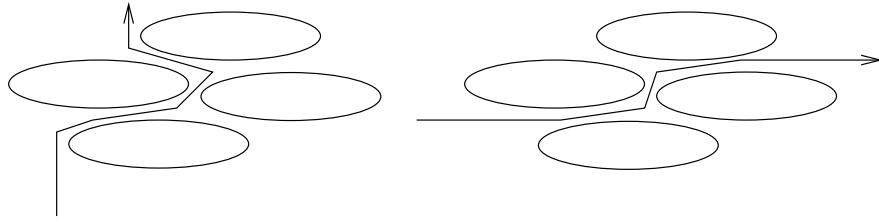


FIG. 1.5: influence de l'aplatissement sur l'anisotropie du tenseur de tortuosité

Ainsi, à porosité fixée, D_{11}^{MT} (resp. D_{33}^{MT}) croît (resp. décroît) avec le rapport a_1/a_3 . Ces considérations sont illustrées par le schéma de principe de la figure 1.5. Elles s'appuient sur l'interprétation géométrique du coefficient de tortuosité proposée à la section 1.5.3.

A cet égard, on prendra garde au fait que le coefficient de tortuosité est d'autant plus grand (proche de 1) que le trajet est moins "tortueux".

1.4.2 le schéma différentiel

A coté du schéma de Mori-Tanaka, le schéma différentiel constitue une autre façon plus progressive mais aussi plus complexe d'introduire le caractère continu de la phase siège de la diffusion dans la démarche d'estimation de la tortuosité [126].

Comme le schéma de Mori-Tanaka, il se présente sous la forme d'une adaptation de l'estimation diluée. L'idée consiste à introduire la phase s (inclusionnaire) dans la phase f (matrice) par incréments infinitésimaux successifs à partir d'un milieu homogène de coefficient de diffusion D^γ (fluide seul, $\varphi^f = 1$), jusqu'à ce que la valeur désirée de la fraction volumique de $\mathcal{P}^s$ soit atteinte. Après chaque incrément, on détermine le milieu homogène équivalent et ce dernier est utilisé pour l'itération suivante.

La première itération est celle conduisant à l'estimation diluée (1.45).

Soit $\underline{\underline{D}}_F^k$ le coefficient de diffusion homogénéisé réalisé à la k -ième itération. On a donc $\underline{\underline{D}}_F^0 = D^\gamma \underline{\underline{\delta}}$.

La $k+1$ -ième itération consiste à enlever une fraction infinitésimale $d\varepsilon \ll 1$ du k -ième milieu homogène et à la remplacer par le même volume de la phase s (cf. Fig. 1.6). Il en résulte une variation $d\varphi^s = -d\varphi^f$ égale à $\varphi_k^f d\varepsilon$. Plus précisément, on a :

$$\begin{cases} d\varphi^s &= d\varepsilon - \varphi_k^s d\varepsilon \\ 0 &= d\varphi^s + d\varphi^f \quad (\varphi_k^s + \varphi_k^f = 1) \end{cases} \Rightarrow d\varepsilon = -\frac{d\varphi^f}{\varphi_k^f} \quad (1.55)$$

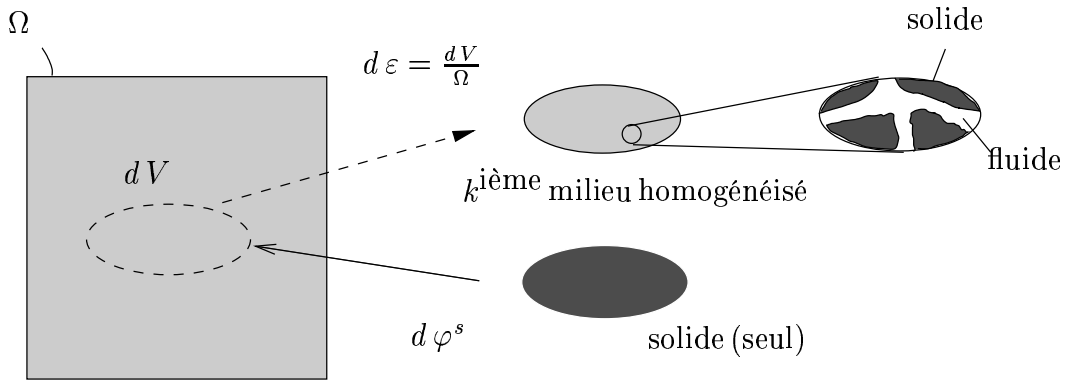


FIG. 1.6: représentation du schéma différentiel

Comme $d\varepsilon$ est infinitésimal, le $k+1$ -ième milieu homogénéisé peut être déterminé par l'estimation diluée introduite à la section 1.4.1 dans laquelle le k -ième milieu homogénéisé va jouer le rôle de la matrice.

En remplaçant donc dans (1.44) $D^\gamma \underline{\underline{\delta}}$ par $\underline{\underline{D}}_F^k$ et $(1 - \varphi^f)$ par $d\varepsilon$, on obtient une relation de récurrence conduisant à l'estimation du tenseur de diffusion homogénéisé $\underline{\underline{D}}_F^{hom}$ de (1.35) :

$$\underline{\underline{D}}_F^{k+1} = \underline{\underline{D}}_F^k + d\varepsilon (D^s \underline{\underline{\delta}} - \underline{\underline{D}}_F^k) \cdot \left(\underline{\underline{\delta}} + (D^s \underline{\underline{\delta}} - \underline{\underline{D}}_F^k) \cdot \underline{\underline{R}}_F^{\mathcal{E}k} \right)^{-1} \quad (1.56)$$

Le tenseur $\underline{\underline{R}}_F^{\mathcal{E}k}$ intervenant dans (1.56) dépend comme précédemment de la forme et de l'orientation de l'ellipsoïde $\mathcal{E}$ mais aussi du coefficient de diffusion $\underline{\underline{D}}_F^k$ définissant le k -ième milieu homogénéisé.

La relation (1.42), valable pour le premier incrément, donne la valeur de $\underline{\underline{R}}_F^{\mathcal{E}0}$. Le calcul de $\underline{\underline{R}}_F^{\mathcal{E}k}$ pour $k \geq 1$ est détaillé à l'annexe 4.2. Compte tenu de (1.56), les directions principales des tenseurs $\underline{\underline{D}}_F^k$ coïncident avec les axes de l'ellipsoïde.

Un passage à la limite $D^s \rightarrow 0$ dans (1.56) fournit la relation de récurrence conduisant à l'estimation du tenseur de diffusion homogénéisé $\underline{\underline{D}}^{hom}$ de (1.27) :

$$\underline{\underline{D}}^{k+1} = \underline{\underline{D}}^k - d\varepsilon \underline{\underline{D}}^k \cdot \left(\underline{\underline{\delta}} - \underline{\underline{S}}_{\mathcal{E}}^{Eshk} \right)^{-1} \quad (1.57)$$

La forme différentielle de (1.57) s'écrit :

$$d\underline{\underline{D}} = \frac{d\varphi^f}{\varphi^f} \underline{\underline{D}} \cdot \left(\underline{\underline{\delta}} - \underline{\underline{S}}_{\mathcal{E}}^{Esh} \right)^{-1} \quad (1.58)$$

Le tenseur $\underline{\underline{D}}^{hom}$ est obtenu par intégration de (1.58) par rapport à φ^f entre 1 et la valeur

désirée.

Dans le cas particulier où la phase s est représentée par des inclusions de forme sphérique, le schéma différentiel peut être mis en œuvre analytiquement. En effet, le milieu homogénéisé restant isotrope après chaque incrément, le tenseur $\underline{\underline{D}}^k$ est de la forme $D^k \underline{\underline{\delta}}$.

Le tenseur $\underline{\underline{R}}^{\mathcal{E}^k}$ obtenu en remplaçant D^γ par D^k dans (1.42) est donc égal à $1/(3D^k)\underline{\underline{\delta}}$ ($\underline{\underline{S}}_{sph}^{Esh} = \frac{1}{3}\underline{\underline{\delta}}$), de sorte que (1.58) devient :

$$\frac{dD}{D} = \frac{3}{2} \frac{d\varphi^f}{\varphi^f} \quad (1.59)$$

dont l'intégration donne :

$$\int_{D^\gamma}^{D^{SD}} \frac{dD}{D} = \frac{3}{2} \int_1^{\varphi^f} \frac{d\varphi}{\varphi} \quad (1.60)$$

Finalement, le schéma différentiel propose les estimations suivantes du tenseur de diffusion homogénéisé et de tortuosité :

$$\underline{\underline{D}}^{SD} = D^\gamma (\varphi^f)^{\frac{3}{2}} \underline{\underline{\delta}} ; \quad \underline{\underline{T}}^{SD} = (\varphi^f)^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{\delta}} \quad (1.61)$$

La variation de $\underline{\underline{D}}_{sph}^{SD}$ en fonction de la porosité est représentée à la figure 1.3. Elle montre que le coefficient de diffusion prévu par le schéma différentiel est légèrement inférieur à l'estimation de Mori-Tanaka. Cette différence est d'autant plus marquée que l'on s'intéresse aux faibles porosités : pour la tortuosité, les estimations (1.52) et (1.61) sont respectivement égales à 0.7 et 0.2 pour une porosité de l'ordre de 0.05.

Dans le cas de l'inclusion non sphérique, l'intégration de (1.58) doit être effectuée numériquement. Les résultats sont présentés à la figure 1.7. En comparaison avec l'estimation de Mori-Tanaka, on note que le schéma différentiel accentue le rapport d'anisotropie D_{11}/D_{33} .

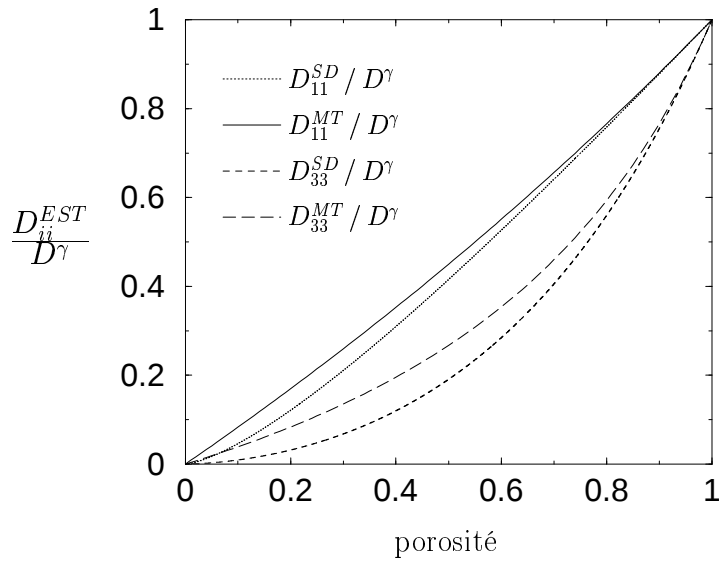


FIG. 1.7: anisotropie du tenseur de diffusion : $a_1/a_3 = 3$.

1.5 La diffusion macroscopique par l'homogénéisation périodique

De façon alternative par rapport à l'approche développée dans les sections 1.3 et 1.4, une modélisation macroscopique du phénomène de diffusion peut être construite à partir d'un changement d'échelle sur la base d'une hypothèse de morphologie périodique du réseau poreux. Après en avoir rappelé le principe, on met en œuvre numériquement cette approche sur diverses géométries de la cellule de base. Puis, les résultats obtenus sont confrontés à ceux de la section 1.4.

1.5.1 principe de l'homogénéisation périodique

On se limite ici à donner d'une manière simplifiée l'idée de la méthode périodique en l'appliquant au problème défini par (1.16), (1.20) et (1.23). Les conclusions de cette approche sont conformes aux résultats de Auriault et Lewandowska [6]. On trouvera de plus chez ces auteurs une démarche systématique permettant notamment de statuer (dans le cadre périodique) lorsque l'advection ou les variations temporelles ne sont pas compatibles avec les hypothèses de la section 1.3.1.

Le réseau poreux est obtenu en reproduisant de manière périodique une cellule de base $\mathcal{C}$ dont la géométrie est entièrement définie. On note $\mathcal{C}^f$ le sous-domaine de $\mathcal{C}$ occupé par

la phase fluide. Pour simplifier l'exposé, on supposera que $\mathcal{C}$ est un parallélépipède dont les arêtes, de longueur l_i , sont parallèles aux vecteurs $\underline{e}_i$ d'une base orthonormée. Il est délimité par les plans $z_i = 0$ et $z_i = l_i$. L désignant comme précédemment la dimension caractéristique du système, le rapport $\varepsilon = \sup l_i / L$ est infiniment petit.

Pour prendre en compte la morphologie périodique, on impose des propriétés de périodicité à la concentration ρ^γ et au flux diffusif $\underline{j}^\gamma$. Ainsi, on recherche la fonction ρ^γ sur une cellule élémentaire sous la forme de la somme d'un terme affine $\rho_0^\gamma + \underline{H} \cdot \underline{z}$ rendant compte des variations de ρ^γ à l'échelle macroscopique et d'une fluctuation périodique $r(\underline{z})$:

$$\rho^\gamma(\underline{z}) = \rho_0^\gamma + \underline{H} \cdot \underline{z} + r(\underline{z}) \quad (1.62)$$

la périodicité de la fonction $r(\underline{z})$ s'écrivant :

$$(\forall \underline{z} \in \mathcal{C}^f \cap (z_i = 0)) \quad r(\underline{z} + l_i \underline{e}_i) = r(\underline{z}) \quad (1.63)$$

De même, compte tenu de (1.16) et de (1.62), on décompose le flux diffusif sous la forme :

$$\underline{j}^\gamma = -D^\gamma \underline{H} + \underline{f} \quad \text{avec} \quad \underline{f} = -D^\gamma \underline{\text{grad}}_z r \quad (1.64)$$

Le champ $\underline{f}$ possède la propriété de périodicité suivante :

$$(\forall \underline{z} \in \partial \mathcal{C}^f \cap (z_i = 0)) \quad f_i(\underline{z} + l_i \underline{e}_i) = f_i(\underline{z}) \quad (1.65)$$

Désignant par $\underline{n}$ la normale à la frontière de la cellule, (1.65) exprime la périodicité de la composante normale $(\underline{f} \cdot \underline{n})\underline{n}$ du flux $\underline{f}$, issue de celle du gradient $\underline{\text{grad}}_z r$ de $r(\underline{z})$.

Comme en (1.25), (1.62) et (1.63) visent à conférer à $\underline{H}$ le sens physique de gradient macroscopique de masse volumique. Compte tenu de (1.64), (1.20) et (1.23) conduisent à un problème différentiel sur la fluctuation $r(\underline{z})$:

$$\Delta_z r = 0 \quad (\mathcal{C}^f) \quad (1.66)$$

$$\underline{\text{grad}}_z r \cdot \underline{n} = -\underline{H} \cdot \underline{n} \quad (I^f) \quad (1.67)$$

Compte tenu des conditions de périodicité (1.63) et (1.65), (1.66) et (1.67) déterminent la valeur de la fluctuation $r(\underline{z})$ à une constante près que l'on peut fixer en imposant que

la moyenne $\bar{r}^f$ de r sur $\mathcal{C}^f$ soit nulle.

Avec cette convention, il est clair que $r(\underline{z})$ dépend linéairement de $\underline{H}$. Il existe donc un champ $\underline{\chi}(\underline{z})$, fonction seulement de la morphologie de $\mathcal{C}^f$, tel que :

$$r(\underline{z}) = \underline{\chi}(\underline{z}) \cdot \underline{H} \quad (1.68)$$

On déduit alors de (1.62) et (1.68) la valeur en fonction de $\underline{\chi}$ du tenseur de localisation $\underline{A}_{per}$, homologue dans le cas périodique de celui introduit en (1.26) :

$$(\mathcal{C}^f) \quad \underline{grad}_z \rho^\gamma = \underline{A}_{per}(\underline{z}) \cdot \underline{H} \quad \text{avec} \quad \underline{A}_{per} = \underline{\delta} + {}^t \underline{grad}_z \underline{\chi} \quad (1.69)$$

Comme en (1.27), le calcul du flux diffusif macroscopique $\langle \underline{j}^\gamma \rangle_f$ intervenant dans (1.24) en fonction du gradient macroscopique $\underline{H}$ amène à introduire un coefficient de diffusion homogénéisé et un tenseur de tortuosité :

$$\langle \underline{j}^\gamma \rangle_f = -\underline{D}_{per}^{hom} \cdot \underline{H} \quad \text{avec} \quad \underline{D}_{per}^{hom} = \varphi^f D^\gamma \underline{T}_{per} \quad (1.70)$$

Comme en (1.29), le tenseur de tortuosité $\underline{T}_{per}$ propre au modèle périodique apparaît comme la moyenne intrinsèque du tenseur de localisation :

$$\underline{T}_{per} = \overline{\underline{A}_{per}}^f = \underline{\delta} + {}^t \overline{\underline{grad}_z \underline{\chi}}^f \quad (1.71)$$

On voit que la détermination du tenseur de tortuosité à partir de la connaissance de la morphologie de $\mathcal{C}^f$ passe par le calcul de la solution périodique (de moyenne nulle) du problème (1.66)-(1.67).

Dans la perspective de la résolution numérique, il convient d'aborder cette question du point de vue variationnel.

1.5.2 approche variationnelle de l'homogénéisation périodique

L'approche variationnelle consiste à caractériser la composante $\underline{f} = -D^\gamma \underline{grad}_z r$ du flux diffusif $\underline{j}^\gamma$ et la fluctuation $r(\underline{z})$ solutions du problème direct (1.63)-(1.65)-(1.66)-(1.67) par le fait qu'elles réalisent le minimum d'une fonctionnelle.

On définit d'abord l'ensemble $\mathcal{F}$ des "flux admissibles" $\underline{f}'$ définis de la manière suivante :

- $\underline{f}'$ de classe C^1 par morceaux,

- $\text{div}_z \underline{f}' = 0, [\underline{f}'] \cdot \underline{n} = 0 \quad (\Sigma),$
où Σ désigne une surface de discontinuité éventuelle du champ $\underline{f}'$,
- $\underline{f}' \cdot \underline{n} = D^\gamma \underline{H} \cdot \underline{n} \quad (I^{fs}),$
- $(\underline{f}' \cdot \underline{n}) \underline{n}$ périodique.

On introduit sur $\mathcal{F}$ la fonctionnelle suivante :

$$W^*(\underline{f}') = \frac{1}{2D^\gamma} \int_{Cf} \underline{f}'^2 dV_z \quad (1.72)$$

On démontre (voir section 4.3.1) que la solution $\underline{f}$ réalise le minimum de W^* dans $\mathcal{F}$:

$$(\forall \underline{f}' \in \mathcal{F}) \quad W^*(\underline{f}) \leq W^*(\underline{f}') \quad (1.73)$$

D'une manière duale, on définit l'ensemble $\mathcal{R}$ des concentrations r' admissibles :

$$\mathcal{R} = \{r' \in C^0; C^1/\text{morceaux, périodiques}\} \quad (1.74)$$

et l'on définit sur $\mathcal{R}$ la fonctionnelle W :

$$W(r') = \frac{D^\gamma}{2} \int_{Cf} \underline{\text{grad}}_z r'^2 dV_z + D^\gamma \int_{Ifs} r' \underline{H} \cdot \underline{n} dS_z \quad (1.75)$$

On démontre (voir section 4.3.2) que la solution r réalise dans $\mathcal{R}$ le minimum de W :

$$(\forall r' \in \mathcal{R}) \quad W(r) \leq W(r') \quad (1.76)$$

On montre encore que les minima de W et W^* réalisés par r et $\underline{f} = -D^\gamma \underline{\text{grad}}_z r$ respectivement sont opposés :

$$W(r) + W^*(\underline{f}) = 0 \quad (1.77)$$

Enfin, en intégrant par parties l'expression de $W^*(\underline{f})$, et en utilisant les propriétés de périodicité de r et $\underline{f}$, on obtient :

$$W^*(\underline{f}) = -\frac{1}{2} \int_{Cf} \underline{f} \cdot \underline{\text{grad}}_z r dV_z = -\frac{D^\gamma}{2} \int_{Ifs} r \underline{H} \cdot \underline{n} dS_z = -\frac{D^\gamma}{2} \int_{Cf} \underline{H} \cdot \underline{\text{grad}}_z r dV_z \quad (1.78)$$

Compte tenu de (1.68) et de (1.71), on déduit de (1.77) et (1.78) que :

$$\frac{2W(r)}{D^\gamma |C^f|} = -\frac{2W^*(\underline{f})}{D^\gamma |C^f|} = \underline{H} \cdot \underline{\underline{t_{grad} \chi}}^f \cdot \underline{H} = \underline{H} \cdot (\underline{\underline{T_{per}}} - \underline{\underline{\delta}}) \cdot \underline{H} \quad (1.79)$$

En combinant (1.73), (1.76) et (1.79), on voit que la conjonction des deux principes variationnels conduit à un encadrement de la tortuosité :

$$(\forall \underline{f}' \in \mathcal{F})(\forall r' \in \mathcal{R}) - \frac{2W^*(\underline{f}')}{D^\gamma |C^f|} \leq \underline{H} \cdot (\underline{\underline{T_{per}}} - \underline{\underline{\delta}}) \cdot \underline{H} \leq \frac{2W(r')}{D^\gamma |C^f|} \quad (1.80)$$

ou encore, en terme de tenseur de diffusion :

$$(\forall \underline{f}' \in \mathcal{F})(\forall r' \in \mathcal{R}) - \frac{2W^*(\underline{f}')}{|C|} \leq \underline{H} \cdot \left(\underline{\underline{D_{per}^{hom}}} - \varphi^f D^\gamma \underline{\underline{\delta}} \right) \cdot \underline{H} \leq \frac{2W(r')}{|C|} \quad (1.81)$$

Sous cette forme, tout couple $(\underline{f}', r')$ de $(\mathcal{F}, \mathcal{R})$ conduit à un encadrement de l'écart de $\underline{\underline{D_{per}^{hom}}}$ par rapport à la loi des mélanges directe (pour laquelle la tortuosité est égale à 1).

Notons comme corrolaire immédiat de (1.80) l'inégalité $\underline{\underline{T_{per}}} \leq \underline{\underline{\delta}}$, au sens où :

$$\forall \underline{H}, \quad \underline{H} \cdot (\underline{\underline{T_{per}}} - \underline{\underline{\delta}}) \cdot \underline{H} \leq 0 \quad (1.82)$$

qui résulte du choix particulier $r' = 0$.

1.5.3 interprétation géométrique du coefficient de tortuosité

Dans l'analyse physique du transport diffusif, on distingue classiquement trois effets géométriques majeurs :

1. celui du volume disponible, mesuré par la porosité du matériau considéré.
2. celui de l'écart entre le chemin idéal et le chemin réellement emprunté par l'espèce diffusante à l'intérieur de la porosité connectée. Il s'agit du caractère "tortueux" du chemin à parcourir, qui justifie la terminologie de "tortuosité".
3. celui des effets de constriction, c'est-à-dire la résistance au transport introduite par la variation de la section transversale des "tubes de diffusion".

origine classique de la tortuosité

On s'intéresse tout d'abord à l'effet du caractère tortueux du chemin à parcourir sur la valeur de la tortuosité.

Afin d'illustrer l'emploi de (1.80) et d'établir la cohérence entre l'approche micromécanique du concept de tortuosité et l'approche classique, on considère le cas particulier bidimensionnel où l'espace poreux est constitué de tronçons rectilignes. Pour simplifier l'exposé, on suppose que ces derniers sont d'épaisseur δ constante, alternativement horizontaux ou verticaux. La cellule de base est présentée à la figure 1.8.

On soumet le milieu poreux à un gradient de concentration macroscopique $\underline{H} = H \underline{e}_x$. Pour une longueur L comptée parallèlement à $\underline{e}_x$, le trajet "réel" des particules est de l'ordre de $D = \sum_i d_i$. On rend compte classiquement⁶ d'une telle morphologie en corrigeant le coefficient de diffusion D^γ par une tortuosité $(L/D)^2$ [45].

On se propose de préciser ce raisonnement en montrant que la conjonction des approches variationnelles exposées à la section 1.5.2 permet d'obtenir très simplement un encadrement de la valeur exacte T du coefficient de tortuosité, et que l'estimation classique $(L/D)^2$ est en fait un minorant de T .

approche en flux On sépare deux tronçons successifs par une interface parallèle à l'une ou l'autre des bissectrices du dièdre $(\underline{e}_x, \underline{e}_y)$ (voir figure 1.8).

On considère alors un flux $\underline{j}^{\gamma'}$ dans la porosité égal à $J \underline{e}_x$ dans les tronçons horizontaux et à $J \underline{e}_y$ dans les tronçons verticaux, où J est à ce stade un paramètre arbitraire. Le champ $\underline{f}_V' = D^\gamma \underline{H} + \underline{j}^{\gamma'}$ est manifestement admissible au sens de la section 1.5.2 et l'on vérifie que :

$$W^*(\underline{f}_V') = \frac{\delta}{2D^\gamma} \left(\sum_{i \in I_x} d_i (D^\gamma H + J)^2 + \sum_{i \in I_y} d_i (D^{\gamma^2} H^2 + J^2) \right) \quad (1.85)$$

où I_α , ($\alpha = x, y$) désigne l'ensemble des indices i correspondant à des tronçons parallèles à $\underline{e}_\alpha$.

⁶le raisonnement consiste à admettre que le gradient local de ρ^γ est approximativement de norme constante, et orienté de façon colinéaire au tronçon. On a donc :

$$\underline{\text{grad}} \rho^\gamma \approx H \frac{L}{D} \underline{e}_i \quad (\underline{e}_i = \underline{e}_x \text{ ou } \underline{e}_y) \quad (1.83)$$

dont on déduit :

$$\langle \underline{\text{grad}} \rho^\gamma \rangle_f \approx H \frac{L^2}{D} \underline{e}_x \quad (1.84)$$

D'après (1.80), le choix optimal J^{opt} de J est obtenu en minimisant l'expression de $W^*(\underline{f}_V')$ donnée en (1.85) :

$$\frac{dW^*}{dJ}(\underline{f}_V') = 0 \longrightarrow J^{opt} = -D^\gamma H \frac{L}{D} \quad (1.86)$$

Ce résultat clarifie le statut variationnel du flux utilisé dans le raisonnement classique. En reportant cette valeur dans (1.85), (1.80) conduit finalement à :

$$\left(\frac{L}{D}\right)^2 \leq T \quad (1.87)$$

qui indique, comme annoncé, que l'estimation classique $(L/D)^2$ de la tortuosité est en fait un minorant de la valeur exacte.

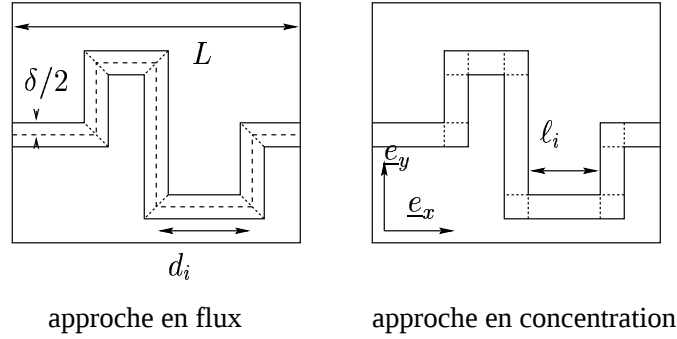


FIG. 1.8: tronçons rectilignes perpendiculaires

approche en concentration On subdivise à présent la porosité en tronçons de longueur ℓ_i (voir figure 1.8), séparés par des carrés de côté δ situés aux coudes du réseau.

Etant donné un réel A , on introduit un champ de concentrations $\rho^{\gamma'}$, dont la variation est affine en fonction de la coordonnée α dans les tronçons parallèles à $\underline{e}_\alpha$ ($\alpha = x, y$), soit $\rho^{\gamma'} = A\alpha + B_i$, et qui est uniforme dans les carrés situés aux coudes du réseau. A représente donc la norme du gradient de la concentration.

On fixe $B_1 = 0$, les autres constantes B_i étant choisies en sorte que $\rho^{\gamma'}$ soit un champ continu.

On considère alors le champ $r' = \rho^{\gamma'} - Hx$. L'unique valeur de A assurant la périodicité de r' est :

$$A = H \frac{L}{\ell} \text{ avec } \ell = \sum_i \ell_i \quad (1.88)$$

Pour ce choix de A , le champ r' est admissible ($r' \in \mathcal{R}$) et l'inégalité s'applique. Tous calculs faits, il vient :

$$W(r') = \frac{1}{2} D^\gamma \delta \ell H^2 \left(\left(\frac{L}{\ell} \right)^2 - 1 - 2X \right) \text{ avec } X = \frac{\sum_{i \in I_y} \delta}{\ell} \quad (1.89)$$

Remarquant que $D = \ell(1 + 2X)$, on trouve :

$$\frac{2W(r')}{D^\gamma \mid C^f \mid H^2} = \frac{(L/\ell)^2 - 1 - 2X}{1 + 2X} \quad (1.90)$$

de sorte que (1.80) conduit à :

$$T \leq (1 + 2X) \left(\frac{L}{D} \right)^2 \quad (1.91)$$

En rapprochant (1.91) de (1.87), on voit que :

$$1 \leq \frac{T}{(L/D)^2} \leq 1 + 2X \quad (1.92)$$

(1.92) fait apparaître que l'estimation classique $(L/D)^2$ de la tortuosité est d'autant meilleure que l'épaisseur δ des tronçons est plus petite devant les longueurs ℓ_i de ces derniers, afin que $X \ll 1$.

Pour la morphologie considérée ici, l'approche variationnelle confirme donc que la correction à apporter au coefficient D^γ pour décrire la diffusion dans un poreux provient de la différence entre le chemin en projection sur la direction du gradient macroscopique de concentration et le chemin "tortueux" auquel sont astreintes les molécules du fait de la présence du solide.

étude des effets de constriction

On se propose à présent d'analyser et de quantifier les effets de constriction dans le calcul de la tortuosité d'un milieu poreux.

Pour ce faire, on considère un réseau poreux périodique bidimensionnel dont la cellule

de base est représentée à la figure 1.9. La porosité est constituée de canaux d'épaisseur alternativement égale à e et E , et de longueur alternativement égale à l et L .

On cherche à étudier les variations de la tortuosité longitudinale en fonction des rapports $\varepsilon = e/E$ et $\lambda = l/L$.

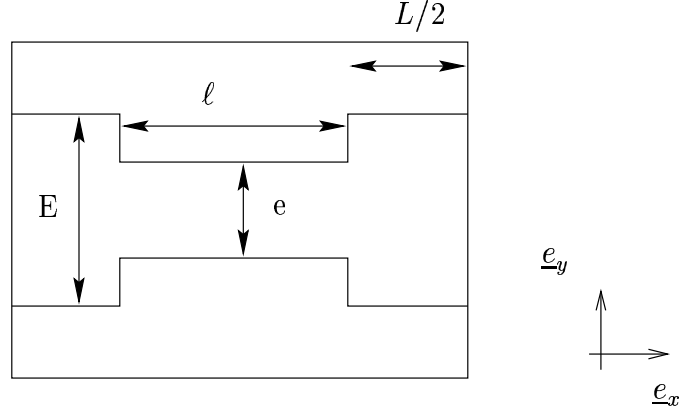


FIG. 1.9: cellule de base

approche en flux On décompose le domaine effectivement occupé par le fluide saturant en plusieurs blocs dont la géométrie est paramétrée par δ (voir figure 1.10).

Le flux $\underline{j}^{\gamma'}$ prend alors les valeurs suivantes :

$$\underline{j}^{\gamma'} = \begin{cases} \underline{V} = V \underline{e}_x & , \text{ dans la grande section} \\ \underline{v} = v \underline{e}_x & , \text{ dans la petite section} \\ \underline{0} & , \text{ dans les "coins"} \\ \underline{j}^{\gamma'} = \underline{w}_i & , \text{ ailleurs} \end{cases} \quad (1.93)$$

Par ailleurs, les conditions d'interface entre les blocs permettent de réduire le nombre de paramètres du problème posé. La nullité de la discontinuité normale aux interfaces donne :

$$(\underline{V} - \underline{w}_i) \cdot \underline{n} = 0 \longrightarrow V = w \cos \theta ; w = |w_i| \quad (i = 1, 4) \quad (1.94)$$

$$(\underline{v} - \underline{w}_i) \cdot \underline{n} = 0 \longrightarrow v = \frac{w \cos \theta}{\varepsilon} = \frac{V}{\varepsilon} ; \varepsilon = \frac{e}{E} \quad (1.95)$$

On se ramène donc à la résolution d'un problème à deux paramètres que l'on va chercher à optimiser.

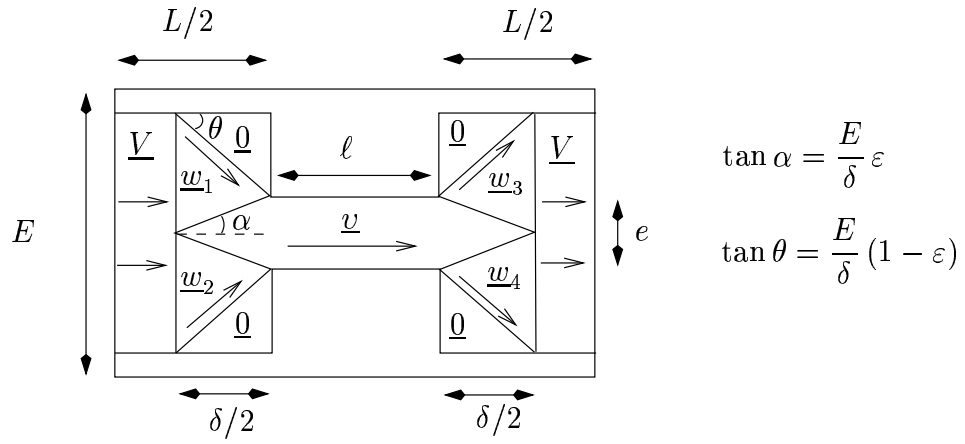


FIG. 1.10: approche en flux

Le champ $\underline{f}'_V = D^\gamma \underline{H} + \underline{j}^{\gamma'}$ est admissible au sens de la section 1.5.2 et l'on a :

$$\begin{aligned}
 W^*(\underline{f}'_V) &= \frac{\delta E}{4D^\gamma} (D^\gamma H)^2 \\
 &+ \frac{\delta E}{4D^\gamma} [(D^\gamma H)^2 + w^2 + 2D^\gamma H w \cos \theta] \\
 &+ \frac{\varepsilon L E}{4D^\gamma} (2\lambda + \frac{\delta}{L}) [(D^\gamma H)^2 + v^2 + 2D^\gamma H v] \\
 &+ \frac{L E}{2D^\gamma} (1 - \frac{\delta}{L}) [(D^\gamma H)^2 + V^2 + 2D^\gamma H V]
 \end{aligned} \tag{1.96}$$

ou encore, en utilisant les résultats (1.94) et (1.95) et les relations géométriques présentées à la figure 1.10 :

$$W^*(\underline{f}'_V) = \frac{L E}{2D^\gamma} \left\{ (1 + \lambda \varepsilon) (D^\gamma H)^2 + \left[\frac{\delta (1 - \varepsilon) + L (\lambda + \varepsilon)}{L \varepsilon} \right] V^2 + 2 (\lambda + 1) D^\gamma H V \right\} \tag{1.97}$$

D'après (1.80), le choix optimal (δ^{opt}, V^{opt}) du couple (δ, V) est obtenu en minimisant l'expression de $W^*(\underline{f}'_V)$ donnée en (1.97) :

$$\begin{aligned}
 \frac{dW^*(\underline{f}'_V)}{d\delta} \Big|_{V, fixe} &= 0 \longrightarrow \delta^{opt} = E \sqrt{\varepsilon(1 - \varepsilon)} \\
 \frac{dW^*(\underline{f}'_V)}{dV} \Big|_{\delta, fixe} &= 0 \longrightarrow V^{opt} = -\frac{(1 + \lambda) L \varepsilon}{\delta (1 - \varepsilon) + L (\lambda + \varepsilon)} D^\gamma H
 \end{aligned} \tag{1.98}$$

En reportant cette valeur dans (1.97) et en introduisant le paramètre adimensionnel $\Lambda = \delta/L$, (1.80) aboutit finalement à une estimation par défaut T^- de la tortuosité :

$$\frac{\varepsilon [(1 + \lambda\varepsilon)(1 - \Lambda) + \lambda(1 + \lambda)]}{(1 + \lambda\varepsilon) [\Lambda(1 - \varepsilon) + \lambda + \varepsilon]} = T^- \leq T \quad (1.99)$$

où l'on vérifie $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} T^- = 0$.

Le cas des fortes constriction est celui où $\varepsilon \ll 1$ ($\Lambda \ll 1$). Dans ces conditions, si $\lambda = O(1)$, on voit que :

$$T^- \sim \varepsilon (\lambda + 1 + \frac{1}{\lambda}) \quad (1.100)$$

approche en concentration La porosité est à présent subdivisée en 3 blocs d'épaisseurs respectives E , e et E (voir figure 1.11).

Soit $\rho^{\gamma'}$, une fonction continue, affine par morceaux, avec $d\rho^{\gamma'}/dx = H + \alpha$ (resp. $d\rho^{\gamma'}/dx = H + \beta$) dans les portions d'épaisseur e (resp. E) où α et β sont des paramètres à définir. La continuité du champ $\rho^{\gamma'}$ impose :

$$\rho^{\gamma'} = \begin{cases} (H + \beta) x & \text{dans le bloc 1} \\ (H + \alpha) x + (\beta - \alpha) \frac{L}{2} & \text{dans le bloc 2} \\ (H + \beta) x + (\alpha - \beta) \ell & \text{dans le bloc 3} \end{cases} \quad (1.101)$$

La condition de périodicité à laquelle le champ $r' = \rho^{\gamma'} - Hx$ des fluctuations sur la cellule de base est astreint permet de définir une liaison entre α et β :

$$r'(x = 0) = r'(x = \ell + L) \iff \beta = -\lambda \alpha \quad (1.102)$$

Pour cette valeur de β , le champ r' est admissible ($r' \in \mathcal{R}$) et l'inégalité (1.80) s'applique. On a donc :

$$W(r') = \frac{D^\gamma L E}{2} \alpha^2 \lambda (\lambda + \varepsilon) - D^\gamma L E \alpha \lambda (1 - \varepsilon) H \quad (1.103)$$

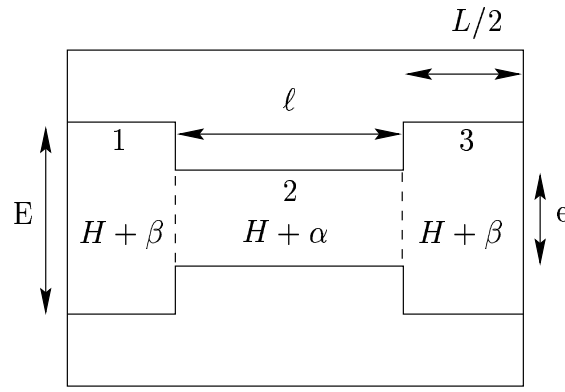


FIG. 1.11: approche en concentration

On optimise le choix de α dans la relation (1.103) :

$$\frac{dW(r')}{d\alpha} = 0 \longrightarrow \alpha^{opt} = \frac{1 - \varepsilon}{\lambda + \varepsilon} H \quad (1.104)$$

et en reportant cette valeur dans (1.103), (1.80) donne :

$$T \leq T^+ = \frac{\varepsilon (1 + \lambda)^2}{(1 + \lambda \varepsilon) (\lambda + \varepsilon)} \quad (1.105)$$

A nouveau, dans le cas des fortes constriction, on observe, si $\lambda = O(1)$, que :

$$T^+ \sim \varepsilon \left(\lambda + 2 + \frac{1}{\lambda} \right) \quad (1.106)$$

Finalement, les résultats (1.99) et (1.105) fournissent un encadrement de la tortuosité due à la constriction en fonction des paramètres géométriques de la cellule de base :

$$\frac{\varepsilon [(1 + \lambda \varepsilon)(1 - \Lambda) + \lambda(1 + \lambda)]}{(1 + \lambda \varepsilon) [\Lambda(1 - \varepsilon) + \lambda + \varepsilon]} \leq T \leq \frac{\varepsilon (1 + \lambda)^2}{(1 + \lambda \varepsilon) (\lambda + \varepsilon)} \quad (1.107)$$

qui se réduit dans le cas des fortes constriction au résultat suivant :

$$\varepsilon \left(\lambda + 1 + \frac{1}{\lambda} \right) \leq T \leq \varepsilon \left(\lambda + 2 + \frac{1}{\lambda} \right) \quad (1.108)$$

Finalement, on retiendra que les fortes constriction ($\varepsilon \ll 1$) entraînent $T = O(\varepsilon)$ dans les cas où $\lambda = O(1)$.

Ce résultat précise l'intuition physique selon laquelle dans un espace poreux où les rayons

d'accès sont petits par rapport aux rayons de pores l'effet de tortuosité est essentiel dans le calcul du coefficient de diffusion macroscopique.

1.5.4 estimations numériques du coefficient de diffusion dans le cas périodique

Les estimations numériques du tenseur de diffusion relatives au cas périodique présentées dans cette section sont basées sur (1.79) et le principe de minimum en concentration qui conduit à l'inégalité de droite dans (1.81). La minimisation de $W(r')$ est effectuée dans le cadre de la Méthode des Éléments Finis. Pour un maillage donné, la solution du calcul Éléments Finis qui réalise pour ce maillage le minimum de W fournit une estimation par excès des tenseurs de diffusion et de tortuosité. Les maillages tridimensionnels ont été réalisés à l'aide d'éléments tétraédriques à 4 nœuds. Les simulations numériques sont effectuées avec le logiciel CASTEM2000.

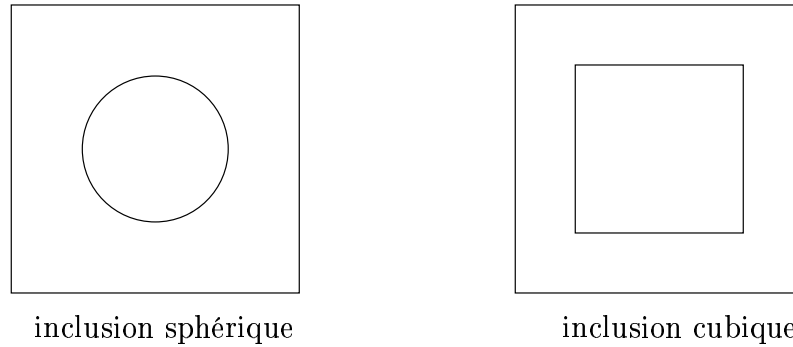


FIG. 1.12: cellule de base cubique avec inclusion sphérique ou cubique

Considérons d'abord le cas d'une cellule de base cubique. Au centre de celle-ci, le solide occupe un domaine sphérique ou cubique (figure 1.12). Dans le cas de l'inclusion sphérique, on notera que cette morphologie ne permet pas d'explorer des valeurs de la porosité inférieures à $1 - \pi/6$. Cette limitation disparaît pour l'inclusion de forme cubique. La figure 1.13 représente le coefficient diagonal du tenseur de diffusion D_{per}^{hom} en fonction de la porosité.

On constate que le schéma de Mori-Tanaka et l'approche périodique pour les deux cellules de base de la figure 1.12 fournissent des estimations très voisines.

Par ailleurs, à porosité identique, on note que le passage de la forme sphérique à la forme cubique ne modifie pas significativement le résultat de l'approche périodique.

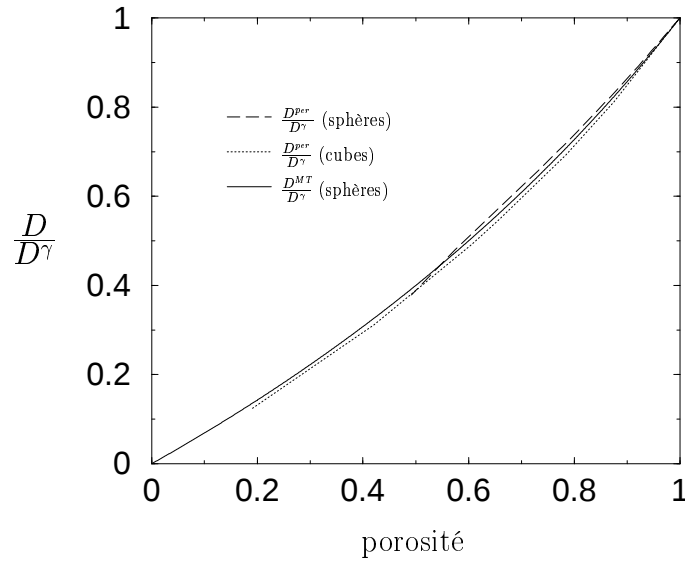


FIG. 1.13: cas périodique : inclusion solide sphérique ou cubique.

L'intérêt de ces résultats réside dans le fait qu'ils justifient l'estimation analytique très simple de la formule (1.52).

On considère maintenant une cellule de base de forme parallélépipédique au centre de laquelle est placé un ellipsoïde de même rapport d'axes $a_1/a_3 = 10$ (figure 1.14.(a)). L_i désignant la demi-longueur de l'arête du parallélépipède colinéaire à la direction $\underline{e}_i$, on fixe le rapport L_1/L_3 égal à a_1/a_3 , de sorte que la porosité du réseau périodique correspondant est indépendante de l'aplatissement de l'ellipsoïde, égale à $1 - \frac{\pi}{6} \left(\frac{a_1}{L_1} \right)^3$.

Pratiquement, les différentes valeurs de la porosité sont obtenues, sans modification du parallélépipède, en augmentant le volume de l'ellipsoïde de façon homothétique. Comme dans le cas d'inclusion sphérique, la valeur minimale accessible est $1 - \pi/6$.

La figure 1.15 compare les coefficients D_{11} et D_{33} du tenseur de diffusion prévus par le schéma de Mori-Tanaka pour un ellipsoïde $\mathcal{E}$ de rapport d'axes $a_1/a_3 = 10$ et les résultats de l'approche périodique⁷.

D'une part, contrairement ce que prévoit le schéma de Mori-Tanaka, on observe que l'aplatissement de l'ellipsoïde ne fait pas tendre le calcul périodique de D_{11} vers la loi des mélanges (voir section 1.4.1).

D'autre part, le rapport D_{33}/D_{11} qui mesure l'anisotropie du transport diffusif est très proche de 1 dans le cas périodique tandis qu'il est beaucoup plus faible dans l'estimation de Mori-Tanaka. Ces deux constatations sont commentées successivement ci-après.

⁷les irrégularités de la courbe issue du calcul Éléments Finis sont liées à la qualité du maillage

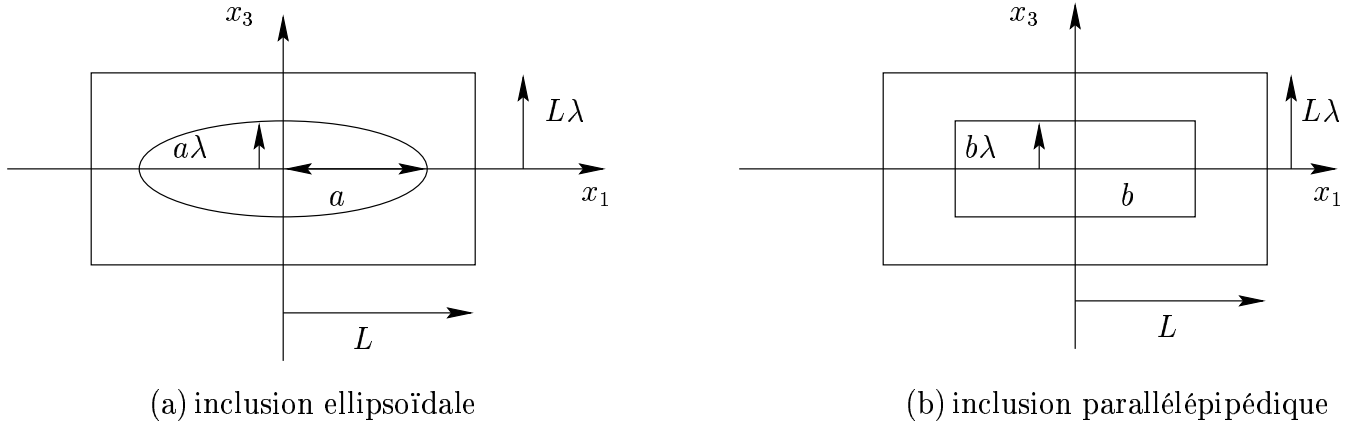


FIG. 1.14: cellule de base parallélépipédique avec inclusion ellipsoïdale ou parallélépipédique

On s'intéresse tout d'abord à l'effet de l'aplatissement sur les coefficients D_{11} et T_{11} .

Pour effectuer un calcul analytique simple, il est commode de remplacer l'inclusion solide ellipsoïdale par une inclusion de forme parallélépipédique, comme à la figure 1.14.(b). On note b (resp. L) la demi-longueur des arêtes de l'inclusion (resp. de la cellule de base) parallèles à $\underline{e}_1$ et l'on pose $X = b/L$.

La morphologie particulière de l'inclusion placée au centre de la cellule de base invite à explorer des fluctuations r' impaires par rapport à x_1 .

On pose donc $r'_A = A \sin(\pi x_1/L)$. En optimisant le choix du paramètre A , on montre que l'inégalité de droite de (1.80) conduit à :

$$T_{11}^{per} \leq 1 - g(X) \quad ; \quad g(X) = \frac{2X^4 \sin^2 \pi X}{\pi^2(1 - X^3) \left(1 - X^3 \left(1 + \frac{\sin 2\pi X}{2\pi X} \right) \right)} \quad (1.109)$$

L'existence d'une majoration de T_{11}^{per} indépendante de l'aplatissement quantifié par λ confirme le résultat du calcul numérique selon lequel T_{11}^{per} ne tend pas vers 1.

Il convient cependant de souligner le fait que la majoration (1.109) est tributaire de la morphologie particulière examinée ici, où l'inclusion est placée au centre de la cellule de base. En particulier, le fait qu'elle soit indépendante de l'aplatissement ne possède aucune généralité.

La deuxième constatation issue de la figure 1.15 porte sur le fait que les valeurs de D_{33}^{per} sont significativement supérieures à celles de l'estimation D_{33}^{MT} de Mori-Tanaka.

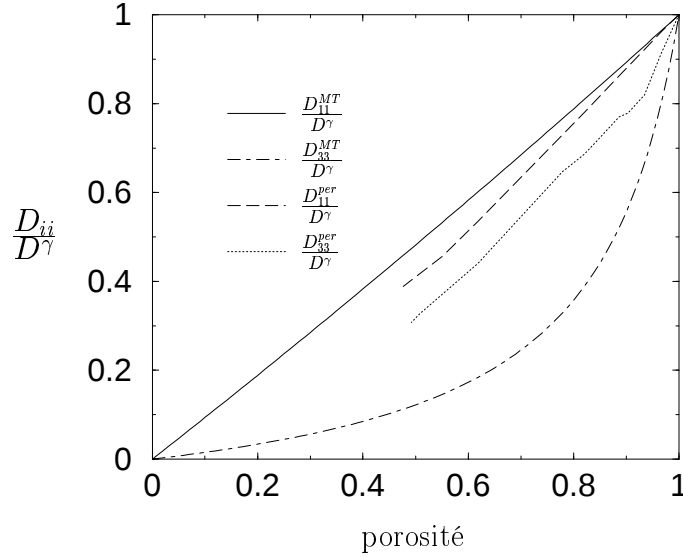


FIG. 1.15: cas périodique : inclusion solide ellipsoïdale $a_1/a_3 = 10$.

En d'autres termes, le calcul périodique fournit une valeur plus élevée du coefficient de tortuosité T_{33} . Il prévoit également une faible anisotropie du transport diffusif. Ces résultats sont à imputer à la trop grande simplicité de la morphologie de la figure 1.14.

En effet, celle-ci se révèle insuffisamment "tortueuse" vis-à-vis d'un gradient macroscopique colinéaire à $\underline{e}_3$ au sens où, contrairement au schéma de la figure 1.5, l'aplatissement des particules solides n'interdit pas l'existence de trajets rectilignes colinéaires à $\underline{e}_3$.

Ce point peut être précisé au moyen d'une approche variationnelle en flux. Soit donc $\mathcal{V}$ le cylindre dont les génératrices, colinéaires à $\underline{e}_3$, s'appuient sur le contour de l'ellipsoïde de la figure 1.14.(a). L'idée consiste à faire jouer aux inclusions solides le rôle d'écrans neutralisant complètement le flux dans le domaine $\mathcal{V}$.

On considère à cet effet le champ $\underline{j}^{\gamma'}$ égal à $-D^\gamma H \underline{e}_3$ en dehors de $\mathcal{V}$ et nul à l'intérieur de $\mathcal{V}$. En appliquant l'inégalité de gauche de (1.81) à la fluctuation $\underline{f} = \underline{j}^{\gamma'} + D^\gamma H \underline{e}_3$, on obtient un minorant noté D_{33}^{min} de D_{33}^{per} :

$$\frac{D_{33}^{per}}{D^\gamma} \geq D_{33}^{min} = 1 - \frac{\pi}{4} \left(\frac{a_1}{L_1} \right)^2 = 1 - \frac{\pi}{4} \left(\frac{6}{\pi} (1 - \varphi^f) \right)^{\frac{2}{3}} \quad (1.110)$$

La figure 1.16 montre que les variations de D_{33}^{per} et D_{33}^{min} en fonction de la porosité sont très voisines, toutes deux nettement au-dessus de D_{33}^{MT} . Ce bon accord confirme que le champ $\underline{j}^{\gamma'}$ est une estimation satisfaisante du flux diffusif qui a donc lieu essentiellement en dehors du cylindre $\mathcal{V}$, sur des trajets faiblement tortueux.

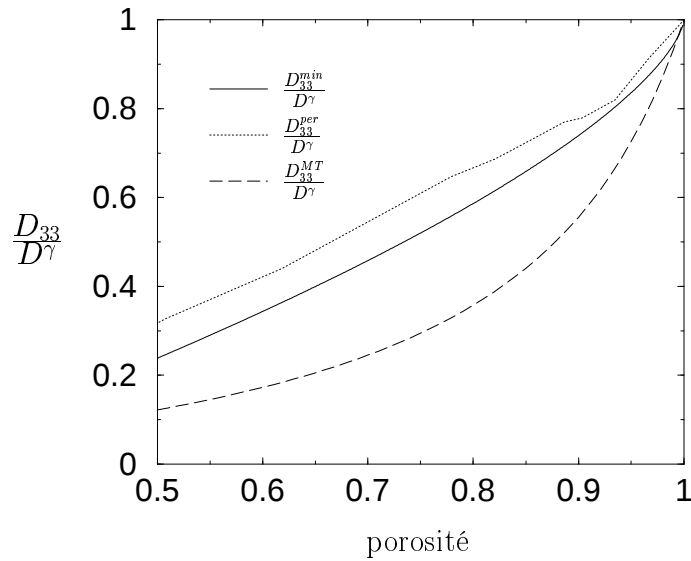


FIG. 1.16: variations de D_{33}^{per} , D_{33}^{MT} et D_{33}^{min}

Les résultats numériques sont donc étroitement conditionnés par le fait que les inclusions solides soient alignées et n'ont pas de portée générale en ce qui concerne la mesure de l'anisotropie du flux diffusif.

1.6 Conclusions

Pour une advection modérée ($V \leq D^\gamma/\mathcal{L}$) et un régime transitoire suffisamment lent ($t_c \geq \mathcal{L}^2/D^\gamma$), le transport diffusif est homogénéisable.

Sous ces conditions et en négligeant la compressibilité de la phase fluide, le flux diffusif macroscopique d'un soluté est relié de façon linéaire au gradient macroscopique de sa concentration à l'aide d'un tenseur de diffusion macroscopique, produit du coefficient de diffusion en solution infinie, de la porosité et d'un tenseur de tortuosité. Ce dernier, fonction des seuls paramètres morphologiques de l'échelle microscopique, peut être déterminé par une méthode de changement d'échelle d'espace à partir d'un problème **purement diffusif** posé à l'échelle microscopique en exploitant l'analogie, alors établie, avec les problèmes thermique et mécanique classiques.

Les méthodes d'estimation utilisées classiquement dans les problèmes de thermique [67] ou d'élasticité des matériaux hétérogènes fournissent alors des expressions analytiques simples de la tortuosité dans le cas isotrope où le solide peut être modélisé par des inclu-

sions sphériques.

Elles permettent aisément d'analyser l'anisotropie du phénomène de diffusion quand la phase solide est décrite au moyen d'inclusions ellipsoïdales de forme et orientation identiques.

Pour une inclusion aplatie possédant la symétrie de révolution autour de son petit axe, le coefficient de tortuosité dans les directions des grands axes tend vers 1, tandis que l'anisotropie augmente avec le rapport des axes de l'ellipsoïde.

La méthode de l'homogénéisation périodique [6] fournit un cadre théorique rigoureux et fécond pour la recherche de la formulation des lois du transport à l'échelle macroscopique.

Cependant, la détermination pratique du tenseur de diffusion macroscopique, qui repose sur la résolution numérique d'un problème tridimensionnel elliptique à conditions aux limites périodiques, est évidemment plus lourde, même pour des morphologies simples.

Dans le cas d'inclusions sphériques, l'accord avec les méthodes d'estimation est excellent. En revanche, il n'est pas possible de rendre compte de l'anisotropie du transport diffusif induit par l'aplatissement des particules de solides avec une morphologie simple, du type de celles de la figure 1.14. Le recours à une cellule de base plus complexe devrait toutefois permettre de pallier cette insuffisance.

Chapitre 2

Influence de la fissuration sur les phénomènes de diffusion et d'advection

Sommaire

2.1	Introduction	69
2.2	Les différentes échelles du problème	70
2.3	Traction et ouverture de fissure	72
2.4	Transport diffusif dans un milieu poreux fissuré	74
2.4.1	le passage <i>micro</i> → <i>méso</i>	74
2.4.2	le passage <i>méso</i> → <i>macro</i>	75
2.4.3	estimations du tenseur de diffusion du milieu non-fissuré (micro→méso)	76
2.4.4	estimations du tenseur de diffusion macroscopique (méso→macro)	78
2.5	Transport advectif dans un milieu poreux fissuré	82
2.6	Conclusions	85

Dans la pratique, l'existence d'une fissuration est susceptible de modifier significativement les propriétés d'un géomatériau ([72], [60], [98], [85], [20], [66]). D'un point de vue mécanique, ces fissures entraînent une diminution de ces propriétés élastiques. Sur le plan du transport, elles représentent des chemins préférentiels pour l'écoulement du fluide et contribuent *a priori* à l'augmentation des propriétés de transport.

On s'attache ici à étudier l'effet de l'ouverture des fissures sur les processus d'advection et de diffusion au sein d'un matériau poreux saturé. On développe pour cela une approche micromécanique permettant d'établir les lois de transport homogénéisées en fonction de l'information disponible à l'échelle des pores. On discutera, en particulier, de la géométrie des pores.

2.1 Introduction

La question soulevée ici trouve son intérêt dans de nombreuses situations pratiques allant du génie civil (diffusion des ions chlorures dans le béton [57]) à l'ingénierie pétrolière (écoulements dans les réservoirs).

On admet l'existence d'un volume élémentaire représentatif (v.e.r.) pour le matériau fissuré. Dans ce v.e.r., on considère un réseau de fissures circulaires parallèles (voir Fig 2.1). L'espace poreux connecté, saturé par la phase fluide, est alors divisé en deux familles : la

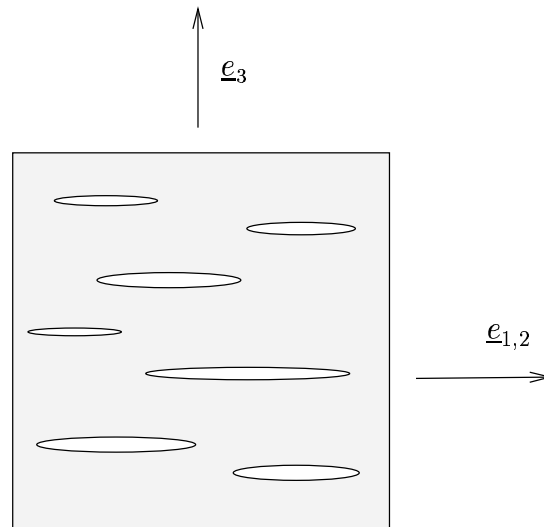


FIG. 2.1: orientation des fissures

porosité du milieu poreux “sain”, *i.e.* non-fissuré, et la porosité de fissure. Dans la perspective de l'homogénéisation des propriétés de transport, notre vision de la morphologie est celle d'un milieu à deux phases : le milieu poreux sain jouant le rôle de matrice et les

fissures jouant le rôle de phase inclusionnaire.

La porosité de fissure est susceptible de varier en fonction du chargement appliqué sur la frontière du v.e.r.. Notre objectif est d'analyser l'effet du chargement mécanique sur les propriétés de transport. Le type de chargement retenu est une traction uniaxiale appliquée dans la direction normale aux fissures, appelée direction verticale (vecteur $\underline{e}_3$) dans la suite. L'état de contrainte effectif macroscopique est donc représenté par un tenseur uniaxial $\underline{\underline{\Sigma}} = \Sigma \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3$. En l'absence de ce chargement, les fissures sont supposées fermées. Leur présence est due à l'application antérieure d'un chargement du même type. Cependant, le v.e.r. considéré ici est supposé évoluer de façon totalement réversible, c'est-à-dire que les fissures existantes ne se propagent pas et que l'on ne crée pas de nouvelles fissures. Aussi, l'effet de l'application d'une contrainte de traction n'est pas la création d'un nouveau réseau d'écoulement pour le fluide mais seulement l'ouverture de fissures existantes. On cherche ici à quantifier l'impact de ce phénomène sur la perméabilité et le coefficient de diffusion macroscopiques.

Dans un premier temps, on s'intéresse à la détermination du tenseur de diffusion effectif $\underline{\underline{D}}^{hom}$ du milieu poreux saturé. On envisage ensuite la détermination de la perméabilité macroscopique k_h^{hom} dans les directions parallèles au plan de fissuration.

Il est important de souligner le fait que le cadre d'étude fixé est celui des microfissures, au sens où l'on suppose que chaque fissure dans le v.e.r. est toujours entourée par le matériau "sain". La formation de macrofissures n'est pas envisagée dans le cadre de cette étude. Cette macrofissuration a naturellement pour effet d'augmenter considérablement la perméabilité ([73], [25]) car tout se passe dans ce cas comme si les propriétés de transport étaient celles de la macrofissure elle-même. Dans notre cas, on imagine aisément que l'influence des fissures est nettement moins spectaculaire. L'objet de notre propos est justement d'estimer l'ordre de grandeur de l'effet de l'ouverture des fissures lorsque le phénomène de coalescence est exclu.

2.2 Les différentes échelles du problème

L'espace poreux d'un matériau poreux fissuré est subdivisé en deux familles : (1) les pores du matériau poreux "sain" supposés sphériques et (2) les fissures ouvertes. On s'intéresse ici à des fissures dont le rayon caractéristique est grand devant la taille caractéristique des pores. Manifestement, la modélisation des phénomènes de diffusion et d'advection doit gérer l'existence de 3 échelles d'espace séparées, appelées dans la suite échelles microscopique, mésoscopique et macroscopique.

L'échelle microscopique est celle qui décrit la physique la plus fine du problème¹. A cette échelle, le matériau poreux non-fissuré se présente comme un milieu hétérogène dans lequel interagissent une phase solide et une phase fluide. La taille caractéristique $\mathcal{I}$ de cette échelle est définie par la taille des grains solides, ou par celle des pores. A cette échelle, la phase fluide peut être considérée, au même titre que la phase solide, comme un milieu continu. $\underline{z}$ désigne le vecteur position de cette échelle. Le v.e.r. du milieu poreux non-fissuré, noté $d^2\Omega(\underline{x})$, a pour taille caractéristique $\mathcal{M} \gg \mathcal{I}$.

L'échelle mésoscopique est celle à laquelle il est possible de définir un milieu homogène équivalent prenant en compte les hétérogénéités du milieu poreux "sain". Le rayon caractéristique a des fissures ouvertes est supposé grand par rapport à $\mathcal{M}$. Par conséquent, à l'échelle mésoscopique, le milieu poreux fissuré apparaît comme un matériau hétérogène, formé de deux phases homogènes : le milieu non-fissuré et le fluide saturant les fissures. $\underline{x}$ désigne le vecteur position de cette échelle. Le v.e.r. du milieu poreux fissuré, noté $d\Omega(\underline{\zeta})$, a pour taille caractéristique $\mathcal{A} \gg a$.

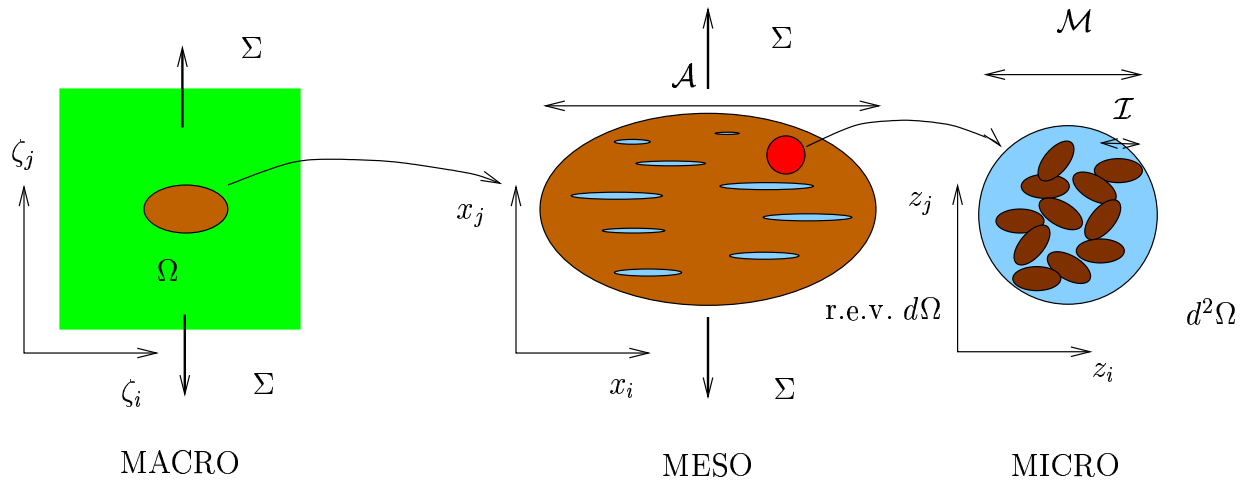


FIG. 2.2: représentation des différentes échelles du problème

L'échelle macroscopique représente l'échelle à laquelle il est possible de définir un milieu homogène équivalent à ce milieu constitué d'un matériau "sain" et de fissures. Ce matériau homogénéisé sera caractérisé, du point de vue du transport, par les tenseurs de diffusion $\underline{\underline{D}}^{hom}(\Sigma)$ et de perméabilité $\underline{\underline{k}}^{hom}(\Sigma)$ macroscopiques dont on cherche à exprimer la dépendance vis-à-vis du chargement appliqué à l'infini, représenté par le tenseur des contraintes macroscopiques $\underline{\underline{\Sigma}} = \Sigma \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3$. En particulier, lorsque l'on supprime ce chargement ($\Sigma = 0$), $\underline{\underline{D}}^{hom}(0)$ et $\underline{\underline{k}}^{hom}(0)$ doivent correspondre aux tenseurs de diffusion $\underline{\underline{D}}^u$

¹pour le mécanicien

et de perméabilité $\underline{k}^u$ du matériau non-fissuré à l'échelle mésoscopique².

2.3 Traction et ouverture de fissure

On cherche ici à déterminer l'ouverture des fissures en fonction de la contrainte macroscopique appliquée. On raisonne tout d'abord dans le cas où l'espace poreux (pores+fissures) est vide. Pour représenter à l'échelle mésoscopique, c'est-à-dire dans $d\Omega(\underline{\zeta})$ considéré comme une structure, l'effet de la contrainte macroscopique $\underline{\Sigma}$, on se donne des conditions aux limites du type Hashin écrites à la frontière $\partial(d\Omega)$ de $d\Omega(\underline{\zeta})$:

$$(\forall \underline{x} \in \partial(d\Omega)) : \underline{\sigma}(\underline{x}) \cdot \underline{n}(\underline{x}) = \underline{\Sigma} \cdot \underline{n}(\underline{x}) \quad (2.1)$$

où $\underline{n}$ est le vecteur unitaire normal à la frontière $\partial(d\Omega)$. Dans le cadre de notre modélisation (fissures parallèles entre elles initialement fermées et normales au chargement appliqué), l'application de ce chargement a pour conséquence l'ouverture des fissures. Il s'agit ici de proposer une estimation de celle-ci et de la porosité de fissure ainsi créée.

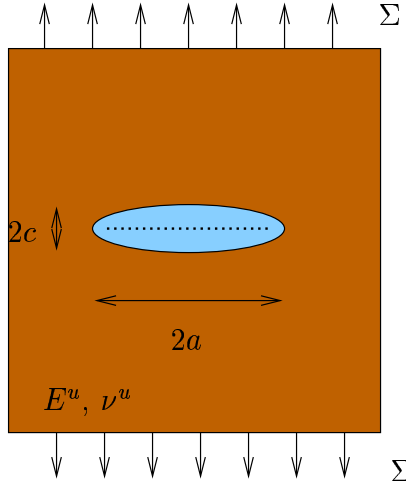


FIG. 2.3: ouverture d'une fissure sous traction

Considérons tout d'abord la situation académique où le v.e.r. $d\Omega(\underline{\zeta})$ contient une fissure isolée, de rayon a , dans une matrice constituée du matériau non-fissuré. Cette dernière est définie, à l'échelle mésoscopique, comme un matériau élastique isotrope de module d'Young E^u et de coefficient de Poisson³ ν^u .

²les fissures sont fermées en l'absence de traction

³'u' pour uncracked

La condition $\mathcal{A} \gg a$ permet d'assimiler la condition aux limites (2.1) à une condition à l'infini. Dans ce cas, la solution analytique du problème est classique ([71], [22]). La fissure circulaire initialement fermée est transformée, sous l'action du chargement, en un ellipsoïde aplati dont l'équation est donnée par :

$$\frac{x_1^2 + x_2^2}{a^2} + \frac{x_3^2}{c^2} = 1 \quad \text{avec} \quad \frac{c}{a} = \frac{4(1 - \nu^{u2})}{\pi E^u} \Sigma \quad (2.2)$$

$2c$ représentant la longueur de l'axe vertical de l'ellipsoïde.

Il est important de souligner que la validité de (2.2) repose sur la condition des petits déplacements, *i.e.* $c/a \ll 1$. En outre, en utilisant une technique d'homogénéisation usuelle, il est possible d'étendre la validité de (2.2) à la situation où des fissures interagissent (voir l'annexe 4.4). En effet, il est clair que l'élasticité globale diminue significativement avec l'augmentation de la densité de fissures. Pourtant, il est possible de montrer que la relation entre l'ouverture de fissure et la contrainte macroscopique de traction Σ demeure inchangée en présence de fissures en interaction. Par conséquent, la validité de (2.2) pourra s'étendre au delà du cas dilué.

Soit N la densité de fissures, c'est-à-dire le nombre de fissures par unité de volume. On définit classiquement le paramètre de densité de fissures $\epsilon = Na^3$, introduit par Budiansky et O'Connell [21]. La porosité de fissures ϕ^c s'exprime alors, en utilisant (2.2), en fonction de ϵ et Σ :

$$\phi^c = \frac{4}{3}\pi a^2 c N = \frac{4}{3}\pi N a^3 \frac{c}{a} = \frac{16}{3} (1 - \nu^{u2}) \epsilon \frac{\Sigma}{E^u} \quad (2.3)$$

On rappelle que l'on ne s'intéresse qu'à des fissures "stables" au sens où elles ne se propagent pas. Dans le cas d'une fissure isolée, la Mécanique de la Rupture propose une relation entre la contrainte de traction maximale et le rayon de fissure a de la forme : $\Sigma_{max} = K_{Ic}/\sqrt{\pi a}$, où K_{Ic} désigne la ténacité du matériau considéré. On suppose ici que cette relation reste valable pour des fissures en interaction. La porosité de fissures maximale, c'est-à-dire la porosité correspondant à l'ouverture réalisée par Σ_{max} , est alors donnée par :

$$\phi_{max}^c = \frac{16}{3\sqrt{\pi}} (1 - \nu^{u2}) \epsilon \frac{K_{Ic}}{E^u \sqrt{a}} \quad (2.4)$$

La transposition des résultats présentés ici au cas d'un milieu poreux saturé par un fluide à la pression uniforme p est immédiate. En exploitant le principe

de superposition, on montre [40] que la présence d'un fluide est intégrée en remplaçant, dans (2.1), (2.2) et (2.3), la contrainte macroscopique $\underline{\underline{\Sigma}}$ par un chargement en contrainte effective $\underline{\underline{\Sigma}} + p\underline{\underline{\delta}}$.

2.4 Transport diffusif dans un milieu poreux fissuré

On examine, tout d'abord, le comportement diffusif d'une espèce γ (soluté) dans la phase fluide saturant les fissures et le milieu poreux "sain". La formulation de ce comportement à l'échelle macroscopique se décompose en deux étapes dont on présente le détail ci-après.

2.4.1 le passage *micro*→*méso*

On commence naturellement par la description du phénomène de diffusion à l'échelle la plus fine, c'est-à-dire l'échelle microscopique. A cette échelle, le processus diffusif dans les pores connectés du milieu poreux non-fissuré est régi par la loi de Fick (1^{ère} loi de Fick). Comme cela a été fait à la section 1.4, on prolonge par 0 le flux de masse $\underline{j}^\gamma(\underline{z})$ de l'espèce γ dans la phase solide. De façon analogue, ρ^γ se rapporte à n'importe quelle extension continue de la masse volumique de la phase fluide. Sous l'hypothèse que le fluide saturant l'espace poreux connecté est incompressible, $\underline{j}^\gamma(\underline{z})$ doit vérifier la loi de conservation de la masse de l'espèce γ du mélange. La composante normale de $\underline{j}^\gamma(\underline{z})$ à l'interface I^{fs} entre les phases solide et fluide doit être continue (cf. 1.3.1) :

$$\operatorname{div}_z \underline{j}^\gamma = 0 \ ; \ [\underline{j}^\gamma] \cdot \underline{n} = 0 \ \text{sur } I^{fs} \quad (2.5)$$

De plus, la loi de Fick relie linéairement $\underline{j}^\gamma(\underline{z})$ au gradient de la masse volumique $\rho^\gamma(\underline{z})$:

$$\underline{j}^\gamma(\underline{z}) = -D(\underline{z}) \underline{\operatorname{grad}}_z \rho^\gamma \ \text{avec} \ D(\underline{z}) = \begin{cases} D^\gamma & \text{dans le fluide} \\ 0 & \text{dans le solide} \end{cases} \quad (2.6)$$

D^γ est le coefficient de diffusion de l'espèce γ dans le fluide saturant les pores. Selon la définition de l'échelle microscopique, (2.6) décrit le milieu poreux non-fissuré comme un milieu hétérogène défini par deux coefficients de diffusion différents suivant la localisation dans le v.e.r..

A l'échelle mésoscopique, le flux de masse $\underline{J}^\gamma(\underline{x})$ de l'espèce γ au point $\underline{x}$ est défini comme la moyenne de $\underline{j}^\gamma(\underline{z})$ sur le v.e.r. $d^2\Omega(\underline{x})$:

$$\underline{J}^\gamma(\underline{x}) = \langle \underline{j}^\gamma(\underline{z}) \rangle_{d^2\Omega(\underline{x})} = \frac{1}{d^2\Omega(\underline{x})} \int_{d^2\Omega(\underline{x})} \underline{j}^\gamma(\underline{z}) dV_z \quad (2.7)$$

avec $\underline{j}^\gamma(\underline{z}) = 0$ dans la fraction solide de $d^2\Omega(\underline{x})$.

D'après (1.24), en l'absence d'advection et en régime permanent, la loi de conservation de la masse à l'échelle méso s'écrit :

$$\text{div}_x \underline{J}^\gamma(\underline{x}) = 0 \quad (2.8)$$

On note $c^\gamma(\underline{x})$, la masse volumique (intrinsèque) de l'espèce γ , définie comme la moyenne de ρ^γ sur la partie fluide de $d^2\Omega(\underline{x})$.

D'après (1.27)-(1.28), la loi de Fick à l'échelle mésoscopique relie linéairement $\underline{J}^\gamma(\underline{x})$ au gradient de $c^\gamma(\underline{x})$:

$$\underline{J}^\gamma(\underline{x}) = -\phi^u D^\gamma \underline{T}^u \cdot \underline{\text{grad}}_x c^\gamma \quad (2.9)$$

ϕ^u désigne la porosité connectée du milieu poreux non-fissuré et $\underline{T}^u$ représente la tortuosité tensorielle de ce milieu⁴. Le concept de tortuosité traduit l'effet de la morphologie des pores à l'échelle microscopique sur les propriétés de transport diffusif du matériau poreux non-fissuré.

L'objectif du passage micro→méso est donc la détermination du tenseur $\underline{T}^u$ en fonction de l'information disponible sur la description géométrique des pores.

2.4.2 le passage *méso* → *macro*

A l'échelle mésoscopique, le fluide saturant une fissure est traité comme un milieu continu. Par conséquent, le processus diffusif dans une fissure peut être décrit, comme à l'échelle du pore, par la loi de Fick relative à la diffusion dans un fluide occupant un espace infini :

$$\underline{J}^\gamma(\underline{x}) = -D^\gamma \underline{\text{grad}}_x c^\gamma \quad (2.10)$$

où D^γ est le même coefficient de diffusion que celui utilisé en (2.6). En ce qui concerne la diffusion, la comparaison de (2.9) et (2.10) amène à considérer, à l'échelle mésoscopique, le matériau poreux fissuré comme un matériau hétérogène constitué de deux phases homogènes, à savoir les fissures (de fraction volumique ϕ^c) et le milieu poreux non-fissuré (de fraction volumique $1 - \phi^c$), chacun des constituants étant caractérisé par un tenseur

⁴voir section 1.3.2

de diffusion uniforme $\underline{\underline{D}}^i$ (i=u, c) :

$$\underline{J}^\gamma(\underline{x}) = -\underline{\underline{D}}(\underline{x}) \cdot \underline{\text{grad}}_x c^\gamma \quad \text{with} \quad \underline{\underline{D}}(\underline{x}) = \begin{cases} \underline{\underline{D}}^u = \phi^u D^\gamma \underline{\underline{T}}^u \text{ (milieu sain)} \\ \underline{\underline{D}}^c = D^\gamma \underline{\underline{\delta}} \text{ (fissures)} \end{cases} \quad (2.11)$$

où $\underline{\underline{\delta}}$ désigne le tenseur unité du second ordre.

Par définition, le tenseur de diffusion $\underline{\underline{D}}^{hom}$ relatif à l'échelle macroscopique relie les moyennes, prises sur $d\Omega$, de $\underline{J}^\gamma$ et $\underline{\text{grad}}_x c^\gamma$:

$$\langle \underline{J}^\gamma \rangle_{d\Omega(\underline{\zeta})} = -\underline{\underline{D}}^{hom} \cdot \langle \underline{\text{grad}}_x c^\gamma \rangle_{d\Omega(\underline{\zeta})} \quad (2.12)$$

Le passage méso→macro propose donc une estimation de $\underline{\underline{D}}^{hom}$ en fonction de l'ouverture de fissure et de la tortuosité du milieu poreux non-fissuré.

D'un point de vue mathématique, le problème défini par (2.8)-(2.11) possède la même structure que le problème (2.5)-(2.6), décrivant le passage micro→ méso. En se basant sur la technique d'homogénéisation utilisée au Chapitre 1, les deux prochains paragraphes s'attachent à formuler des estimations de $\underline{\underline{D}}^u$ et $\underline{\underline{D}}^{hom}$ respectivement.

2.4.3 estimations du tenseur de diffusion du milieu non-fissuré (micro→méso)

Dans le cadre de notre application, l'idée consiste à interpréter la phase solide, formée de grains, comme une phase inclusionnaire par rapport à la phase fluide saturant l'espace poreux du matériau non-fissuré. On se retrouve donc dans les conditions d'étude du Chapitre précédent.

Soit $\underline{h}$ le gradient de masse volumique à l'échelle mésoscopique. Dans la perspective de relier $\underline{h}$ à l'échelle microscopique, on écrit des conditions aux limites du type Hashin sur la masse volumique ρ^γ de l'espèce γ au bord du volume élémentaire $d^2\Omega$:

$$\forall \underline{z} \in \partial(d^2\Omega) : \rho^\gamma(\underline{z}) = \underline{h} \cdot \underline{z} \quad (2.13)$$

Le gradient de masse volumique local de l'espèce γ , $\underline{\text{grad}}_z \rho^\gamma$ est relié à $\underline{h}$ de façon linéaire par l'intermédiaire du tenseur de concentration $\underline{\underline{a}}(\underline{z})$:

$$\underline{\text{grad}}_z \rho^\gamma = \underline{\underline{a}}(\underline{z}) \cdot \underline{h} \quad (2.14)$$

Soit $\langle \cdot \rangle_i$, l'opérateur de moyenne (apparente) et $\underline{h}_i$, le gradient de masse volumique pris en moyenne sur le constituant i ($i = s, f$ pour le solide et le fluide respectivement) dans $d^2\Omega$:

$$\underline{h}_i = \langle \underline{h} \rangle_i = \frac{1}{d^2\Omega(\underline{x})} \int_{d^2\Omega_i(\underline{x})} \underline{h} dV_z \quad (2.15)$$

En exploitant la condition de cohérence $\langle \underline{\underline{a}} \rangle = \underline{\underline{\delta}}$, obtenue en combinant (2.13) et (2.14), on obtient les expressions de $\underline{h}_f$ et $\underline{h}_s$ en fonction de $\underline{h}$:

$$\begin{cases} \underline{h}_s = \langle \underline{\underline{a}} \rangle_s \cdot \underline{h} \\ \underline{h}_f = \langle \underline{\underline{a}} \rangle_f \cdot \underline{h} \end{cases} \Rightarrow (1 - \phi^u) \underline{h}_s + \phi^u \underline{h}_f = \underline{h} \quad (2.16)$$

La relation entre le flux de masse $\underline{J}^\gamma$ et le gradient de masse volumique $\underline{h}$, à l'échelle mésoscopique, est obtenue à partir du système (2.6)-(2.7)-(2.14) :

$$\underline{J}^\gamma = - \langle D \underline{\underline{a}} \rangle_{d^2\Omega} \cdot \underline{h} \quad (2.17)$$

La comparaison de (2.9) et (2.17) aboutit finalement aux expressions suivantes des coefficients de diffusion $\underline{\underline{D}}^u$ et de tortuosité $\underline{\underline{T}}^u$ du milieu non fissuré :

$$\begin{cases} \underline{\underline{D}}^u = \langle D \underline{\underline{a}} \rangle_{d^2\Omega} = D^\gamma (\underline{\underline{\delta}} - (1 - \phi^u) \langle \underline{\underline{a}} \rangle_s) \\ \underline{\underline{T}}^u = \frac{1}{\phi^u} (\underline{\underline{\delta}} - (1 - \phi^u) \langle \underline{\underline{a}} \rangle_s) \end{cases} \quad (2.18)$$

La détermination d'estimations de $\underline{\underline{D}}^u$ et $\underline{\underline{T}}^u$ revient à estimer $\langle \underline{\underline{a}} \rangle_s$ (ou $\underline{h}_s$). Différentes pistes peuvent alors être envisagées :

- La situation “diluée” correspond au cas où la fraction volumique de la phase solide est infinitésimale. Si l'on considère des grains solides $\mathcal{E}$ de forme ellipsoïdale, le gradient de masse volumique local est uniforme :

$$\underline{h}_s = (\underline{\text{grad}}_z \rho^\gamma)^\mathcal{E} = (\underline{\underline{\delta}} - \underline{\underline{S}}^\mathcal{E})^{-1} \cdot \underline{h} \Rightarrow \underline{\underline{a}}^\mathcal{E} = (\underline{\underline{\delta}} - \underline{\underline{S}}^\mathcal{E})^{-1} \quad (2.19)$$

L'estimation diluée $\underline{\underline{D}}^u$ est alors déduite de (2.18) et (2.19) :

$$\underline{\underline{D}}^u = D^\gamma (\underline{\underline{\delta}} - (1 - \phi^u)(\underline{\underline{\delta}} - \underline{\underline{S}}^\mathcal{E})^{-1}) \quad (2.20)$$

- Pour des matériaux “moins poreux”, la prise en compte de l’interaction entre les grains solides conduit à :

$$\underline{\underline{D}}^u = D^\gamma (\underline{\underline{\delta}} - (1 - \phi^u)(\underline{\underline{\delta}} - \phi^u \underline{\underline{S}}^\mathcal{E})^{-1}) \quad (2.21)$$

Dans la situation particulière où les grains sont supposés à géométrie sphérique, on obtient les estimations suivantes :

$$\underline{\underline{D}}_{HS}^u = \frac{2\phi^u}{3 - \phi^u} D^\gamma \underline{\underline{\delta}} \quad ; \quad \underline{\underline{T}}_{HS}^u = \frac{2}{3 - \phi^u} \underline{\underline{\delta}} \quad (2.22)$$

- Le schéma différentiel [126] propose des estimations du comportement diffusif mieux adaptées à la situation des faibles porosités (cf. section 1.4.2). Il met en œuvre un processus incrémental pour lequel le $k^{\text{ième}}$ milieu homogénéisé est caractérisé par la relation récursive :

$$\underline{\underline{D}}_{k+1}^u = \underline{\underline{D}}_k^u - d\varepsilon \underline{\underline{D}}_k^u \cdot (\underline{\underline{\delta}} - \underline{\underline{S}}^\mathcal{E})^{-1} \quad (2.23)$$

Pour des grains solides de forme sphérique, on trouve⁵ :

$$\underline{\underline{D}}_{DS}^u = (\phi^u)^{3/2} D^\gamma \underline{\underline{\delta}} \quad ; \quad \underline{\underline{T}}_{DS}^u = (\phi^u)^{1/2} \underline{\underline{\delta}} \quad (2.24)$$

2.4.4 estimations du tenseur de diffusion macroscopique (mésos→macro)

A l’échelle mésoscopique, l’idée consiste à considérer les fissures ouvertes distribuées au sein du matériau du point de vue du transport diffusif comme des inhomogénéités ellipsoïdales plongées dans une matrice homogène. Celle-ci s’identifie au milieu poreux “sain” et ses propriétés de diffusion peuvent être estimées par les techniques présentées ci-dessus (cf. section 2.4.3). La technique d’homogénéisation basée sur les résultats d’Eshelby pour

⁵ces résultats sont identiques (heureusement !) à ceux de (1.61)

le problème de l'inhomogénéité ellipsoïdale est alors parfaitement adaptée à l'estimation de l'effet de l'ouverture des fissures sur la détermination du coefficient de diffusion macroscopique $\underline{\underline{D}}^{hom}$. Les fractions volumiques de la phase inclusionnaire (les fissures) et de la phase matricielle (le matériau sain) sont respectivement égales⁶ à ϕ^c et $1 - \phi^c$. Pour simplifier notre propos, on fait l'hypothèse d'isotropie des tenseurs de diffusion $\underline{\underline{D}}^u$ et de tortuosité $\underline{\underline{T}}^u$ du milieu poreux non-fissuré ($\underline{\underline{D}}^u = D^u \underline{\underline{\delta}}$, $\underline{\underline{T}}^u = T^u \underline{\underline{\delta}}$).

Soit $\underline{H}$ le gradient macroscopique de masse volumique. La masse volumique locale $c^\gamma(\underline{x})$ à l'échelle mésoscopique est soumise à des conditions aux limites du type Hashin écrites sur $\partial(d\Omega)$:

$$\forall \underline{x} \in \partial(d\Omega) : c^\gamma(\underline{x}) = \underline{H} \cdot \underline{x} \quad (2.25)$$

La démarche est identique à la section précédente : la valeur locale, au point $\underline{x}$ dans $d\Omega$, du gradient de masse volumique $\underline{\text{grad}}_{\underline{x}} c^\gamma$ est reliée au gradient macroscopique $\underline{H}$ par l'intermédiaire du tenseur de localisation $\underline{\underline{A}}(\underline{x})$:

$$\underline{\text{grad}}_{\underline{x}} c^\gamma(\underline{x}) = \underline{\underline{A}}(\underline{x}) \cdot \underline{H} \quad \text{avec} \quad (1 - \phi^c) < \underline{\underline{A}} >_u + \phi^c < \underline{\underline{A}} >_c = \underline{\underline{\delta}} \quad (2.26)$$

En combinant (2.11) et (2.12) avec (2.26), on obtient :

$$\underline{\underline{D}}^{hom} = < \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\underline{A}} >_{d\Omega} = \underline{\underline{D}}^u + \phi^c (\underline{\underline{D}}^c - \underline{\underline{D}}^u) \cdot < \underline{\underline{A}} >_c \quad (2.27)$$

avec $\underline{\underline{D}}^c = D^c \underline{\underline{\delta}}$ (cf. 2.11).

D'après (2.27), le problème consiste sinon à déterminer du moins à estimer la moyenne du tenseur de localisation dans les fissures. Soit $\underline{H}_i$, l'estimation de la moyenne prise sur la phase i du gradient de masse volumique ($i=c,u$).

$$\begin{cases} \underline{H}_c = < \underline{\underline{A}} >_c \cdot \underline{H} \\ \underline{H}_u = < \underline{\underline{A}} >_u \cdot \underline{H} \end{cases} \Rightarrow (1 - \phi^c) \underline{H}_u + \phi^c \underline{H}_c = \underline{H} \quad (2.28)$$

Le même raisonnement qu'à la section 2.4.3 conduit désormais à :

$$\underline{H}_c = (\underline{\underline{\delta}} + \frac{1}{D^u} S^c \cdot (\underline{\underline{D}}^c - \underline{\underline{D}}^u))^{-1} \cdot \underline{H}_u \quad (2.29)$$

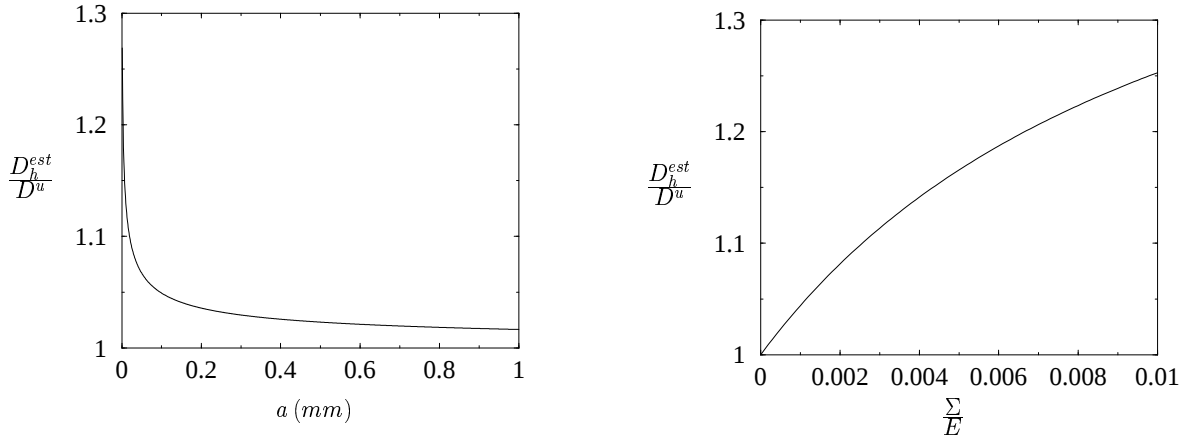
⁶on note que la fraction volumique à prendre en compte pour le milieu sain est relative à l'échelle mésoscopique. C'est donc $1 - \phi^c$ et non pas ϕ^u qui renvoie à l'espace poreux du milieu sain à l'échelle microscopique

$\underline{\underline{S}}^c$ désigne le tenseur d'Eshelby associé aux fissures ouvertes de forme ellipsoïdale.

En combinant (2.28) et (2.29), on obtient l'estimation de $\langle \underline{\underline{A}} \rangle_c$ recherchée :

$$\langle \underline{\underline{A}} \rangle_c = \left(\underline{\underline{\delta}} + \frac{1}{D^u} \underline{\underline{S}}^c \cdot (\underline{\underline{D}}^c - \underline{\underline{D}}^u) \right)^{-1} \cdot \left((1 - \phi^c) \underline{\underline{\delta}} + \phi^c \left(\underline{\underline{\delta}} + \frac{1}{D^u} \underline{\underline{S}}^c \cdot (\underline{\underline{D}}^c - \underline{\underline{D}}^u) \right)^{-1} \right)^{-1} \quad (2.30)$$

On rappelle ici que $\underline{\underline{S}}^c$ dépend non seulement de l'orientation mais aussi du rapport d'aspect des inclusions, *i.e.* des fissures. Dans le cas présent, l'orientation des fissures est fixée perpendiculairement au chargement en traction. (2.2) et (2.3) prennent en compte la dépendance du rapport d'aspect et de la fraction volumique des fissures par rapport au chargement mécanique (traction Σ) appliqué sur le matériau considéré. En conséquence, l'estimation de $\underline{\underline{D}}^{hom}$, obtenue en remplaçant $\langle \underline{\underline{A}} \rangle_c$ dans (2.27) par l'estimation donnée en (2.30), est une fonction du niveau de chargement $\underline{\underline{D}}^{hom}(\Sigma)$.



(a) Coeff. diff. horizontal D_h^{est} ($\phi^c = \phi_{max}^c$)

(b) Influence du chargement ($a = 10 \mu m$)

FIG. 2.4: simulation numérique du processus diffusif

En exploitant l'hypothèse sur les petits rapports d'aspect $c/a \ll 1$, on montre que l'expression complète de $\underline{\underline{D}}^{est}(\Sigma)$ peut être simplifiée si bien que les coefficients de diffusion horizontal et vertical peuvent être approchés par :

$$\left. \begin{aligned} D_h^{est} &\approx D^\gamma T^u \phi^u \left(1 + \frac{\phi^c \tau}{1 + \frac{3\tau}{16\epsilon} \phi^c} \right) \\ D_v^{est} &\approx D^\gamma T^u \phi^u \left(1 + \phi^c \frac{\tau}{1 + \tau} \right) \end{aligned} \right\} \text{ avec } \tau = \frac{1 - T^u \phi^u}{T^u \phi^u} \quad (2.31)$$

D'après (2.31), D_v^{est} et D_h^{est} sont, comme on aurait pu l'imaginer, des fonctions croissantes de la fraction volumique des fissures ϕ^c et donc, d'après (2.3), de la traction Σ appliquée. Cependant, dans le cadre de notre modélisation, qui se limite à des évolutions réversibles sans propagation de la fissuration, la traction Σ est assujettie à vérifier la condition $\Sigma \leq K_{Ic}/\sqrt{\pi a}$. L'effet maximal de la traction sur D_v et D_h est donc atteint pour $\phi^c = \phi_{max}^c$, où ϕ_{max}^c est la porosité de fissures correspondant à l'ouverture maximale ou encore pour l'état de contrainte macroscopique défini par⁷ : $\Sigma = K_{Ic}/\sqrt{\pi a}$. Observant que la fraction volumique des fissures reste infinitésimale au cours du chargement, l'effet du chargement sur le coefficient de diffusion *vertical*, donné en (2.31), est négligeable. En introduisant (2.3) dans (2.31), on obtient par ailleurs :

$$D_h^{est} \approx D^\gamma T^u \phi^u \left(1 + \frac{A \frac{\Sigma}{E}}{1 + B \frac{\Sigma}{E}} \right) \quad \left\{ \begin{array}{l} A = C\tau \\ B = (1 - \nu^{u2})\tau \\ C = \frac{16}{3}\epsilon(1 - \nu^{u2}) \end{array} \right. \quad (2.32)$$

Le coefficient de diffusion *horizontal* maximal D_h^{est} ($\phi^c = \phi_{max}^c$) est une fonction croissante des rapports $\epsilon/\sqrt{a}$ et K_{Ic}/E . En outre, l'augmentation relative est la plus forte pour les faibles valeurs de la porosité ϕ^u et de la tortuosité T^u du matériau poreux non-fissuré.

Sur la figure 2.4(a), la valeur maximale du coefficient de diffusion horizontal D_h^{est} (atteinte pour $\phi^c = \phi_{max}^c$) est tracée en fonction du rayon de fissure a . Dans la perspective de simuler le comportement d'un béton fissuré, on a choisi les paramètres suivants : $K_{Ic}/E = 2.10^{-5}\sqrt{m}$, $\nu = 0.25$, $\epsilon = 0.1$, $\phi^u = 0.05$ et $T^u = 0.2$.

La figure 2.4(b) présente l'augmentation de D_h^{est} en fonction de la traction Σ appliquée sur un échantillon de béton dont les caractéristiques mécaniques et géométriques sont identiques à la situation précédente avec $a = 10\mu m$.

⁷résultat classique de la Mécanique de la Rupture dans le cas d'une fissure isolée dans un milieu infini

2.5 Transport advectif dans un milieu poreux fissuré

On s'intéresse désormais à l'influence de la fissuration sur le transport advectif dans un milieu poreux fissuré.

Les échelles micro., méso. et macroscopique sont identiques à celles définies au paragraphe précédent. Soit $\underline{G}$ le gradient de pression à l'échelle macroscopique. Il est relié, comme en (2.25), au champ de pression $p(\underline{x})$ à l'échelle mésoscopique par l'intermédiaire de conditions aux limites de type Hashin :

$$\forall \underline{x} \in \partial(d\Omega) : p(\underline{x}) = \underline{G} \cdot \underline{x} \quad (2.33)$$

En premier lieu, il s'agit de modéliser le flux advectif à l'échelle mésoscopique d'une part dans le matériau non-fissuré, et d'autre part dans les fissures, en vue de déterminer le flux moyen du fluide, pris sur le v.e.r. $d\Omega$, associé à $\underline{G}$.

Considérons tout d'abord le matériau non fissuré. Soit $\underline{V}^u$ le vecteur filtration, défini comme la moyenne prise sur $d^2\Omega$ de la vitesse du fluide (avec $\underline{v} = 0$ dans la phase solide). A l'échelle méso, le flux advectif dans le matériau non-fissuré peut être modélisé par la loi de Darcy :

$$\underline{V}^u = \langle \underline{v} \rangle_{d^2\Omega} = -\underline{\underline{k}}^u \cdot \underline{\text{grad}}_{\underline{x}} p \quad \text{avec} \quad |\underline{\underline{k}}^u| = O\left(\frac{\mathcal{I}^2}{\mu}\right) \quad (2.34)$$

μ est la viscosité du fluide et $\underline{\underline{k}}^u$ représente le tenseur des perméabilités du matériau "sain". En utilisant une technique d'homogénéisation périodique, Ene and Sanchez-Palencia [53] ont montré que la loi de Darcy peut être retrouvée à partir des équations de Stokes écrites dans $d^2\Omega$ pour décrire le flux de fluide à l'échelle microscopique. Cette démarche permet théoriquement de déterminer le tenseur de perméabilité du milieu sain $\underline{\underline{k}}^u$ en fonction de la géométrie de l'espace poreux. Dans la suite, on suppose l'isotropie du tenseur de perméabilité $\underline{\underline{k}}^u = k^u \underline{\underline{\delta}}$.

Toujours à l'échelle mésoscopique, la modélisation dans les fissures est totalement différente. L'hypothèse sur la séparation des échelles $a \gg c \gg \mathcal{I}$ permet de considérer le fluide saturant les fissures comme un milieu continu. Par conséquent, à l'échelle mésoscopique, le flux dans les fissures est *a priori* décrit par les équations de Stokes. C'est là que réside la principale différence avec la modélisation du processus diffusif, puisque pour ce dernier, le flux massique $\underline{J}'$ était relié de la même façon au gradient de masse volumique dans le milieu sain et dans les fissures. Pour nous ramener à un cadre mathématique plus favorable pour la mise en œuvre d'une démarche d'homogénéisation, nous allons définir

une perméabilité équivalente pour les fissures afin de représenter le flux moyen dans les fissures par une loi de Darcy.

On se réfère une nouvelle fois aux travaux de Ene et Sanchez-Palencia [53] qui ont

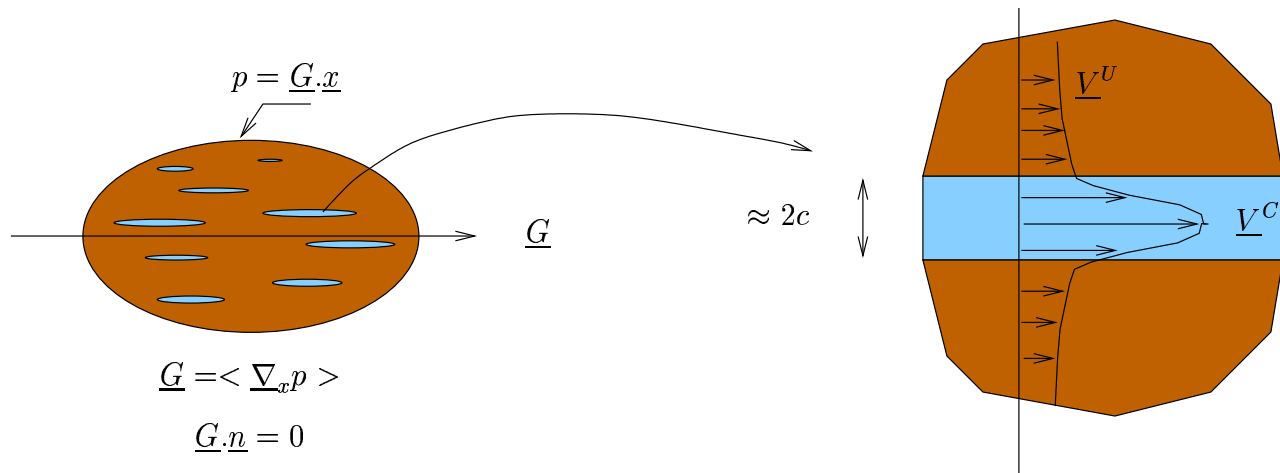


FIG. 2.5: flux advectif à l'échelle mésoscopique

établi des résultats généraux au sujet du flux à l'interface entre un milieu fluide continu et un milieu poreux dans la situation où l'on applique un gradient de pression macroscopique parallèle à cette même interface. Dans notre problème, les faces inférieure et supérieure d'une fissure (de normale $\underline{e}_3$) jouent ce rôle d'interfaces entre le fluide saturant les fissures et le matériau non-fissuré (homogénéisé). Pourvu que le gradient de pression macroscopique $\underline{G}$ vérifie la condition $\underline{G}.\underline{e}_3 = 0$, nous disposons des résultats suivants :

1. la pression de pores est continue à l'interface entre les fissures et le milieu sain. L'amplitude α du gradient de la pression de pores $\underline{\text{grad}}_x p$ est identique dans chacune des deux "phases".
2. Soit V^u , l'amplitude du vecteur filtration dans le milieu non-fissuré. L'amplitude du vecteur vitesse du fluide dans les fissures est $V^c = \alpha c^2 / \mu$. Par conséquent, le rapport V^c / V^u est de l'ordre de $(c/\mathcal{L})^2$ (voir (2.34)).
3. Puisque les ordres de grandeur des vitesses vérifient la condition $V^c / V^u \gg 1$, les faces inférieure et supérieure des fissures ouvertes peuvent être supposées imperméables à l'écoulement dans le milieu non-fissuré.

Cette dernière remarque, renforcée par la condition $c/a \ll 1$, suggère une modélisation du champ de vitesses à l'intérieur des fissures analogue à celle d'un écoulement entre

deux plaques imperméables parallèles. En première approximation, la distance entre ces deux plans est identifiée à l'ouverture maximale $2c$ d'une fissure. La vitesse *horizontale* moyenne $\underline{V}^c$ dans une fissure est alors reliée au gradient de pression par une perméabilité équivalente k^c , obtenue à partir de la solution classique du problème de Poiseuille entre deux plaques parallèles :

$$\underline{V}^c = \langle \underline{v} \rangle_c = -k^c \underline{\text{grad}}_x p \quad \text{avec} \quad k^c = \frac{c^2}{3\mu} \quad (2.35)$$

En résumé, il est possible de modéliser le flux advectif à l'échelle mésoscopique par une loi de Darcy hétérogène dans laquelle on distingue deux valeurs différentes de la perméabilité selon la position dans le v.e.r. $d\Omega$:

$$\underline{V}(\underline{x}) = -k(\underline{x}) \underline{\text{grad}}_x p \quad \text{avec} \quad k(\underline{x}) = \begin{cases} k^u & (\text{milieu sain}) \\ k^c & (\text{fissures}) \end{cases} \quad (2.36)$$

Il s'agit à présent d'homogénéiser (2.36) à l'échelle macroscopique. A cette échelle, la perméabilité horizontale macroscopique k_h^{hom} est définie de la même façon que $\underline{\underline{D}}^{hom}$ en (2.12) :

$$\langle \underline{V} \rangle_{d\Omega} = -k_h^{hom} \langle \underline{\text{grad}}_x p \rangle_{d\Omega} \quad (\underline{G} = \langle \underline{\text{grad}}_x p \rangle_{d\Omega}) \quad (2.37)$$

Manifestement, à l'échelle mésoscopique, le vecteur filtration $\underline{V}(\underline{x})$ et le flux diffusif massique $\underline{J}^\gamma(\underline{x})$ dans le v.e.r. sont solutions du même problème mathématique. $\underline{V}$, p , k^u et k^c dans (2.36) remplacent respectivement $\underline{J}^\gamma$, c^γ , $\underline{\underline{D}}^u$ et $\underline{\underline{D}}^c$ dans (2.11). La loi de conservation de la masse fluide $\text{div}_x \underline{V} = 0$ remplace $\text{div}_x \underline{J}^\gamma = 0$.

Il existe toutefois une différence importante entre ces deux problèmes. En effet, contrairement au problème diffusif pour lequel on a $\underline{\underline{D}}^c = D^\gamma \underline{\underline{\delta}}$, la modélisation du transport advectif par changement d'échelle d'espace fait intervenir une perméabilité équivalente des fissures qui dépend directement de l'ouverture des fissures et donc du chargement mécanique imposé à l'infini.

En transposant (2.31), il est possible d'obtenir une estimation de la composante horizontale de la perméabilité macroscopique k_h^{hom} :

$$k_h^{est} \approx k^u \left(1 + \frac{\phi^c \tau'}{1 + \frac{3\tau'}{16\epsilon} \phi^c} \right) \quad \text{with} \quad \tau' = \frac{k^c}{k^u} - 1 \quad (2.38)$$

Contrairement au coefficient τ dans (2.31), le coefficient τ' dans (2.38) dépend de l'ouverture de fissure (maximale) $2c$. L'expression générale de k_h^{est} en fonction de Σ , quoique

analytique, s'exprime en général de façon un peu compliquée en fonction de Σ . Cependant, il est possible d'aboutir à une expression très simplifiée si l'on se place dans la situation d'ouverture maximale des fissures. En effet, si l'on vérifie la condition $\tau' \phi^c / \epsilon \gg 1$, (2.38) peut se mettre sous la forme :

$$k_h^{est} \approx k^u \left(1 + \frac{16}{3} \epsilon \right) \quad (2.39)$$

D'après (2.39), l'influence du chargement mécanique sur la détermination de la perméabilité globale du matériau fissuré est uniquement contrôlée par le paramètre de densité de fissures ϵ . A partir de la définition de ϕ_c , donnée en (2.3), la condition $\tau' \phi_c / \epsilon \gg 1$, nécessaire pour garantir la validité de (2.39), peut s'écrire de la manière suivante :

$$\left(\frac{\tau' \phi^c}{\epsilon} \right) = O \left(\frac{k^c}{k^u} \right) \left(\frac{c}{a} \right) = O \left(\frac{c}{\mathcal{I}} \right)^2 \left(\frac{c}{a} \right) \gg 1 \quad (2.40)$$

En tenant compte de (2.2), on obtient de façon équivalente :

$$\left(\frac{\tau' \phi^c}{\epsilon} \right) = O \left(\left(\frac{\Sigma}{E} \right)^3 \left(\frac{a}{\mathcal{I}} \right)^2 \right) \gg 1 \quad (2.41)$$

Par conséquent, (2.39) constitue une bonne estimation de k_h^{hom} si l'on s'intéresse aux fissures de grande taille⁸ et dans les cas de traction élevée⁹. Les résultats numériques confirment ce résultat. Ils sont obtenus à partir des mêmes paramètres qu'à la section 2.4.4 auxquels vient s'ajouter la perméabilité d'un béton de valeur $k^u = 10^{-7} \text{Pa}^{-1} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$.

2.6 Conclusions

Le présent hapitre s'est attaché à quantifier l'influence de l'ouverture de fissures, induite par un chargement macroscopique en traction, sur les processus diffusif et advectif dans un milieu poreux fissuré. On a ainsi obtenu des estimations pour les tenseurs de diffusion et de perméabilité en fonction de la contrainte macroscopique de traction et de la porosité de fissures induite par l'ouverture de celles-ci.

Pour cela, on a supposé une géométrie ellipsoïdale des fissures ouvertes à partir de laquelle on a pu exploiter les résultats classiques d'Eshelby déjà largement utilisés dans les chapitres précédents. Une fissure est alors perçue comme une inhomogénéité plongée

⁸ces fissures sont astreintes à vérifier la séparation des échelles mésoscopique et macroscopique

⁹n'entraînant pas de propagation de fissures

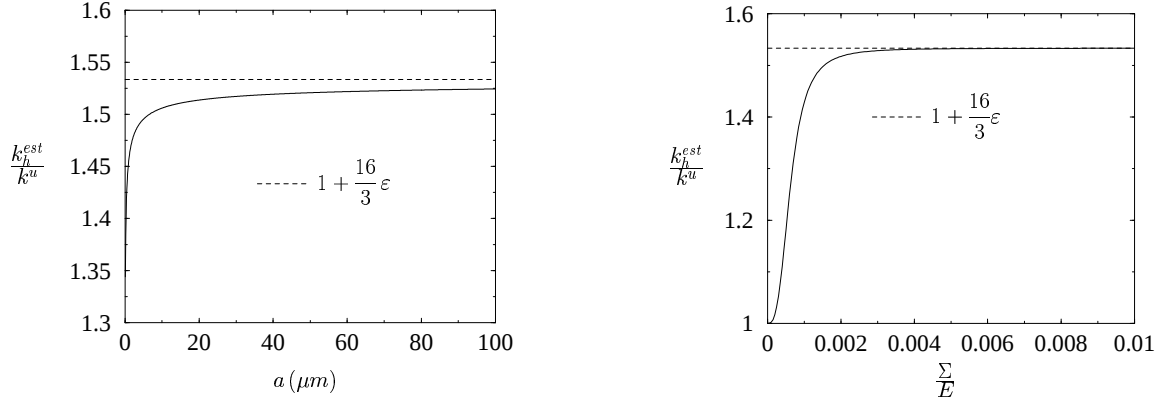
(a) Perm. horiz. k_h^{est} ($\phi^c = \phi_{max}^c$)(b) Influence du chargement ($a = 10 \mu m$)

FIG. 2.6: simulation numérique du processus advectif

dans une matrice homogène, représentant le milieu poreux non fissuré du point de vue des transports diffusif et advectif.

Pour une valeur donnée du paramètre de densité de fissures $\epsilon = Na^3$, l'augmentation relative du coefficient de diffusion macroscopique maximal (dans la direction parallèle aux fissures) est une fonction décroissante du rayon de fissure, tout comme de la tortuosité et de la porosité du milieu sain.

Pour les grandes ouvertures de fissure (voir (2.41)), la perméabilité macroscopique (dans la direction parallèle aux fissures) est contrôlée par ϵ . Il est important de noter qu'elle est alors pratiquement indépendante de l'état de contrainte et du rayon de fissure.

A l'inverse de l'ouverture, on pourrait reprendre les idées exposées dans ce chapitre pour l'étude des effets du serrage dans une roche, c'est-à-dire la fermeture des fissures sous l'action d'une contrainte de compression. Le phénomène est susceptible de se produire, par exemple, au cours de la dépletion d'un réservoir pétrolier. La figure 2.6(b) indique qu'il peut être judicieux de tenir compte des effets du serrage sur la perméabilité en utilisant une loi non linéaire de perméabilité dépendant du niveau de contraintes effectives.

Chapitre 3

Diffusion de vapeur d'eau dans un milieu poreux en présence d'advection

Sommaire

3.1	Introduction	89
3.2	Modélisation à l'échelle microscopique	90
3.2.1	définitions générales	90
3.2.2	le mélange air-vapeur	91
3.3	Modélisation à l'échelle macroscopique	93
3.3.1	le mouvement d'ensemble	93
3.3.2	le mouvement relatif de la vapeur d'eau	96
3.3.3	modélisation macroscopique du flux diffusif	100
3.3.4	modélisation macroscopique du flux dispersif mécanique	101
3.3.5	modélisation macroscopique du flux dispersif total	102
3.4	Conclusions	103

En marge de la problématique de fond du présent mémoire, les techniques d’homogénéisation peuvent être appliquées avec succès aux équations contrôlant les transferts hydriques isothermes dans les milieux poreux comportant une phase gazeuse. La question soulevée ici renvoie par exemple à la problématique de l’écriture des lois de transport gouvernant le séchage d’un géomatériau (le béton, par exemple) dont l’espace poreux comporte une phase liquide (l’eau) et un mélange gazeux, constitué d’air et de vapeur d’eau.

L’objectif, *in fine*, n’est pas de proposer une estimation des propriétés de transport mais, en amont, de fournir la structure pertinente des équations de transport à l’échelle macroscopique. Contrairement à ce qui a été fait au Chapitre 1 où le flux dispersif avait pu être négligé à cause de l’hypothèse d’advection modérée, on va s’intéresser à présent à des régimes d’advection plus élevés, pour lesquels cette simplification ne peut être retenue.

On s’appuiera, pour cela, sur la technique d’homogénéisation des milieux périodiques, basée sur la méthode des développements asymptotiques à variables séparées [4]. Cette méthode offre, en effet, un cadre théorique systématique capable de gérer la structure des équations décrivant le transport à l’échelle du pore. L’analyse présentée ici se présente comme une extension au cas des fluides compressibles de la méthodologie développée par ces auteurs dans le cas des fluides incompressibles [6]. Il est à noter que le cas des fluides compressibles a été abordé dans le cadre de la modélisation du transport advectif [12].

3.1 Introduction

On se place dans la situation d’un milieu poreux saturé par un mélange gazeux. L’extension au cas d’un espace poreux comportant également une phase liquide est immédiate si l’on admet que, du point de vue hydraulique, le liquide se comporte vis-à-vis du mélange gazeux comme la phase solide.

Plumb et Whitaker ([104], [105]) ont proposé la structure macroscopique d’une équation de convection-diffusion définissant localement le transport d’un fluide incompressible, en l’absence de phénomènes d’adsorption à l’interface solide/fluide et de réactions chimiques. En fait, dans ces conditions, de nombreux auteurs ([117], [115]) ont proposé de définir la dispersion macroscopique comme la superposition des effets purement diffusifs et d’un terme dispersif (dispersion mécanique) dont l’origine se situe à la petite échelle (cf. section 1.2.3).

Dans le cadre d’une approche macroscopique, il est classique d’écrire la loi de dispersion sous la forme d’une *loi de Fick* dans laquelle on définit un tenseur de “diffusion” intégrant la diffusion moléculaire et la dispersion mécanique. Elle relie le flux dispersif macroscopique $\underline{J}$ au gradient de concentration de l’espèce considérée ([102], [37]) :

$$\underline{J} = -\underline{D} \cdot \underline{\text{grad}} c \quad ; \quad \underline{D} = \begin{vmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_T & 0 \\ 0 & 0 & D_T \end{vmatrix} \quad \text{avec :} \quad \begin{cases} D_L = \varphi (D + \alpha_L |\underline{V}|) \\ D_T = \varphi (D + \alpha_T |\underline{V}|) \end{cases} \quad (3.1)$$

$\underline{D}$ est le tenseur des coefficients de dispersion¹, D le coefficient de diffusion moléculaire, φ la porosité connectée du milieu poreux siège de la dispersion, $|\underline{V}|$ la norme de la vitesse moyenne microscopique d'écoulement et α_L (resp. α_T), appelé *coefficient de dispersion intrinsèque longitudinale (resp. transversale)*, a la dimension d'une longueur.

Dans le cadre de notre étude, la forte compressibilité des gaz ne permet pas de retenir cette expression pour la formulation du transport dispersif à l'échelle macroscopique. La modélisation proposée gère la compressibilité du mélange gazeux dont on verra que la répercussion à l'échelle macroscopique consiste en l'introduction d'un terme supplémentaire dans l'expression de la dispersion mécanique macroscopique.

3.2 Modélisation à l'échelle microscopique

3.2.1 définitions générales

Soit μ_i , le potentiel chimique molaire du constituant i dans un mélange gazeux. Le volume molaire partiel $\bar{V}_i$ du constituant i est défini comme suit :

$$\bar{V}_i = \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial p_g} \right)_{T, n_j} \quad (3.2)$$

où T est la température et n_j , le nombre de moles de constituant j dans le mélange. Dans le cas d'un mélange idéal de gaz parfaits, le potentiel chimique du constituant i dépend uniquement de la température et de sa pression partielle p_i et vérifie en particulier :

$$\left(\frac{\partial \mu_i}{\partial p_i} \right)_{T, n_j} = \frac{1}{c_i} \quad (3.3)$$

où c_i désigne la concentration molaire du constituant i du mélange.

On rappelle que, dans le cas d'un mélange idéal de gaz parfaits, on a $p_i = (n_i/n_g)p_g$ si bien que le volume molaire partiel s'identifie au volume molaire $\bar{V}$ du mélange :

$$\bar{V}_i = \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial p_i} \right)_{T, n_j} \left(\frac{\partial p_i}{\partial p_g} \right)_{T, n_j} = \frac{1}{c_i} \frac{n_i}{n_g} = \frac{1}{c_g} (= \bar{V}) \quad (3.4)$$

¹ D_L est le coefficient de dispersion longitudinale (dans le sens de l'écoulement) et D_T , le coefficient de dispersion transversale (dans les deux directions orthogonales à l'écoulement)

On note $\underline{V}_i$ la vitesse des constituants de la phase gazeuse. On introduit également la vitesse d'ensemble de la phase gazeuse, notée $\underline{V}_g$, pour laquelle on adopte la définition suivante ([35], [107], [88]) :

$$\underline{V}_g = \sum_{i=1}^n c_i \bar{V}_i \underline{V}_i \quad (3.5)$$

Finalement, la vitesse d'ensemble apparait comme la moyenne des vitesses pondérées par les fractions molaires $\theta_i = \frac{c_i}{c_g}$:

$$\underline{V}_g = \sum_{i=1}^n \theta_i \underline{V}_i \quad (3.6)$$

Le flux diffusif du constituant i par rapport au mélange gazeux est défini comme en 1.2.3 de la façon suivante :

$$\underline{j}_i = c_i (\underline{V}_i - \underline{V}_g) \quad (3.7)$$

Dans le cas d'une vitesse de référence molaire moyenne en conditions isothermes, la loi de Fick peut se mettre sous la forme ([35], [107]) :

$$\underline{j}_i = -D_i c_g \underline{\text{grad}}_z \theta_i \quad (3.8)$$

où D_i est le coefficient de diffusion de la composante i dans un milieu infini. Le moteur de la diffusion dans un mélange gazeux à l'échelle microscopique est donc le gradient de fraction molaire.

3.2.2 le mélange air-vapeur

On s'intéresse à présent à la diffusion de la vapeur d'eau dans un mélange gazeux composé d'air et de vapeur d'eau. Pour simplifier, on suppose que la phase solide est rigide et on se place dans le cadre du régime permanent. On note $\underline{V}_a$ (resp. $\underline{V}_v$) la vitesse de l'air (resp. de la vapeur d'eau).

Dans ce cas, (3.7) et (3.8) s'écrivent (avec $i = v$) :

$$\underline{j}_v = c_v (\underline{V}_v - \underline{V}_g) = -D c_g \underline{\text{grad}}_z \theta_v \quad \text{avec} \quad \theta_v = \frac{c_v}{c_g} \quad (3.9)$$

où $\underline{V}_g = \theta_v \underline{V}_v + \theta_a \underline{V}_a$ d'après (3.6), et $D = D_v$.

La conservation de la masse de vapeur d'eau dans le mélange gazeux s'écrit, sous l'hypothèse du régime permanent :

$$\operatorname{div}_z c_v \underline{V}_v = \operatorname{div}_z (c_v (\underline{V}_v - \underline{V}_g)) + \operatorname{div}_z (c_v \underline{V}_g) = 0 \quad (3.10)$$

En combinant (3.9) et (3.10), l'équation gouvernant le transport advectif et diffusif de la vapeur d'eau dans le mélange gazeux prend la forme suivante :

$$-D \operatorname{div}_z (c_g \underline{\operatorname{grad}}_z \theta_v) + \operatorname{div}_z (c_v \underline{V}_g) = 0 \quad (3.11)$$

Comme en 1.3.1, on néglige un éventuel phénomène d'adsorption, c'est-à-dire que le flux de masse à travers la phase solide est nul pour tous les constituants de la phase gazeuse. En particulier, le flux diffusif de la vapeur d'eau doit vérifier la condition suivante à l'interface gaz-solide :

$$\underline{j}_v \cdot \underline{n} = 0 \Rightarrow \underline{\operatorname{grad}}_z \theta_v \cdot \underline{n} = 0 \quad (I^{fs}) \quad (3.12)$$

où $\underline{n}$ est le vecteur normal à la phase solide.

Sur le plan des équations régissant le mouvement d'ensemble, pourvu que l'on adopte la définition de la vitesse du mélange établie en (3.6), l'écriture de la conservation de la masse des constituants dans le cadre d'un régime permanent aboutit à la conservation de la masse du mélange sous la forme :

$$\operatorname{div}_z c_g \underline{V}_g = 0 \quad (3.13)$$

On vérifie en effet $c_g \underline{V}_g = c_a \underline{V}_a + c_v \underline{V}_v$ et $\operatorname{div}_z (c_i \underline{V}_i) = 0$ pour $i = a, v$.

Par ailleurs, on suppose que le transport advectif isotherme du mélange gazeux est régi par l'équation de Stokes :

$$\underline{\operatorname{grad}}_z p_g = \mu \Delta_z \underline{V}_g + (\lambda + \mu) \underline{\operatorname{grad}}_z (\operatorname{div}_z \underline{V}_g) \quad (3.14)$$

Finalement, la condition d'adhérence à l'interface I^{fs} entre le solide et le mélange gazeux et l'hypothèse de phase solide rigide conduisent à :

$$\underline{u} = \underline{V}_g = \underline{0} \quad (I^{fs}) \quad (3.15)$$

3.3 Modélisation à l'échelle macroscopique

3.3.1 le mouvement d'ensemble

Classiquement, la modélisation macroscopique du mouvement d'ensemble de la phase gazeuse est donnée par la loi de conduction hydraulique de Darcy. D'un point de vue micro-mécanique, nous avons déjà eu l'occasion de rappeler que la loi de Darcy peut être obtenue en développant la technique d'homogénéisation des milieux périodiques ([53], [3]). Cette méthode, basée sur les développements asymptotiques à deux variables d'espace permet de déterminer le tenseur macroscopique de perméabilité en fonction de la géométrie de la microstructure. Nous détaillons le raisonnement ci-après en tenant compte de la compressibilité du fluide.

Pour fixer les idées, on considère une cellule élémentaire $\mathcal{C}$ de forme parallélépipédique, dont les faces sont parallèles aux vecteurs unitaires $\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3$ d'un repère cartésien orthonormé. $\mathcal{C}$ occupe le domaine $0 \leq z_i \leq a_i$, $\mathcal{C}^\alpha$ représente la phase α dans $\mathcal{C}$. Les longueurs caractéristiques a_i de la cellule de base sont typiquement du même ordre de grandeur que la taille caractéristique d des pores. On note L , la taille caractéristique de l'échelle macroscopique. Le rapport $\delta = d/L$ mesure la séparation des échelles d'espace. La méthode d'homogénéisation repose sur l'hypothèse que $\delta \ll 1$.

La première étape consiste à séparer la variable d'espace $\underline{z}$ en deux variables adimensionnées, $\underline{\zeta} = \underline{z}/L$ et $\underline{Z} = \underline{z}/d$. Toutes les quantités physiques e du problème sont supposées $\mathcal{C}$ -périodiques par rapport à $\underline{Z}$, c'est-à-dire :

$$e(\underline{\zeta}, \underline{Z}) = e(\underline{\zeta}, \underline{Z} + n_1 \frac{a_1}{d} \underline{e}_1 + n_2 \frac{a_2}{d} \underline{e}_2 + n_3 \frac{a_3}{d} \underline{e}_3) \quad (3.16)$$

où n_1, n_2, n_3 sont des entiers arbitraires.

$\underline{\zeta}$ et $\underline{Z}$ rendent compte respectivement des variations à l'échelle macroscopique et des fluctuations locales à l'échelle de la cellule. La variable macroscopique usuelle $\underline{x}$ s'identifie ainsi à $L \underline{\zeta}$. Les opérateurs $\underline{grad}_z$ et $\underline{div}_z$ s'écrivent à présent :

$$\begin{cases} \underline{grad}_z e &= \frac{1}{L} (\underline{grad}_\zeta e + \frac{1}{\delta} \underline{grad}_Z e) \\ \underline{div}_z \underline{a} &= \frac{1}{L} (\underline{div}_\zeta \underline{a} + \frac{1}{\delta} \underline{div}_Z \underline{a}) \end{cases} \quad (3.17)$$

On cherche à présent la forme adimensionnelle de (3.13) et (3.14). En vertu de l'équilibre mécanique du système, les contraintes visqueuses doivent équilibrer le gradient de pression totale responsable du mouvement d'advection. Soit P , l'ordre de grandeur de la pression

et $\frac{P}{L}$ celui de son gradient². L'ordre de grandeur de la vitesse d'advection est fixé par le fait que le gradient des contraintes visqueuses correspondantes doit être de l'ordre du gradient de pression totale. Ce raisonnement conduit à poser³ :

$$p_g = P p_g^* \quad ; \quad \underline{V}_g = \frac{P d^2}{\mu L} \underline{V}_g^* \quad (3.18)$$

Compte tenu de (3.17) et (3.18), (3.13) et (3.14) s'écrivent :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\delta} \underline{\text{grad}}_{\underline{Z}} p_g^* + \underline{\text{grad}}_{\underline{\zeta}} p_g^* &= \sum_i \left(\frac{\partial^2 \underline{V}_g^*}{\partial \underline{Z}_i^2} + 2 \delta \frac{\partial^2 \underline{V}_g^*}{\partial \underline{\zeta}_i \partial \underline{Z}_i} + \delta^2 \frac{\partial^2 \underline{V}_g^*}{\partial \underline{\zeta}_i^2} \right) \\ &+ \left[\frac{\lambda + \mu}{\mu} \right] \sum_i \left(\left(\delta \frac{\partial}{\partial \underline{\zeta}_i} + \frac{\partial}{\partial \underline{Z}_i} \right) \sum_j \left(\delta \frac{\partial V_{g,j}^*}{\partial \underline{\zeta}_j} + \frac{\partial V_{g,j}^*}{\partial \underline{Z}_j} \right) \right) \underline{e}_i \end{aligned} \quad (3.19)$$

et :

$$\frac{1}{\delta} \text{div}_{\underline{Z}} (c_g \underline{V}_g^*) + \text{div}_{\underline{\zeta}} (c_g \underline{V}_g^*) = 0 \quad (3.20)$$

La seconde étape consiste à écrire toute quantité physique e sous la forme d'un développement selon les puissances croissantes du petit paramètre, dans lequel les $e^{(i)}$ sont *a priori* tous du même ordre de grandeur :

$$e(\underline{\zeta}, \underline{Z}) = e^{(0)}(\underline{\zeta}, \underline{Z}) + \delta e^{(1)}(\underline{\zeta}, \underline{Z}) + \delta^2 e^{(2)}(\underline{\zeta}, \underline{Z}) + \dots \quad (3.21)$$

et à introduire dans (3.19) et (3.20) le développement (3.21) des variables p_g^* et $\underline{V}_g^*$.

A l'ordre δ^{-1} dans (3.19), on trouve :

$$\underline{\text{grad}}_{\underline{Z}} p_g^{*(0)} = \underline{0} \quad (3.22)$$

Cela signifie que $p_g^{*(0)}$ dépend uniquement de la variable macroscopique $\underline{\zeta}$ et qu'il n'y a pas de fluctuation à l'ordre 0 à l'intérieur de la cellule de base. Ce résultat est cohérent avec l'hypothèse formulée sur l'ordre de grandeur du gradient de pression.

En vertu de la linéarité de la relation $p_g = kT c_g$ entre pression totale et concentration

²on suppose ici que les gradients de pression microscopique et macroscopique sont du même ordre de grandeur, à l'image de la solution classique de l'écoulement de Poiseuille.

³les grandeurs avec astérisques sont adimensionnelles

molaire du mélange gazeux, la même propriété est obtenue pour $c_g^{(0)}$:

$$p_g^{*(0)} = kT c_g^{*(0)} \rightarrow c_g^{*(0)} = c_g^{*(0)}(\underline{\zeta}) \quad (3.23)$$

L'ordre δ^0 dans (3.19) conduit à :

$$\underline{\text{grad}}_Z p_g^{*(1)} + \underline{\text{grad}}_{\underline{\zeta}} p_g^{*(0)} = \Delta_Z V_g^{*(0)} \quad (3.24)$$

complété par l'ordre δ^{-1} dans (3.20), en tenant compte de (3.23) :

$$\text{div}_Z V_g^{*(0)} = 0 \quad (3.25)$$

et par l'ordre δ^0 dans (3.15) :

$$(I^{fs}) \quad \underline{V}_g^{*(0)} = \underline{0} \quad (3.26)$$

Malgré la compressibilité du mélange gazeux, l'équation (3.25) indique que la structure de l'écoulement à l'ordre δ^0 est celle d'un fluide incompressible. La démarche est alors classique ([4], [6]). Elle consiste à chercher une solution Z-périodique $(p_g^{*(1)}, \underline{V}_g^{*(0)})$ du système d'équations (3.24)-(3.25)-(3.26). Soit $\underline{w}(\underline{Z})$, un champ de vecteur Z-périodique défini sur $\mathcal{C}^f$ et vérifiant $\text{div}_Z \underline{w} = 0$ et $\underline{w} = \underline{0}$ sur I^{fs} . La formulation variationnelle de (3.24)-(3.25)-(3.26) s'écrit :

$$(\forall \underline{w}) \quad - \int_{\mathcal{C}^f} \frac{\partial w_i}{\partial Z_j} \frac{\partial V_{g_i}^{*(0)}}{\partial Z_j} dV_Z = \int_{\mathcal{C}^f} \underline{w} \cdot \underline{\text{grad}}_{\underline{\zeta}} p_g^{*(0)} dV_Z \quad (3.27)$$

La solution $\underline{V}_g^{*(0)}$ de (3.27) est unique ; c'est une fonction linéaire de $\underline{\text{grad}}_{\underline{\zeta}} p_g^{*(0)}$, qui peut être interprétée, au facteur L près, comme le gradient de pression macroscopique. Soit $-k_{ij}^*(\underline{Z}) \underline{e}_i$, la solution particulière de (3.27) pour $\underline{\text{grad}}_{\underline{\zeta}} p_g^{*(0)} = \underline{e}_j$, il est possible de mettre $\underline{V}_g^{*(0)}$ sous la forme :

$$V_{g_i}^{*(0)} = -k_{ij}^*(\underline{Z}) \frac{\partial p_g^{*(0)}}{\partial \zeta_j} \Leftrightarrow \underline{V}_g^{*(0)} = -\underline{k}^*(\underline{Z}) \cdot \underline{\text{grad}}_{\underline{\zeta}} p_g^{*(0)} \quad (3.28)$$

La loi de conduction hydraulique de Darcy est alors obtenue en effectuant une prise de

moyenne⁴ de (3.28) par rapport à la variable $\underline{Z}$ sur le domaine $\mathcal{C}^f$, la variable $\underline{\zeta}$ étant une constante. En revenant aux grandeurs adimensionnées, il vient :

$$\overline{V_g^{(0)}}^f = -\underline{\underline{K}} \cdot \underline{\text{grad}}_x p_g^{(0)} \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{K}} = \frac{d^2}{\mu} \underline{\underline{k}}^{*f} \quad (3.29)$$

La technique d'homogénéisation des milieux périodiques constitue donc un support théorique à l'écriture de la loi de Darcy. En outre, cette méthode permet de déterminer le tenseur de perméabilité macroscopique $\underline{\underline{K}}$ à partir de la géométrie de la microstructure. Cela requiert la résolution du problème elliptique (3.27) dont le résultat est identique au cas incompressible.

On montre (voir annexe 4.7) qu'il est possible de relier linéairement la pression du mélange à l'ordre δ^1 au gradient de pression macroscopique par l'intermédiaire d'un champ de vecteur $\underline{\kappa}$, satisfaisant la condition de moyenne nulle sur la phase fluide :

$$p_g^{(1)} - \overline{p_g^{(1)}}^f = \underline{\kappa} \cdot \underline{\text{grad}}_{\underline{\zeta}} p_g^{(0)} \quad \text{avec} \quad \overline{\underline{\kappa}}^f = \underline{0} \quad (3.30)$$

3.3.2 le mouvement relatif de la vapeur d'eau

Vis-à-vis du mouvement d'ensemble, le flux de vapeur est caractérisé par un mouvement relatif. A l'échelle macroscopique, nous avons vu au Chapitre 1 que l'on rend compte de ce dernier au moyen des concepts de flux diffusif et dispersif [14]. L'intensité de ces derniers dépend de l'ordre de grandeur de la vitesse d'ensemble $\underline{V}_g$. Posant $V_o = D/L$, il est possible de montrer, comme dans [6], (1) que le phénomène de dispersion est négligeable lorsque $\underline{V}_g$ est au plus de l'ordre de⁵ V_o , et (2) que le problème est non-homogénéisable lorsque $\underline{V}_g$ atteint V_o/δ^2 . Nous nous intéressons ici à la situation intermédiaire où $\underline{V}_g$ est de l'ordre de V_o/δ , pour laquelle on souhaite préciser l'effet de l'advection sur l'intensité des flux diffusif et dispersif. Conformément à (3.18), l'ordre de grandeur du gradient de pression macroscopique correspondant est $\frac{P}{L} = O(\mu \frac{D}{d^3})$.

La forme adimensionnelle de (3.11), (3.12) et (3.13) est la suivante :

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\delta^2} \text{div}_Z (c_g \underline{\text{grad}}_Z \theta_v) - \frac{1}{\delta} \left(\text{div}_{\underline{\zeta}} (c_g \underline{\text{grad}}_Z \theta_v) + \text{div}_Z (c_g \underline{\text{grad}}_{\underline{\zeta}} \theta_v) \right) \\ & - \text{div}_{\underline{\zeta}} (c_g \underline{\text{grad}}_{\underline{\zeta}} \theta_v) + \left(\frac{1}{\delta} \text{div}_{\underline{\zeta}} (c_v \underline{V}_g^*) + \frac{1}{\delta^2} \text{div}_Z (c_v \underline{V}_g^*) \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.31)$$

⁴ $\overline{a}^f = \frac{1}{\mathcal{C}^f} \int_{\mathcal{C}^f} a d\Omega$ désigne la moyenne intrinsèque. Elle est reliée à la moyenne apparente $\langle . \rangle_f$ par

la relation $\langle a \rangle_f = \varphi \overline{a}^f$ où $\varphi = \frac{\mathcal{C}^f}{\mathcal{C}}$ définit la porosité associée au domaine $\mathcal{C}$

⁵ $\mathcal{C}^f$ est le domaine de l'advection modérée qui a été étudié au Chapitre 1

$$\left(\underline{\text{grad}}_{\underline{\zeta}} \theta_v + \frac{1}{\delta} \underline{\text{grad}}_Z \theta_v \right) \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{sur } I^{fs} \quad (3.32)$$

$$\text{div}_{\underline{\zeta}} (c_g \underline{V}_g^*) + \frac{1}{\delta} \text{div}_Z (c_g \underline{V}_g^*) = 0 \quad (3.33)$$

Il reste à écrire $\underline{V}_g^*$ et θ_v sous la forme de développements du type (3.21) et à regrouper les termes de même ordre de grandeur.

Par ailleurs, il est profitable de décomposer la fraction molaire de la vapeur d'eau en un terme de moyenne sur le domaine fluide et un terme de fluctuation. L'opération de moyenne est effectuée à l'aide d'une intégration par rapport à la variable "rapide" $\underline{Z}$, à $\underline{\zeta}$ fixé, de sorte que la moyenne ne dépend que de la variable macroscopique, dite "variable lente", $\underline{\zeta}$:

$$\theta_v (\underline{Z}, \underline{\zeta}) = \overline{\theta_v}^f (\underline{\zeta}) + \tilde{\theta}_v (\underline{Z}, \underline{\zeta}) \quad \text{avec} \quad \overline{\tilde{\theta}_v}^f = 0 \quad (3.34)$$

règles de localisation de la concentration molaire de vapeur

• L'ordre δ^{-2} dans (3.31) et l'ordre δ^{-1} dans (3.32) conduisent au système différentiel suivant :

$$\begin{cases} -c_g^{(0)} \Delta_Z \tilde{\theta}_v^{(0)} - \underline{\text{grad}}_Z c_g^{(0)} \cdot \underline{\text{grad}}_Z \tilde{\theta}_v^{(0)} + \text{div}_Z (c_v^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)}) = 0 \\ \underline{\text{grad}}_Z \tilde{\theta}_v^{(0)} \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{sur } I^{fs} \end{cases} \quad (3.35)$$

D'après (3.23), on a $\underline{\text{grad}}_Z c_g^{(0)} = \underline{0}$. En utilisant la relation $c_v^{(0)} = \theta_v^{(0)} c_g^{(0)}$ (voir annexe 4.5), (3.35) se simplifie comme suit :

$$\begin{cases} -c_g^{(0)} \Delta_Z \tilde{\theta}_v^{(0)} + c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)} \cdot \underline{\text{grad}}_Z \tilde{\theta}_v^{(0)} + \theta_v^{(0)} \text{div}_Z (c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)}) = 0 \\ \underline{\text{grad}}_Z \tilde{\theta}_v^{(0)} \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{sur } I^{fs} \end{cases} \quad (3.36)$$

Par ailleurs, l'équation (3.33), prise à l'ordre δ^{-1} , nous donne le résultat suivant :

$$\text{div}_Z (c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)}) = 0 \quad (3.37)$$

si bien que l'on aboutit à la résolution du système différentiel :

$$\begin{cases} -\Delta_Z \tilde{\theta}_v^{(0)} + \underline{V}_g^{*(0)} \cdot \underline{\text{grad}}_Z \tilde{\theta}_v^{(0)} = 0 \\ \underline{\text{grad}}_Z \tilde{\theta}_v^{(0)} \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{sur } I^{fs} \end{cases} \quad (3.38)$$

La solution de ce système différentiel est une constante et la condition de moyenne nulle sur la phase fluide $\overline{\tilde{\theta}_v^{(0)}}^f = 0$ impose une valeur nulle à cette constante :

$$\tilde{\theta}_v^{(0)} = 0 \quad (3.39)$$

En d'autres termes, $\theta_v^{(0)}$ dépend uniquement de la variable macroscopique $\underline{\zeta}$, les fluctuations étant d'un ordre de grandeur inférieur.

En utilisant ce résultat et (3.23), l'égalité $c_v^{(0)} = \theta_v^{(0)} c_g^{(0)}$ entraîne :

$$\left. \begin{aligned} \theta_v^{(0)} &= \theta_v^{(0)}(\underline{\zeta}) \\ c_g^{(0)} &= c_g^{(0)}(\underline{\zeta}) \end{aligned} \right\} \Rightarrow c_v^{(0)} = c_v^{(0)}(\underline{\zeta}) \quad (3.40)$$

• En utilisant (3.23) et les résultats établis aux ordres précédents, l'ordre δ^{-1} dans (3.31) et l'ordre δ^0 dans (3.32) donnent :

$$-c_g^{(0)} \Delta_Z \tilde{\theta}_v^{(1)} + \text{div}_\zeta (c_v^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)}) + \text{div}_Z (c_v^{(0)} \underline{V}_g^{*(1)} + c_v^{(1)} \underline{V}_g^{*(0)}) = 0 \quad (3.41)$$

et :

$$\left(\underline{\text{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} + \underline{\text{grad}}_Z \tilde{\theta}_v^{(1)} \right) \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{sur } I^{fs} \quad (3.42)$$

On montre (voir annexe 4.6) que ce système différentiel peut se mettre sous la forme :

$$\begin{cases} -\Delta_Z \tilde{\theta}_v^{(1)} + \underline{V}_g^{*(0)} \cdot \underline{\text{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} + \underline{V}_g^{*(0)} \cdot \underline{\text{grad}}_Z \tilde{\theta}_v^{(1)} = 0 \\ \left(\underline{\text{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} + \underline{\text{grad}}_Z \tilde{\theta}_v^{(1)} \right) \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{sur } I^{fs} \end{cases} \quad (3.43)$$

En prenant la moyenne sur la phase fluide de la première équation du système (3.43), on obtient une relation macroscopique d'orthogonalité entre le flux advectif et le gradient de concentration molaire de la vapeur :

$$\overline{\underline{V}_g^{*(0)}}^f \cdot \underline{\text{grad}}_x \theta_v^{(0)} = 0 \quad (3.44)$$

On tire alors la propriété suivante de (3.44) et de la moyenne de l'équation de la conservation de la masse du mélange gazeux à l'ordre δ^0 (voir annexe 4.8) :

$$\text{div}_x (c_v^{(0)} \overline{V_g^{*(0)}}^f) = 0 \quad (3.45)$$

Le système (3.43) permet par ailleurs de préciser la localisation de $\tilde{\theta}_v^{(1)}$. En effet, il est clair que $\tilde{\theta}_v^{(1)}$ dépend linéairement de $\underline{\text{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)}$. Il existe donc un champ $\underline{\chi}(Z)$, fonction de la morphologie du domaine occupé par la phase fluide et du champ de vitesse d'advection $\underline{V}_g^{*(0)}$, tel que :

$$\tilde{\theta}_v^{(1)} = \underline{\chi}(Z) \cdot \underline{\text{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} \quad (3.46)$$

En utilisant (3.44), on montre que le champ $\underline{\chi}$ est caractérisé par le système différentiel suivant :

$$-\Delta_Z \underline{\chi} + \underline{\text{grad}}_Z \underline{\chi} \cdot \underline{V}_g^{*(0)} + \underline{V}_g^{*(0)} - \overline{V_g^{*(0)}}^f = \underline{0} \quad \text{et} \quad \underline{\text{grad}}_Z \underline{\chi} \cdot \underline{n} + \underline{n} = \underline{0} \quad \text{sur } I^{fs} \quad (3.47)$$

écriture macroscopique de la conservation de la masse de vapeur

L'équation macroscopique de la conservation de la masse de la vapeur d'eau est obtenue à partir de (3.31) à l'ordre δ^0 et (3.32) à l'ordre δ . On a alors, après simplifications (voir annexe 4.9) :

$$-\text{div}_x \left(c_g^{(0)} (\underline{\text{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} + \underline{\text{grad}}_Z \tilde{\theta}_v^{(1)})^f \right) + \text{div}_x \left(c_v^{(0)} \overline{V_g^{*(1)}}^f + \overline{c_v^{(1)} V_g^{*(0)}}^f \right) = 0 \quad (3.48)$$

Le deuxième terme du membre de gauche peut se simplifier à partir des résultats (3.30)-(3.46)-(4.48) :

$$\overline{c_v^{(1)} V_g^{*(0)}}^f = c_g^{(0)} \overline{\theta_v^{(1)} V_g^{*(0)}}^f + \theta_v^{(0)} \overline{c_g^{(1)} V_g^{*(0)}}^f \quad \left\{ \begin{array}{l} \overline{\theta_v^{(1)} V_g^{*(0)}}^f = \overline{\theta_v^{(1)}}^f \overline{V_g^{*(0)}}^f + \overline{V_g^{*(0)} \otimes \underline{\chi}}^f \cdot \underline{\text{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} \\ \overline{c_g^{(1)} V_g^{*(0)}}^f = \overline{c_g^{(1)}}^f \overline{V_g^{*(0)}}^f + \overline{V_g^{*(0)} \otimes \underline{\kappa}}^f \cdot \underline{\text{grad}}_\zeta c_g^{(0)} \end{array} \right. \quad (3.49)$$

Le résultat s'écrit finalement :

$$\overline{c_v^{(1)} V_g^{*(0)}}^f = \overline{c_v^{(1)}}^f \overline{V_g^{*(0)}}^f + c_g^{(0)} \overline{V_g^{*(0)} \otimes \underline{\chi}}^f \cdot \underline{\text{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} + \theta_v^{(0)} \overline{V_g^{*(0)} \otimes \underline{\kappa}}^f \cdot \underline{\text{grad}}_\zeta c_g^{(0)} \quad (3.50)$$

On aboutit alors à l'expression simplifiée de l'équation macroscopique :

$$\begin{aligned}
& - \operatorname{div}_x \left(c_g^{(0)} \overline{(\operatorname{grad}_\zeta \theta_v^{(0)} + \operatorname{grad}_Z \tilde{\theta}_v^{(1)})^f} \right) + \operatorname{div}_x \left(c_v^{(0)} \overline{V_g^{*(1)}}^f + \overline{c_v^{(1)}}^f \overline{V_g^{*(0)}}^f \right) \\
& + \operatorname{div}_x \left(c_g^{(0)} \overline{V_g^{*(0)}}^f \otimes \underline{\chi} \cdot \underline{\operatorname{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} + \theta_v^{(0)} \overline{V_g^{*(0)}}^f \otimes \underline{\kappa} \cdot \underline{\operatorname{grad}}_\zeta c_g^{(0)} \right) = 0
\end{aligned} \tag{3.51}$$

Il reste à faire la somme de (3.45) et de (3.51) multipliée par δ . En revenant aux variables dimensionnées, l'équation macroscopique de la conservation de la masse de vapeur d'eau prend finalement la forme suivante :

$$\begin{aligned}
& \operatorname{div}_x \left(\overline{c_v^f} \overline{V_g^f} \right) \\
& - \operatorname{div}_x \left(D c_g^{(0)} \left(\underline{\delta} + {}^T \underline{\operatorname{grad}}_Z \underline{\chi} \right) \cdot \underline{\operatorname{grad}}_x \theta_v^{(0)} \right) \\
& + \operatorname{div}_x \left[d \left(c_g^{(0)} \overline{V_g^{(0)}}^f \otimes \underline{\chi} \cdot \underline{\operatorname{grad}}_x \theta_v^{(0)} + \theta_v^{(0)} \overline{V_g^{(0)}}^f \otimes \underline{\kappa} \cdot \underline{\operatorname{grad}}_x c_g^{(0)} \right) \right] = 0
\end{aligned} \tag{3.52}$$

Le premier terme correspond manifestement au flux advectif macroscopique de vapeur d'eau. On se propose de montrer, dans la suite, que les termes suivants correspondent respectivement aux composantes diffusive et dispersive (dispersion mécanique) macroscopiques du flux de masse de la vapeur d'eau.

3.3.3 modélisation macroscopique du flux diffusif

Le flux diffusif macroscopique de vapeur d'eau est défini (cf. section 1.2.3) comme la moyenne (apparente) du flux diffusif microscopique donné en (3.9).

Ne considérant que les termes d'ordre δ^0 et compte tenu de (3.39), ce dernier peut être calculé dans le cadre de la décomposition (3.34) :

$$\underline{j}_v^{dif} = -D c_g \underline{\operatorname{grad}}_Z \theta_v = -\frac{D}{L} c_g^{(0)} \left(\underline{\operatorname{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} + \underline{\operatorname{grad}}_Z \tilde{\theta}_v^{(1)} \right) \tag{3.53}$$

Soit, d'après (3.46) :

$$\underline{j}_v^{dif} = -\frac{D}{L} c_g^{(0)} \left(\underline{\delta} + {}^T \underline{\operatorname{grad}}_Z \underline{\chi} \right) \cdot \underline{\operatorname{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} \tag{3.54}$$

En effectuant une prise de moyenne de (3.54) par rapport à la variable $\underline{Z}$ sur le domaine

$\mathcal{C}^f$, on aboutit à l'expression macroscopique du flux diffusif de la vapeur d'eau :

$$\underline{J}_v^{dif} = \varphi \overline{j}_v^{dif} = -c_g^{(0)} \underline{D}_{dif}^{hom} \cdot \underline{\text{grad}}_x \theta_v^{(0)} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \underline{D}_{dif}^{hom} = \varphi D \underline{T} \\ \underline{T} = \underline{\delta} + \overline{T \text{grad}_Z \underline{\chi}}^f \end{cases} \quad (3.55)$$

où φ désigne la porosité du milieu poreux.

Ce résultat montre que la structure du flux diffusif macroscopique est analogue à celle du flux diffusif microscopique, aux effets géométriques près. En effet, la présence de la porosité mesure la réduction de l'espace poreux, et la tortuosité, donnée sous la forme d'un tenseur, prend en compte la morphologie de cet espace. La structure de (3.55) est donc formellement semblable à celle de (1.70) qui donnait la valeur du flux diffusif macroscopique dans le cas de l'advection modérée ($\underline{V} = O(\underline{V}_o)$). Cependant, pour le régime d'advection considéré ici ($\underline{V} = O(\underline{V}_o/\delta)$), **on note que le tenseur $\underline{T}$ dépend, en outre, de la structure de l'écoulement advectif à l'échelle microscopique** (champ de vitesse adimensionnel $\underline{V}_g^{*(0)}$) par l'intermédiaire de champ $\underline{\chi}$ défini comme la solution de (3.47). Notons bien que $\underline{\chi}$ est indépendant du gradient de pression macroscopique.

3.3.4 modélisation macroscopique du flux dispersif mécanique

On introduit, à l'échelle microscopique, la quantité $\underline{j}_v^{disp}$ définie comme le produit de l'écart à la moyenne de la concentration molaire de la vapeur d'eau par la vitesse du mélange gazeux :

$$\underline{j}_v^{disp} = \tilde{c}_v \underline{V}_g = (c_v - \overline{c}_v^f) \underline{V}_g \quad (3.56)$$

On définit comme en 1.2.3 le flux dispersif macroscopique d'origine mécanique comme la moyenne apparente de $\underline{j}_v^{disp}$:

$$\underline{J}_v^{disp} = \varphi \overline{j}_v^{disp}^f \quad (3.57)$$

A partir de l'écriture sous forme de développement de la concentration molaire de la vapeur d'eau donnée en (4.43) et en utilisant (3.39), on trouve à l'ordre δ^1 :

$$\underline{j}_v^{disp} = \delta (c_v^{(1)} - \overline{c}_v^{(1)f}) \underline{V}_g^{(0)} \quad (3.58)$$

On exploite alors la relation établie en (4.48) et l'on aboutit à l'expression suivante :

$$c_v^{(1)} - \overline{c_v^{(1)}}^f = c_g^{(0)} (\tilde{\theta}_v^{(1)} - \overline{\tilde{\theta}_v^{(1)}}^f) + \theta_v^{(0)} (c_g^{(1)} - \overline{c_g^{(1)}}^f) \quad (3.59)$$

En tenant compte des résultats (3.23)-(3.30)-(3.46), on écrit finalement le flux dispersif local de la façon suivante :

$$\underline{j}_v^{disp} = \tilde{c}_v \underline{V}_g = \delta \left(c_g^{(0)} \underline{\chi} \cdot \underline{\text{grad}}_{\zeta} \theta_v^{(0)} + \theta_v^{(0)} \underline{\kappa} \cdot \underline{\text{grad}}_{\zeta} c_g^{(0)} \right) \underline{V}_g^{(0)} \quad (3.60)$$

Finalement, en effectuant une prise de moyenne de (3.60) par rapport à la variable $\underline{Z}$ sur le domaine $\mathcal{C}^f$, on obtient l'écriture macroscopique du flux dispersif mécanique de la vapeur d'eau :

$$\underline{J}_v^{disp} = \varphi \overline{\tilde{c}_v \underline{V}_g}^f = d \varphi \left(c_g^{(0)} \overline{\underline{V}_g^{(0)} \otimes \underline{\chi}}^f \cdot \underline{\text{grad}}_x \theta_v^{(0)} + \frac{\theta_v^{(0)}}{kT} \overline{\underline{V}_g^{(0)} \otimes \underline{\kappa}}^f \cdot \underline{\text{grad}}_x p_g^{(0)} \right) \quad (3.61)$$

3.3.5 modélisation macroscopique du flux dispersif total

L'expression de la dispersion macroscopique totale $\underline{J}$ est obtenue en superposant les expressions des flux diffusif (3.55) et dispersif mécanique (3.61) macroscopiques :

$$\begin{aligned} \underline{J} = \underline{J}_v^{dif} + \underline{J}_v^{disp} = & -\varphi c_g^{(0)} (D \underline{\underline{T}} - d \overline{\underline{V}_g^{(0)} \otimes \underline{\chi}}^f) \cdot \underline{\text{grad}}_x \theta_v^{(0)} \\ & + d \varphi \frac{\theta_v^{(0)}}{kT} \overline{\underline{V}_g^{(0)} \otimes \underline{\kappa}}^f \cdot \underline{\text{grad}}_x \mathbf{p}_g^{(0)} \end{aligned} \quad (3.62)$$

L'expression du terme en $\underline{\text{grad}}_x \theta_v^{(0)}$ est analogue à (3.1), à cette différence près que le moteur de la dispersion est ici le gradient de fraction molaire et non le gradient de concentration molaire. Cette différence peut être qualifiée de “mineure” dans la mesure où son origine est liée à la nature gazeuse de l'espèce diffusante. Le champ $\underline{\chi}$ de (3.47) étant indépendant de l'amplitude de la vitesse $\underline{V}_g^{(0)}$, on remarque de plus que le terme $(d \overline{\underline{V}_g^{(0)} \otimes \underline{\chi}}^f)$ a bien la dimension⁶ de $d |\underline{V}_g|$.

La présence d'un terme en $\underline{\text{grad}}_x p_g^{(0)}$ constitue en revanche une différence “majeure” par rapport à la formulation classique (3.1). Ce résultat montre très clairement qu'en présence d'un fluide compressible, il est primordial d'intégrer la contribution du gradient de

⁶cependant, $\underline{V}_g$ étant astreint à la condition $|\underline{V}_g| = O(V_o/\delta)$, on pourrait tout aussi bien écrire $d |\underline{V}_g| = \frac{d^2 |\underline{V}_g|^2}{D}$; cette écriture correspond d'ailleurs à la forme classique du résultat de Taylor [119].

pression totale pour les régimes d'advection supérieurs à l'advection modérée.

3.4 Conclusions

L'étude présentée dans ce chapitre s'inscrit dans le cadre de la modélisation des transferts en phase gazeuse dans les matériaux poreux. La technique d'homogénéisation basée sur les développements asymptotiques a permis de mettre en évidence la structure des lois de transport advective et dispersive d'un mélange gazeux, composé d'air et de vapeur d'eau, à l'échelle macroscopique.

- la modélisation du transport advectif est identique au cas d'un fluide incompressible. Il obéit à une *loi de Darcy* dans laquelle intervient un tenseur de perméabilité, défini à partir de la géométrie de la microstructure et égal à celui obtenu dans le cas incompressible.

- le concept de dispersion est essentiellement macroscopique. Elle est définie comme la somme des moyennes prises sur un v.e.r. de la composante diffusive locale et d'un terme représentant l'écart entre les grandeurs locales et leurs moyennes.

Pour le régime d'advection défini par la condition $|\underline{V}_g| = O(V_o/\delta)$, le flux dispersif macroscopique total de vapeur d'eau a deux origines : d'une part le gradient de la fraction molaire de vapeur d'eau, d'autre part le gradient de pression totale. Cet effet de la pression totale sur la dispersion est une spécificité du fluide compressible. Il en résulte qu'il n'est pas possible de modéliser la dispersion par une loi de Fick généralisée faisant intervenir un tenseur de dispersion fonction de la vitesse comme on le fait classiquement dans le cas du fluide incompressible. En revanche, le tenseur de dispersion intervenant dans le calcul de la contribution du gradient de fraction molaire de vapeur d'eau à la dispersion a la même structure que dans le cas incompressible.

Naturellement, le résultat (3.61) mériterait d'être illustré de façon analytique ou numérique. Malheureusement, dans le problème du tube cylindrique [119] utilisé classiquement pour étudier la dispersion, le terme en gradient de pression disparaît. Il faut donc envisager une géométrie plus complexe. La difficulté réside alors dans la mise en œuvre d'une résolution numérique capable de déterminer les gradients de vitesse intervenant dans l'expression de la dispersion macroscopique à travers le champ $\underline{\kappa}$.

Chapitre 4

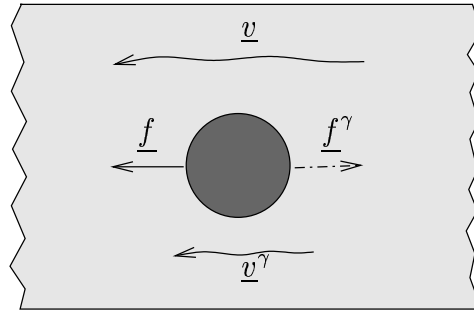
Annexes de la partie II

Sommaire

4.1	Interprétation mécanique de la loi de Fick	107
4.2	Le problème d'Eshelby pour le transport diffusif	109
4.2.1	inclusion ellipsoïdale dans un milieu isotrope transverse	109
4.2.2	inhomogénéité ellipsoïdale dans un milieu isotrope transverse	111
4.2.3	estimation de Mori-Tanaka dans le cas ellipsoïdal de révolution	112
4.3	Principes de minimisation	113
4.3.1	principe du minimum en flux	113
4.3.2	principe de minimum en concentration	113
4.4	Prise en compte de l'interaction entre les fissures	115
4.5	Annexe 5	119
4.6	Annexe 6	121
4.7	Annexe 7	123
4.8	Annexe 8	125
4.9	Annexe 9	127

4.1 Interprétation mécanique de la loi de Fick

Sur la base d'un raisonnement purement mécanique, on présente dans cette annexe une interprétation de la loi de Fick (*première loi de Fick*). On considère une particule animée par une vitesse $\underline{v}^\gamma$ dans une solution elle-même animée par une vitesse $\underline{v}$ différente de $\underline{v}^\gamma$. c^γ définit le nombre de particules par unité de volume de solution. Toute force volumique $\underline{f}$ agissant sur la particule doit être équilibrée par la force de résistance qu'oppose le fluide au mouvement de la particule.



En première approximation, *i.e.* pour des vitesses modérées, cette force de résistance $\underline{f}^\gamma$ est proportionnelle à la différence des vitesses qui animent la particule et la solution :

$$\underline{f}^\gamma = -\underline{f} = \frac{1}{b^\gamma} (\underline{v}^\gamma - \underline{v}) \quad (4.1)$$

Dans cette relation le coefficient b^γ est classiquement appelé *mobilité*. Les équations hydrodynamiques permettent de la calculer. Pour des particules sphériques, elle est inversement proportionnel à la viscosité μ de la solution siège du transport de la particule et du rayon, noté r^γ , de la particule :

$$b^\gamma = \frac{1}{6\pi \mu r^\gamma} \quad (4.2)$$

Soit $\underline{\underline{\sigma}}^\gamma = -p^\gamma \underline{\underline{\delta}}$ le tenseur des efforts intérieurs à la particule dans lequel p^γ est la pression partielle associée à la particule, l'équilibre statique de la particule s'écrit d'après (4.1) :

$$\text{div} \underline{\underline{\sigma}}^\gamma + c^\gamma \underline{f} = \underline{0} \quad \Leftrightarrow \quad -\underline{\text{grad}} p^\gamma - \frac{c^\gamma}{b^\gamma} (\underline{v}^\gamma - \underline{v}) = \underline{0} \quad (4.3)$$

Il suffit alors d'exploiter la relation linéaire entre la pression partielle et la concentration (en nombre d'individus) de la particule : $p^\gamma = kT c^\gamma$ pour obtenir l'expression de la première loi de diffusion de Fick :

$$c^\gamma (\underline{v} - \underline{v}^\gamma) = -D^\gamma \underline{\text{grad}} c^\gamma \quad (4.4)$$

où $D^\gamma = b^\gamma kT$ est le coefficient de diffusion de la particule dans un milieu infini tel qu'il a été défini par Einstein[52].

4.2 Le problème d'Eshelby pour le transport diffusif

Dans le cadre du schéma différentiel (section 1.4.2), la mise en oeuvre du schéma dilué à chaque itération nécessite de connaître les tenseurs $\underline{\underline{R}}_F^{\mathcal{E}k}$ de (1.56). Ceux-ci proviennent de la résolution du problème de l'inhomogénéité ellipsoïdale dans un milieu infini qui est ici anisotrope, les directions principales du tenseur de diffusion coïncidant avec les axes de l'ellipsoïde. On se limite dans la suite au cas où $\mathcal{E}$ possède la symétrie de révolution autour de l'axe dirigé par le vecteur $\underline{e}_3$ et où le milieu infini est isotrope transverse par rapport à cette direction. Le tenseur $\underline{\underline{R}}_\gamma^{\mathcal{E}}$ intervenant dans l'estimation de Mori-Tanaka (1.49) correspond au cas particulier où le milieu infini est isotrope.

L'approche d'Eshelby [47] consiste à examiner tout d'abord un problème auxiliaire dit de l'inclusion (section 4.2.1), dont on déduit la solution du problème de l'inhomogénéité (section 4.2.2). La section 4.2.3 traite le cas particulier de l'estimation de Mori-Tanaka.

4.2.1 inclusion ellipsoïdale dans un milieu isotrope transverse

On considère un domaine infini *homogène* de coefficient de diffusion isotrope transverse $\underline{\underline{D}}^0$:

$$\underline{\underline{D}}^0 = D_h(\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2) + D_v \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3 \quad (4.5)$$

où $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$ est un repère orthonormé de l'espace. Soit $\mathcal{E}$ un ellipsoïde centré à l'origine dont les axes sont colinéaires aux $\underline{e}_i$, de demi-longueurs a_i , avec $a_1 = a_2$. Etant donné un vecteur $\underline{p}^{\mathcal{E}}$, on s'intéresse au problème suivant, dit de l'inclusion :

$$\text{div } \underline{j} = 0 ; \quad \underline{j} = -\underline{\underline{D}}^0 \cdot \underline{\text{grad}} \rho + \underline{p}^{\mathcal{E}} \chi^{\mathcal{E}} \quad (4.6)$$

avec la condition à l'infini :

$$\rho \rightarrow 0 \text{ quand } |\underline{z}| \rightarrow \infty \quad (4.7)$$

où $\chi^{\mathcal{E}}$ est la fonction caractéristique de l'ellipsoïde $\mathcal{E}$ ($\chi^{\mathcal{E}} = 1$ dans $\mathcal{E}$, $\chi^{\mathcal{E}} = 0$ à l'extérieur). Notant Δ^η l'opérateur :

$$\Delta^\eta = \frac{\partial}{\partial z_1^2} + \frac{\partial}{\partial z_2^2} + \eta \frac{\partial}{\partial z_3^2} \text{ avec } \eta = \frac{D_v}{D_h} \quad (4.8)$$

et $\delta_{\partial\mathcal{E}}$ la distribution de Dirac dont le support est la frontière $\partial\mathcal{E}$ de l'ellipsoïde, il s'agit

de déterminer la solution du problème défini par (4.7) et :

$$\Delta^\eta \rho = -\frac{1}{D_h} \underline{p}^\mathcal{E} \cdot \underline{n} \delta_{\partial\mathcal{E}} \quad (4.9)$$

La solution ρ_0 du problème élémentaire défini par (4.7) et $\Delta^\eta \rho = \delta_0$ est donnée par :

$$\rho_0(z_1, z_2, z_3) = -\frac{1}{4\pi\sqrt{\eta}\sqrt{z_1^2 + z_2^2 + z_3^2/\eta}} \quad (4.10)$$

On obtient la solution de (4.7)-(4.9) à partir de la solution élémentaire ρ_0 par intégration sur la frontière de l'ellipsoïde :

$$\rho(z_1, z_2, z_3) = -\frac{1}{D_h} \underline{p}^\mathcal{E} \cdot \int_{\partial\mathcal{E}} \underline{n}(Z_1, Z_2, Z_3) \rho_0(z_1 - Z_1, z_2 - Z_2, z_3 - Z_3) dS_{Z_1, Z_2, Z_3} \quad (4.11)$$

Soit $\bar{\mathcal{E}}$ l'ellipsoïde image de $\mathcal{E}$ par l'application $\bar{Z}_1 = Z_1$; $\bar{Z}_2 = Z_2$; $\bar{Z}_3 = Z_3/\sqrt{\eta}$. En transformant (4.11) en intégrale de volume sur $\bar{\mathcal{E}}$, on obtient :

$$\rho(z_1, z_2, z_3) = -\frac{1}{4\pi D_h} p_j^\mathcal{E} \frac{\partial}{\partial z_j} (\phi(z_1, z_2, z_3/\sqrt{\eta})) \quad (4.12)$$

où ϕ est le potentiel de l'ellipsoïde $\bar{\mathcal{E}}$:

$$\phi(z_1, z_2, z_3/\sqrt{\eta}) = \int_{\bar{\mathcal{E}}} \frac{dZ_1, dZ_2, dZ_3}{\sqrt{(z_1 - Z_1)^2 + (z_2 - Z_2)^2 + (z_3/\sqrt{\eta} - Z_3)^2}} \quad (4.13)$$

Finalement, en dérivant (4.12), on obtient une expression de $\underline{grad} \rho$ dans $\mathcal{E}$ sous la forme suivante :

$$\underline{grad} \rho(z_1, z_2, z_3) = \underline{\underline{R}}_0^\mathcal{E} \cdot \underline{p}^\mathcal{E} \text{ avec } R_{0ij}^\mathcal{E} = -\frac{1}{4\pi D_h} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} (\phi(z_1, z_2, z_3/\sqrt{\eta})) \quad (4.14)$$

où l'indice 0 dans $\underline{\underline{R}}_0^\mathcal{E}$ rappelle que le résultat est relatif au milieu infini de coefficient de diffusion $\underline{\underline{D}}^0$. Compte tenu de (1.41), la matrice de $\underline{\underline{R}}_0^\mathcal{E}$ est diagonale dans la base $(\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3)$:

$$R_{011}^\mathcal{E} = \frac{I_1(\bar{\mathcal{E}})}{4\pi D_h} ; R_{022}^\mathcal{E} = R_{011}^\mathcal{E} ; R_{033}^\mathcal{E} = \frac{I_3(\bar{\mathcal{E}})}{4\pi D_v} \quad (4.15)$$

Il est souvent profitable d'introduire le *tenseur d'Eshelby*, noté ici $\underline{\underline{S}}_0^\mathcal{E}$, défini à partir de

$\underline{\underline{R}}_0^\mathcal{E}$ comme suit :

$$\underline{\underline{S}}_0^\mathcal{E} = \underline{\underline{D}}^0 \cdot \underline{\underline{R}}_0^\mathcal{E} \quad (4.16)$$

Dans le cas d'un ellipsoïde $\mathcal{E}$ de révolution "aplati", c'est-à-dire satisfaisant $a_1 = a_2 > a_3$, on pose $\omega = a_3/a_1$. Rappelons que :

$$I_1(\mathcal{E}) = I_2(\mathcal{E}) = \frac{2\pi\omega}{(1-\omega^2)^{3/2}} \left(\arccos(\omega) - \omega(1-\omega^2)^{1/2} \right) ; I_3(\mathcal{E}) = 4\pi - 2I_1(\mathcal{E}) \quad (4.17)$$

Dans le cas sphérique ($\omega \rightarrow 1$), on a $I_1 = I_2 = I_3$ si bien que (4.16) donne :

$$I_1 = I_2 = I_3 = \frac{4\pi}{3} \rightarrow \underline{\underline{S}}_0^\mathcal{E} = \frac{1}{3}\underline{\underline{\delta}} \quad (4.18)$$

On introduira donc dans (4.15) les valeurs suivantes :

$$I_1(\bar{\mathcal{E}}) = I_2(\bar{\mathcal{E}}) = \frac{2\pi\omega}{\sqrt{\eta}(1-\frac{\omega^2}{\eta})^{3/2}} \left(\arccos\left(\frac{\omega}{\sqrt{\eta}}\right) - \frac{\omega}{\sqrt{\eta}} \left(1 - \frac{\omega^2}{\eta}\right)^{1/2} \right) ; I_3(\bar{\mathcal{E}}) = 4\pi - 2I_1(\bar{\mathcal{E}}) \quad (4.19)$$

Compte tenu de (4.14), le gradient dans $\mathcal{E}$ de la solution de (4.6), satisfaisant à :

$$\rho \rightarrow \underline{\underline{H}} \cdot \underline{\underline{z}} \text{ quand } |\underline{\underline{z}}| \rightarrow \infty \quad (4.20)$$

est uniforme et donné par :

$$\underline{\underline{grad}} \rho(z_1, z_2, z_3) = \underline{\underline{R}}_0^\mathcal{E} \cdot \underline{\underline{p}}^\mathcal{E} + \underline{\underline{H}} \quad (4.21)$$

4.2.2 inhomogénéité ellipsoïdale dans un milieu isotrope transverse

On place une inhomogénéité ellipsoïdale $\mathcal{E}$ de coefficient de diffusion $D^s \underline{\underline{\delta}}$ dans un milieu infini Ω de coefficient de diffusion $\underline{\underline{D}}^0$. Les équations du problème de l'inhomogénéité sont :

$$\text{div } \underline{\underline{j}} = 0 ; \quad \underline{\underline{j}} = -\underline{\underline{D}}(z) \cdot \underline{\underline{grad}} \rho \quad (4.22)$$

avec :

- $\underline{\underline{D}}(\underline{z}) = D^s \underline{\underline{\delta}}$ dans $\mathcal{E}$
- $\underline{\underline{D}}(\underline{z}) = \underline{\underline{D}}^0$ dans $\Omega - \mathcal{E}$

On complète (4.22) par la condition (4.20). On observe que (4.22) s'écrit formellement comme (4.6), quitte à poser :

$$\underline{p}^\mathcal{E} = -\delta \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\underline{grad}} \rho \text{ avec } \delta \underline{\underline{D}} = D^s \underline{\underline{\delta}} - \underline{\underline{D}}^0 \quad (4.23)$$

En rapprochant (4.23) de (4.21), on voit que la valeur (uniforme dans $\mathcal{E}$) de $\underline{\underline{grad}} \rho$ pour le problème de l'inhomogénéité est donnée en fonction de $\underline{H}$ par :

$$(\underline{\underline{grad}} \rho)^\mathcal{E} = (\underline{\underline{\delta}} + \underline{\underline{R}}_0^\mathcal{E} \cdot \delta \underline{\underline{D}})^{-1} \cdot \underline{H} \quad (4.24)$$

4.2.3 estimation de Mori-Tanaka dans le cas ellipsoïdal de révolution

Pour un ellipsoïde aplati de révolution autour de l'axe $\underline{e}_3$ ($a_1 = a_2 > a_3$), l'estimation de Mori-Tanaka conduit à un milieu homogénéisé isotrope transverse. Puisque le milieu de référence est isotrope ($\underline{\underline{D}}^0 = D^\gamma \underline{\underline{\delta}}$), le tenseur $\underline{\underline{R}}_\gamma^\mathcal{E}$ de (1.39) est calculé à l'aide de (4.15) en faisant $\overline{\mathcal{E}} = \mathcal{E}$ et $D_h = D_v = D^\gamma$. Compte tenu de (1.49), on obtient :

$$T_{ii}^{MT} = \frac{1 - \frac{I_i(\mathcal{E})}{4\pi}}{(1 - \varphi^f) + \varphi^f \left(1 - \frac{I_i(\mathcal{E})}{4\pi}\right)} \quad (\text{sans sommation sur } i) \quad (4.25)$$

où les $I_i(\mathcal{E})$ sont donnés par (4.17).

4.3 Principes de minimisation

Comme en 1.5.2, on note r et $\underline{f} = -D^\gamma \underline{\text{grad}}_z r$ les champs du couple solution du problème direct (1.63)-(1.65)-(1.66)-(1.67).

4.3.1 principe du minimum en flux

Etant donné un élément $\underline{f}'$ de $\mathcal{F}$, on pose $\underline{f}' = \underline{f} + \delta \underline{f}$. Le champ $\delta \underline{f}$ possède les propriétés des flux admissibles, à l'exception de la condition de flux à l'interface I^{fs} où l'on a $\delta \underline{f} \cdot \underline{n} = 0$. En vertu de la définition (1.72) de la fonctionnelle W^* , on voit que :

$$W^*(\underline{f}') = W^*(\underline{f}) + W^*(\delta \underline{f}) + \frac{1}{D^\gamma} \int_{cf} \underline{f} \cdot \delta \underline{f} dV_z \quad (4.26)$$

En utilisant le fait que $\underline{f} = -D^\gamma \underline{\text{grad}}_z r$, l'intégrale dans le membre de droite de (4.26) s'écrit en fonction de r :

$$\frac{1}{D^\gamma} \int_{cf} \underline{f} \cdot \delta \underline{f} dV_z = \int_{cf} r \operatorname{div}(\delta \underline{f}) dV_z - \int_{\partial cf} r \delta \underline{f} \cdot \underline{n} dS_z \quad (4.27)$$

Dans le membre de droite de (4.27), l'intégrale de volume est nulle en raison de la condition $\operatorname{div}_z \delta \underline{f} = 0$. L'intégrale de surface est nulle en raison de la condition $\delta \underline{f} \cdot \underline{n} = 0$ sur I^{fs} et des propriétés de périodicité de r et $\delta \underline{f}$ à la frontière de la cellule de base. (1.76) résulte alors de la positivité de $W^*(\delta \underline{f})$.

4.3.2 principe de minimum en concentration

Pour un élément r' de $\mathcal{R}$, on pose de même $r' = r + \delta r$, en observant que $\delta r \in \mathcal{R}$. Compte tenu de (1.66), on remarque d'abord que :

$$\int_{cf} \underline{\text{grad}}_z(\delta r) \cdot \underline{\text{grad}}_z r dV_z = \int_{\partial cf} \delta r \underline{\text{grad}}_z r \cdot \underline{n} dS_z \quad (4.28)$$

En utilisant (1.67) et les propriétés de périodicité de δr et $\partial r / \partial n$ dans (4.28), on obtient :

$$\int_{cf} \underline{\text{grad}}_z(\delta r) \cdot \underline{\text{grad}}_z r dV_z + \int_{I^{fs}} \delta r \underline{H} \cdot \underline{n} dS_z = 0 \quad (4.29)$$

On déduit de (1.75) et de (4.29) que :

$$W(r') = W(r) + \frac{D^\gamma}{2} \int_{cf} (\underline{\text{grad}}_z(\delta r))^2 dV_z \quad (4.30)$$

qui prouve (1.76).

4.4 Prise en compte de l'interaction entre les fissures

Il est possible de retrouver les résultats classiques de la Mécanique de la Rupture sur la relation entre l'ouverture d'une fissure et la contrainte appliquée à l'infini, en adaptant les résultats d'Eshelby sur le problème de l'inhomogénéité ellipsoïdale placée dans un milieu infini. La fissure correspond au passage à la limite pour les petits rapports d'aspect ($c/a \ll 1$). On anticipe ici la suite de ce mémoire dans laquelle on précisera les relations obtenues par Eshelby pour des considérations purement mécaniques.

Dans le cadre de ses travaux sur la détermination du comportement mécanique d'un milieu hétérogène, Eshelby [47] a montré qu'une inhomogénéité de géométrie ellipsoïdale, placée dans un milieu chargé à l'infini, se déforme uniformément. En particulier, la structure linéaire du problème permet de relier les déformations locale dans l'inhomogénéité $\underline{\underline{\epsilon}}$ et globale $\underline{\underline{E}}^0$ imposée sur le bord du v.e.r. :

$$\underline{\underline{\epsilon}}_I = \mathbb{A} : \underline{\underline{E}}^0 \quad \text{with} \quad \begin{cases} \mathbb{A} = (\mathbb{I} + \mathbb{P} : \delta \mathbb{C})^{-1} \\ \delta \mathbb{C} = \mathbb{C}^I - \mathbb{C}^0 \end{cases} \quad (4.31)$$

où $\mathbb{A}$ est le *tenseur de localisation*, $\mathbb{C}^I$ est le tenseur d'élasticité de l'inclusion et $\mathbb{C}^0$ celui du milieu homogène entourant l'inclusion. En particulier, dans le cas d'un matériau fissuré, on a $\mathbb{C}^0 = \mathbb{C}^u$ (élasticité de la matrice saine) et $\mathbb{C}^I = 0$ (dans la fissure), d'où :

$$\underline{\underline{\epsilon}}_I = (\mathbb{I} - \mathbb{S}^I)^{-1} : \underline{\underline{E}}^0 \quad (4.32)$$

où $\mathbb{S}^I = \mathbb{P} : \mathbb{C}^u$ est le tenseur d'Eshelby, qui dépend de l'orientation et du rapport d'aspect de la fissure.

Au delà de la situation particulière d'une fissure unique isolée dans un milieu infini, on s'intéresse au cas d'un matériau fissuré par des fissures parallèles. On cherche alors à établir l'expression du comportement à l'échelle macroscopique sous la forme :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}} \quad (4.33)$$

Il s'agit de relier linéairement les tenseurs de déformation $\underline{\underline{E}}$ et de contrainte $\underline{\underline{\Sigma}}$ macroscopiques. Le tenseur des modules élastiques homogénéisés $\mathbb{C}^{hom}$ devant incorporer les effets de la fissuration sur le comportement macroscopique du matériau. Cela nécessite l'écriture de la relation existant entre l'ouverture des fissures et la contrainte appliquée.

Deux situations peuvent être envisagées :

- le cas dilué pour lequel l'interaction entre les fissures est négligée,
- le cas non dilué où l'interaction entre les fissures doit être prise en compte.

Soit $\underline{\underline{E}}$, la déformation macroscopique que l'on applique sur le v.e.r..

- Dans le cas dilué, la déformation $\underline{\underline{\epsilon}}_I$ dans une fissure I peut être estimée par (4.32) en remplaçant $\underline{\underline{E}}^0$ par $\underline{\underline{E}}$:

$$\begin{cases} \underline{\underline{\epsilon}}_I = (\mathbb{I} - \mathbb{S}^I)^{-1} : \underline{\underline{E}} & (a) \\ \mathbb{C}^{hom} = \mathbb{C}^u : (\mathbb{I} - \phi^c (\mathbb{I} - \mathbb{S}^I)^{-1}) & (b) \end{cases} \quad (4.34)$$

- Dans le cas non dilué, une fissure est entourée par d'autres fissures qui interagissent entre elles. La déformation dans une fissure I peut encore être estimée par (4.32). Toutefois, en raison de l'interaction des fissures, $\underline{\underline{E}}^0$ n'est pas équivalent à $\underline{\underline{E}}$. En exploitant la condition $\langle \underline{\underline{\epsilon}} \rangle = \underline{\underline{E}}$, on établit le lien entre ces deux grandeurs :

$$\underline{\underline{E}}^0 = \langle (\mathbb{I} + \mathbb{P} : \delta \mathbb{C})^{-1} \rangle^{-1} : \underline{\underline{E}} \quad (4.35)$$

où $\delta \mathbb{C} = \mathbb{C}^i - \mathbb{C}^u$ ($i = I, u$), $\mathbb{C}^i$ désignant le tenseur des modules élastiques de la phase i .

En introduisant (4.35) dans (4.32), on aboutit à :

$$\underline{\underline{\epsilon}}_I = (\mathbb{I} - \mathbb{S}^I)^{-1} : \langle (\mathbb{I} + \mathbb{P} : \delta \mathbb{C})^{-1} \rangle^{-1} : \underline{\underline{E}} \quad (4.36)$$

De plus, on montre [126] que le tenseur des modules élastiques macroscopique $\mathbb{C}^{hom}$ s'écrit :

$$\mathbb{C}^{hom} = (1 - \phi^c) \mathbb{C}^u : \langle (\mathbb{I} + \mathbb{P} : \delta \mathbb{C})^{-1} \rangle^{-1} \quad (4.37)$$

On s'intéresse à un état de contraintes macroscopique uniaxial $\underline{\underline{\Sigma}} = \Sigma \underline{\underline{e}}_3 \otimes \underline{\underline{e}}_3$. Soit ω_0 le rapport d'aspect d'une fissure dans son état initial; on fait l'hypothèse d'une quasi-fermeture des fissures à l'état initial $\omega_0 \approx 0$. Soit ϵ la déformation volumique associée à l'ouverture des fissures, on montre que l'on a :

$$\omega = \omega_0 (1 + \epsilon) \approx \omega_0 \epsilon \quad \text{avec} \quad \epsilon = tr \underline{\underline{\epsilon}}_I \quad (4.38)$$

On aboutit à la relation entre ω et ϵ en exploitant la formulation du comportement (4.33) à l'échelle macroscopique :

1. Dans le cas dilué, (4.34.a), (4.34.b) et (4.38) conduisent à :

$$\omega = \omega_0 \underline{\underline{\delta}} : \underline{\underline{\epsilon}}_I = \frac{\omega_0 \Sigma}{1 - \phi^c} \underline{\underline{\delta}} : (\mathbb{I} - \mathbb{S}^I)^{-1} : \mathbb{C}^{u-1} : \underline{\underline{e}}_3 \otimes \underline{\underline{e}}_3 \quad (4.39)$$

2. Dans le cas non dilué, $\underline{\underline{E}}$ s'élimine entre (4.33) et (4.36). En utilisant (4.37), la relation cherchée s'écrit :

$$\omega = \frac{\omega_0 \Sigma}{1 - \phi^c} \underline{\underline{\delta}} : (\mathbb{I} - \mathbb{S}^I)^{-1} : < (\mathbb{I} + \mathbb{P} : \delta \mathbb{C})^{-1} >^{-1} : < (\mathbb{I} + \mathbb{P} : \delta \mathbb{C})^{-1} > : \mathbb{C}^{u-1} : \underline{\underline{e}}_3 \otimes \underline{\underline{e}}_3 \quad (4.40)$$

Manifestement, (4.39) et (4.40) sont identiques. Par conséquent, la validité de la relation entre la contrainte appliquée à l'infini et l'ouverture d'une fissure obtenue dans le cas dilué est inchangée si l'on prend en compte la présence de fissures interagissantes. Du point de vue des caractéristiques mécaniques, au contraire, l'influence des fissures dans le cas non dilué modifie l'expression de $\mathbb{C}^{hom}$, donnée en (4.34.b) dans le cas dilué et en (4.37) dans l'autre cas. De plus, pour des rapports d'aspect infinitésimaux, on a $\phi_{\omega_0 \rightarrow 0}^c \rightarrow 0$ si bien que :

$$\omega = \lim_{\omega_0 \rightarrow 0} [\omega_0 \Sigma \underline{\underline{\delta}} : (\mathbb{I} - \mathbb{S}^I)^{-1} : \mathbb{C}^{u-1} : \underline{\underline{e}}_3 \otimes \underline{\underline{e}}_3] \quad (4.41)$$

Le calcul de cette limite permet finalement de retrouver un résultat classique de la Mécanique de la Rupture (problème de la penny-shaped) :

$$(\omega =) \frac{c}{a} = \frac{4(1 - \nu^{u2})}{\pi E^u} \Sigma \quad (4.42)$$

4.5 Annexe 5

On cherche ici à exprimer la fraction molaire de la vapeur d'eau sous la forme d'expansions du type (3.21) à partir de l'écriture, sous la forme de ces mêmes expansions, des concentrations molaires de la vapeur d'eau et du mélange gazeux. Soit :

$$\begin{cases} \theta_v = \theta_v^{(0)} + \delta \theta_v^{(1)} + O(\delta^2) \\ c_v = c_v^{(0)} + \delta c_v^{(1)} + O(\delta^2) \\ c_g = c_g^{(0)} + \delta c_g^{(1)} + O(\delta^2) \end{cases} \quad (4.43)$$

On a donc :

$$\theta_v = \frac{c_v}{c_g} = \frac{c_v^{(0)} \left(1 + \delta \frac{c_v^{(1)}}{c_v^{(0)}} + O(\delta^2) \right)}{c_g^{(0)} \left(1 + \delta \frac{c_g^{(1)}}{c_g^{(0)}} + O(\delta^2) \right)} \quad (4.44)$$

Dans le cadre de notre modélisation, le paramètre δ vérifie la condition $\delta \ll 1$. Le dénominateur de l'expression précédente peut s'interpréter comme un développement limité, on a donc :

$$\theta_v = \frac{c_v^{(0)}}{c_g^{(0)}} \left(1 + \delta \frac{c_v^{(1)}}{c_v^{(0)}} + O(\delta^2) \right) \left(1 - \delta \frac{c_g^{(1)}}{c_g^{(0)}} + O(\delta^2) \right) \quad (4.45)$$

La fraction molaire, sous la forme d'une expansion, s'écrit finalement :

$$\theta_v = \frac{c_v^{(0)}}{c_g^{(0)}} \left(1 + \delta \left(\frac{c_v^{(1)}}{c_v^{(0)}} - \frac{c_g^{(1)}}{c_g^{(0)}} \right) + O(\delta^2) \right) \quad (4.46)$$

On identifie alors les ordres δ^0 et δ^1 dans l'écriture sous la forme d'une expansion de la fraction molaire de la vapeur d'eau :

$$\begin{cases} \theta_v^{(0)} = \frac{c_v^{(0)}}{c_g^{(0)}} \\ \theta_v^{(1)} = \theta_v^{(0)} \left(\frac{c_v^{(1)}}{c_v^{(0)}} - \frac{c_g^{(1)}}{c_g^{(0)}} \right) \end{cases} \quad (4.47)$$

D'où l'on tire la relation :

$$c_v^{(1)} = \theta_v^{(1)} c_g^{(0)} + \theta_v^{(0)} c_g^{(1)} \quad (4.48)$$

4.6 Annexe 6

On présente dans cette section le détail des calculs qui permettent, à partir des équations (3.41)-(3.42), d'aboutir à la formulation du système différentiel proposé en (3.43).

On s'intéresse, tout d'abord, au deuxième terme de l'équation (3.41) qui peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_\zeta (c_v^{(0)} \underline{v}_g^{*(0)}) &= \operatorname{div}_\zeta (\theta_v^{(0)} c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)}) \\ &= \theta_v^{(0)} \operatorname{div}_\zeta (c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)}) + c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)} \cdot \underline{\operatorname{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} \end{aligned} \quad (4.49)$$

En utilisant le résultat (4.48), il est possible d'écrire le troisième terme de cette même équation de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_Z (c_v^{(0)} \underline{V}_g^{*(1)} + c_v^{(1)} \underline{V}_g^{*(0)}) &= \operatorname{div}_Z \left(\theta_v^{(0)} c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(1)} + (\theta_v^{(0)} c_g^{(1)} + \theta_v^{(1)} c_g^{(0)}) \underline{V}_g^{*(0)} \right) \\ &= \theta_v^{(0)} \operatorname{div}_Z (c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(1)} + c_g^{(1)} \underline{V}_g^{*(0)}) + \operatorname{div}_Z (\tilde{\theta}_v^{(1)} c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)}) \end{aligned} \quad (4.50)$$

Enfin, en remarquant que la conservation de la masse du mélange gazeux à l'ordre δ^0 s'écrit :

$$\operatorname{div}_\zeta (c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)}) + \operatorname{div}_Z (c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(1)} + c_g^{(1)} \underline{V}_g^{*(0)}) = 0 \quad (4.51)$$

la combinaison des équations (4.49) et (4.50) conduit au résultat suivant :

$$\operatorname{div}_\zeta (c_v^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)}) + \operatorname{div}_Z (c_v^{(0)} \underline{V}_g^{*(1)} + c_v^{(1)} \underline{V}_g^{*(0)}) = c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)} \cdot \underline{\operatorname{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} + \operatorname{div}_Z (\tilde{\theta}_v^{(1)} c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)}) \quad (4.52)$$

Le système différentiel formé par les équations (3.41) et (3.42) se réduit alors à :

$$\begin{cases} -c_g^{(0)} \Delta_Z \tilde{\theta}_v^{(1)} + c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)} \cdot \underline{\operatorname{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} + \operatorname{div}_Z (\tilde{\theta}_v^{(1)} c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)}) = 0 \\ \left(\underline{\operatorname{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} + \underline{\operatorname{grad}}_Z \tilde{\theta}_v^{(1)} \right) \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{sur } I^f s \end{cases} \quad (4.53)$$

Il suffit alors d'utiliser la conservation de la masse du mélange gazeux à l'ordre δ^{-1} , donnée en (3.37), pour aboutir à la formulation du système différentiel à résoudre à l'ordre δ^{-1} :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\Delta_Z \tilde{\theta}_v^{(1)} + \underline{V}_g^{*(0)} \cdot \underline{\text{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} + \underline{V}_g^{*(0)} \cdot \underline{\text{grad}}_Z \tilde{\theta}_v^{(1)} = 0 \\ \left(\underline{\text{grad}}_\zeta \theta_v^{(0)} + \underline{\text{grad}}_Z \tilde{\theta}_v^{(1)} \right) \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{sur } I^{fs} \end{array} \right. \quad (4.54)$$

4.7 Annexe 7

En reportant (3.28) dans (3.24), on aboutit au résultat suivant :

$$\underline{\text{grad}}_Z p_g^{(1)} = - \left(\underline{\delta} + \Delta_Z \underline{k} \right) \cdot \underline{\text{grad}}_\zeta p_g^{(0)} \quad (4.55)$$

L'intégration par rapport à $\underline{Z}$ conduit à :

$$p_g^{(1)} = \underline{\kappa}(\underline{Z}) \cdot \underline{\text{grad}}_\zeta p_g^{(0)} + \pi(\underline{\zeta}) \quad (4.56)$$

où le champ de vecteur inconnu $\underline{\kappa}$ vérifie la condition suivante :

$${}^T \underline{\underline{\text{grad}}}_Z \underline{\kappa} = - \left(\underline{\delta} + \Delta_Z \underline{k} \right) \quad (4.57)$$

En important la condition $\overline{\kappa}^f = \underline{0}$, on interprète la fonction $\pi(\underline{\zeta})$ comme la moyenne de la pression du mélange à l'ordre δ^1 :

$$p_g^{(1)} - \overline{p_g^{(1)}}^f = \underline{\kappa}(\underline{Z}) \cdot \underline{\text{grad}}_\zeta p_g^{(0)} \quad (4.58)$$

4.8 Annexe 8

L'équation de la conservation de la masse du mélange gazeux s'écrit, à l'ordre δ^0 :

$$div_{\zeta}(c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(0)}) + div_Z(c_g^{(1)} \underline{V}_g^{*(0)} + c_g^{(0)} \underline{V}_g^{*(1)}) = 0 \quad (4.59)$$

En prenant la moyenne sur la phase fluide, on obtient :

$$div_x(c_g^{(0)} \overline{\underline{V}_g^{*(0)}}^f) = 0 \quad (4.60)$$

Par conséquent, en utilisant ce résultat combiné avec la relation (3.44), on a :

$$div_x(c_v^{(0)} \overline{\underline{V}_g^{*(0)}}^f) = \theta_v^{(0)} div_x(c_g^{(0)} \overline{\underline{V}_g^{*(0)}}^f) + c_g^{(0)} \overline{\underline{V}_g^{*(0)}}^f \cdot \underline{\text{grad}}_x \theta_v^{(0)} = 0 \quad (4.61)$$

où l'on a exploité (4.47).

4.9 Annexe 9

L'équation de la conservation de la masse de la vapeur d'eau dans le mélange gazeux est obtenue à partir de l'équation (3.31) à l'ordre δ^0 . On montre que la première équation peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned} & -div_{\zeta} \left[c_g^{(0)} \left(\underline{\text{grad}}_{\zeta} \theta_v^{(0)} + \underline{\text{grad}}_Z \theta_v^{(1)} \right) \right] + div_{\zeta} \left[c_v^{(0)} \underline{V}_g^{*(1)} + c_v^{(1)} \underline{V}_g^{*(0)} \right] \\ & - div_Z \left[c_g^{(0)} \left(\underline{\text{grad}}_{\zeta} \theta_v^{(1)} + \underline{\text{grad}}_Z \theta_v^{(2)} \right) \right] - div_Z \left[c_g^{(1)} \left(\underline{\text{grad}}_{\zeta} \theta_v^{(0)} + \underline{\text{grad}}_Z \theta_v^{(1)} \right) \right] \\ & + div_Z \left[c_v^{(0)} \underline{V}_g^{*(2)} + c_v^{(1)} \underline{V}_g^{*(1)} + c_v^{(2)} \underline{V}_g^{*(0)} \right] = 0 \end{aligned}$$

En utilisant la relation de Green-Ostrogradsky sur l'intégrale d'une divergence¹, on montre que la moyenne des termes portés par div_Z se ramène à des intégrales sur le bord du domaine occupé par la phase fluide. En vertu de la périodicité des grandeurs manipulées et des conditions aux limites (3.15), aux ordres δ^0 et δ , et (3.32), on montre alors que ces intégrales sont nulles.

L'équation précédente prise en moyenne sur la phase fluide aboutit finalement au résultat suivant :

$$-div_{\zeta} \left[c_g^{(0)} \overline{\left(\underline{\text{grad}}_{\zeta} \theta_v^{(0)} + \underline{\text{grad}}_Z \theta_v^{(1)} \right)^f} \right] + div_{\zeta} \left[c_v^{(0)} \overline{\underline{V}_g^{*(1)}^f} + c_v^{(1)} \overline{\underline{V}_g^{*(0)}^f} \right] = 0 \quad (4.62)$$

¹ $\int_{\Omega_Z} div_Z \underline{a} d\Omega_Z = \int_{\partial\Omega_Z} \underline{a} \cdot \underline{n} d\Gamma$ où $\underline{n}$ est la normale extérieure au domaine.

Troisième partie

APPROCHE MICROMÉCANIQUE
DES COMPORTEMENTS
POROÉLASTIQUES LINÉAIRES

Chapitre 5

Approche micromécanique en élasticité linéaire

Sommaire

5.1	Comportement élastique à état initial naturel	133
5.2	Comportement élastique à état initial non-naturel	136

Le présent chapitre est consacré à la présentation de la démarche micromécanique visant à déterminer le comportement macroscopique d'un matériau hétérogène. Cette approche s'inspire très largement du cours *Matériaux hétérogènes et composites* enseigné à l'École Polytechnique par le Professeur André Zaoui [125].

L'objectif, *in fine*, est la généralisation de cette démarche à la poroélasticité qui précise le comportement des milieux poreux dans lesquels une phase solide élastique coexiste avec une phase fluide.

On commence donc par présenter la démarche micromécanique sur l'exemple de la détermination du comportement homogénéisé d'un matériau élastique hétérogène pour lequel on suppose un état de contrainte initial *naturel*.

On envisage ensuite la situation où l'état initial est *non naturel*, c'est-à-dire que le matériau est sous contraintes en l'absence de déformation (contraintes d'origine thermique, par exemple). Ce paragraphe constitue un préalable à l'application de la démarche micromécanique à la poroélasticité. En effet, on verra que la présence d'un fluide sous pression peut être gérée par l'introduction d'un tenseur de précontrainte sphérique (on parle aussi de "champ de polarisation") gouverné par la pression de la phase fluide. On montrera alors que cette démarche permet de retrouver les équations d'état gouvernant le comportement macroscopique des milieux poreux établies dans le cadre de la thermodynamique des milieux poreux ([15], [16], [17], [31]). Elle ouvrira par ailleurs la voie à la modélisation du comportement des géomatériaux gonflant pour lesquels il sera nécessaire d'introduire un tenseur de précontrainte non hydrostatique.

5.1 Comportement élastique à état initial naturel

On s'intéresse tout d'abord à la détermination du comportement élastique homogénéisé d'un matériau hétérogène à état initial *naturel* : en l'absence de chargement extérieur, le matériau n'est pas contraint. Les évolutions sont étudiées dans le cadre des transformations infinitésimales isothermes. Le comportement des constituants, supposés accolés parfaitement les uns aux autres, est élastique linéaire :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{z}}) = \mathbb{C}(\underline{\underline{z}}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{z}}) \quad (5.1)$$

La démarche micromécanique vise à déterminer par une méthode d'homogénéisation le comportement macroscopique d'un matériau en exploitant les informations disponibles à l'échelle inférieure, dite microscopique. On a déjà précisé dans la deuxième partie de ce

mémoire la notion de localisation des champs macroscopiques et les définitions de prises de moyenne sur un v.e.r. à partir desquelles on construit le schéma d'homogénéisation.

On détermine classiquement le comportement macroscopique à partir de la résolution d'un problème aux limites posé sur le v.e.r.. Les conditions aux limites, de type homogène, sont définies à l'aide du tenseur de déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}$ (option (a)), ou bien à l'aide du tenseur de contrainte macroscopique $\underline{\underline{\Sigma}}$ (option (b)). Les équations des problèmes (a) et (b) sont les suivantes :

$$\text{I. loi de comportement : } \left\{ \begin{array}{ll} \underline{\underline{\sigma}}(\underline{z}) = \mathbb{C}(\underline{z}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{z}) & \text{(a)} \\ \text{ou} & \\ \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{z}) = \mathbb{S}(\underline{z}) : \underline{\underline{\sigma}}(\underline{z}) & \text{(b)} \end{array} \right. \quad (\underline{z} \in \Omega)$$

$$\text{II. relation d'équilibre statique : } \underline{\text{div}} \underline{\underline{\sigma}}(\underline{z}) = \underline{0} \quad (\underline{z} \in \Omega)$$

$$\text{III. conditions aux limites : } \left\{ \begin{array}{ll} \underline{\underline{\xi}}(\underline{z}) = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{z} & \text{(a)} \quad (\underline{\underline{E}}, \text{ homogène}) \\ \text{ou} & \\ \underline{\underline{\sigma}}(\underline{z}) \cdot \underline{n} = \underline{\underline{\Sigma}} \cdot \underline{n} & \text{(b)} \quad (\underline{\underline{\Sigma}}, \text{ homogène}) \end{array} \right. \quad (\underline{z} \in \partial\Omega)$$

$$\text{IV. relation entre déplacement et déformation : } \underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{\text{grad}}}_z \underline{\underline{\xi}} + {}^T \underline{\underline{\text{grad}}}_z \underline{\underline{\xi}} \right)$$

Lorsque l'on adopte les conditions aux limites (III.(a)), on établit une relation de moyenne entre le tenseur de déformation macroscopique et le champ de déformation microscopique :

$$\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_{\Omega} \quad (5.2)$$

En revanche, dans le cadre des conditions aux limites (III.(b)), on obtient une relation de moyenne entre le tenseur de contrainte macroscopique et le champ de contrainte microscopique :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{\Omega} \quad (5.3)$$

On présente ci-dessous le raisonnement permettant d'aboutir à la formulation du comportement macroscopique à partir du problème du problème d'élasticité linéaire défini par (I.a)-(II)-(III.a)-(IV).

La résolution formelle du problème (a) repose sur le *principe de superposition* en vertu duquel la solution en déformation s'exprime linéairement en fonction de la déformation homogène appliquée sur la frontière du v.e.r. :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{z}) = \mathbb{A}(\underline{z}) : \underline{\underline{E}} \quad (5.4)$$

$\mathbb{A}(\underline{z})$ est un tenseur du quatrième ordre, appelé *tenseur de localisation*. Il permet le passage de la grandeur globale $\underline{\underline{E}}$ à son correspondant local $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{z})$. Ce tenseur possède une propriété remarquable, appelée encore *condition de cohérence* : sa moyenne sur le v.e.r. est égale à l'identité du quatrième ordre :

$$\langle \mathbb{A}(\underline{z}) \rangle_{\Omega} = \mathbb{I} \quad (5.5)$$

On obtient (5.5) en prenant la moyenne de (5.4) sur le v.e.r. et en utilisant (5.2).

N.B. : le tenseur $\mathbb{A}$ possède les symétries $A_{ijkl} = A_{jikl} = A_{jilk}$, mais pas la symétrie des couples (ij)(kl).

On définit la contrainte macroscopique $\underline{\underline{\Sigma}}$ comme la moyenne sur le v.e.r. $\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{\Omega}$ des efforts intérieurs.

A partir de (5.4), on est alors en mesure de déterminer le comportement élastique homogénéisé en prenant la moyenne de (I.(a)) sur le v.e.r. :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}}(\underline{z}) \rangle_{\Omega} = \langle \mathbb{C}(\underline{z}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{z}) \rangle_{\Omega} = \langle \mathbb{C}(\underline{z}) : \mathbb{A}(\underline{z}) : \underline{\underline{E}} \rangle_{\Omega} = \langle \mathbb{C}(\underline{z}) : \mathbb{A}(\underline{z}) \rangle_{\Omega} : \underline{\underline{E}} \quad (5.6)$$

soit encore :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}} \quad \text{avec :} \quad \mathbb{C}^{hom} = \langle \mathbb{C}(\underline{z}) : \mathbb{A}(\underline{z}) \rangle_{\Omega} \quad (5.7)$$

La loi de comportement macroscopique est donc élastique linéaire. La relation ci-dessus clarifie le lien entre les modules élastiques macroscopiques et microscopiques.

De toute évidence, ce résultat prend en défaut l'hypothèse qui consiste à définir les modules élastiques homogénéisés comme des moyennes des modules élastiques de chacun des constituants. En d'autres termes, la *loi des mélanges* ne saurait s'appliquer que dans des conditions très particulières comme celles, par exemple, où le tenseur de localisation s'identifie au tenseur de l'identité du quatrième ordre en tout point du v.e.r..

On trouve une relation analogue pour le tenseur des complaisances homogénéisées :

$$\mathbb{S}^{hom} = \langle \mathbb{S}(\underline{z}) : \mathbb{B}(\underline{z}) \rangle_{\Omega} \quad (5.8)$$

où $\mathbb{B}$, appelé *tenseur des concentrations de contraintes*, est l'homologue de $\mathbb{A}$ dans un problème en contraintes homogènes imposées (problème (b)).

A noter qu'une approche "énergétique" [126] propose une autre définition du comportement macroscopique sous la forme :

$$\begin{cases} \mathbb{C}^{hom} = \langle {}^T \mathbb{A}(\underline{z}) : \mathbb{C}(\underline{z}) : \mathbb{A}(\underline{z}) \rangle_{\Omega} \\ \mathbb{S}^{hom} = \langle {}^T \mathbb{B}(\underline{z}) : \mathbb{S}(\underline{z}) : \mathbb{B}(\underline{z}) \rangle_{\Omega} \end{cases} \quad (5.9)$$

N.B. : L'équivalence entre ces deux définitions ((5.7)-(5.8) et (5.9)) se démontre à l'aide du lemme de Hill [126].

On retiendra, de plus, que l'équivalence des approches en déformation homogène (problème (a)) et en contrainte homogène (problème (b)) est assurée lorsque la condition de séparation des échelles (cf. Partie I) est vérifiée.

5.2 Comportement élastique à état initial non-naturel

On se concentre désormais sur le comportement d'un matériau hétérogène pour lequel l'état initial est *non naturel*. Cette situation correspond à l'existence d'une déformation dite libre ("stress-free strain"), ou d'un état de contrainte initial en l'absence d'un chargement de nature mécanique. On pense naturellement au cas d'un chargement thermique capable de générer un champ de déformation additionnel d'origine thermique.

Par conséquent, la déformation totale $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{z})$ est la somme d'une contribution d'origine élastique, notée $\underline{\underline{\varepsilon}}^e(\underline{z})$, appelée naturellement *déformation élastique* et d'une contribution additionnelle, notée $\underline{\underline{\varepsilon}}^L(\underline{z})$, appelée *déformation libre*.

De manière duale, le champ de contrainte totale gère cette information supplémentaire en introduisant un champ de précontrainte, noté $\underline{\underline{\sigma}}^p(\underline{z})$ ¹.

Localement, le comportement mécanique d'un matériau hétérogène précontraint, où à

¹le champ de précontrainte n'est pas équilibré ($\text{div } \underline{\underline{\sigma}}^p \neq \underline{0}$)

déformation libre, peut finalement se mettre sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} (a) \quad \underline{\underline{\sigma}}(\underline{z}) = \mathbb{C}(\underline{z}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{z}) + \underline{\underline{\sigma}}^p(\underline{z}) \\ (b) \quad \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{z}) = \mathbb{S}(\underline{z}) : \underline{\underline{\sigma}}(\underline{z}) + \underline{\underline{\varepsilon}}^L(\underline{z}) \end{array} \right. \quad (5.10)$$

En utilisant le fait que les tenseurs des modules et des complaisances élastiques locaux sont l'inverse l'un de l'autre ($\mathbb{C}(\underline{z}) : \mathbb{S}(\underline{z}) = \mathbb{S}(\underline{z}) : \mathbb{C}(\underline{z}) = \mathbb{I}$), la combinaison de (5.10.a) et (5.10.b) aboutit à la relation entre les champs de précontrainte et de déformation libre :

$$\underline{\underline{\sigma}}^p = -\mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}^L \quad (\underline{\underline{\varepsilon}}^L = -\mathbb{S} : \underline{\underline{\sigma}}^p) \quad (5.11)$$

Il s'agit à présent de préciser le lien entre l'information locale sur la déformation libre, ou la précontrainte, et son correspondant à l'échelle supérieure. Pour cela, on exploite les résultats établis au paragraphe précédent dans le cadre de l'élasticité d'un matériau hétérogène dont l'état initial est *naturel*.

La linéarité du comportement offre la possibilité de simplifier la démarche : le problème (P) posé en conditions aux limites en déformation homogène sur la frontière du v.e.r. pour un matériau hétérogène précontraint se décompose en deux sous-problèmes (P') et (P'') (cf. figure 5.1). (P') correspond au problème élastique sans précontrainte soumis à une déformation macroscopique homogène. (P'') correspond au problème avec précontrainte de déformation macroscopique nulle.

La contrainte macroscopique est définie comme la moyenne des contraintes locales :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_{\Omega} = \langle \underline{\underline{\sigma}}' + \underline{\underline{\sigma}}'' \rangle_{\Omega} = \langle \underline{\underline{\sigma}}' \rangle_{\Omega} + \langle \underline{\underline{\sigma}}'' \rangle_{\Omega} \quad (5.12)$$

Le problème (P') fait référence aux résultats établis au paragraphe précédent où l'on a montré que :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}}' \rangle_{\Omega} = \langle \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}' \rangle_{\Omega} = \langle \mathbb{C} : \mathbb{A} \rangle_{\Omega} : \underline{\underline{E}} = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}} \quad (5.13)$$

D'après (5.12) et (5.13), les lois de comportement locales, exprimées en (5.10), se transcrivent à l'échelle macroscopique sous la forme :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\Sigma}}^p \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{\Sigma}}^p = \langle \underline{\underline{\sigma}}'' \rangle_{\Omega} \quad (5.14)$$

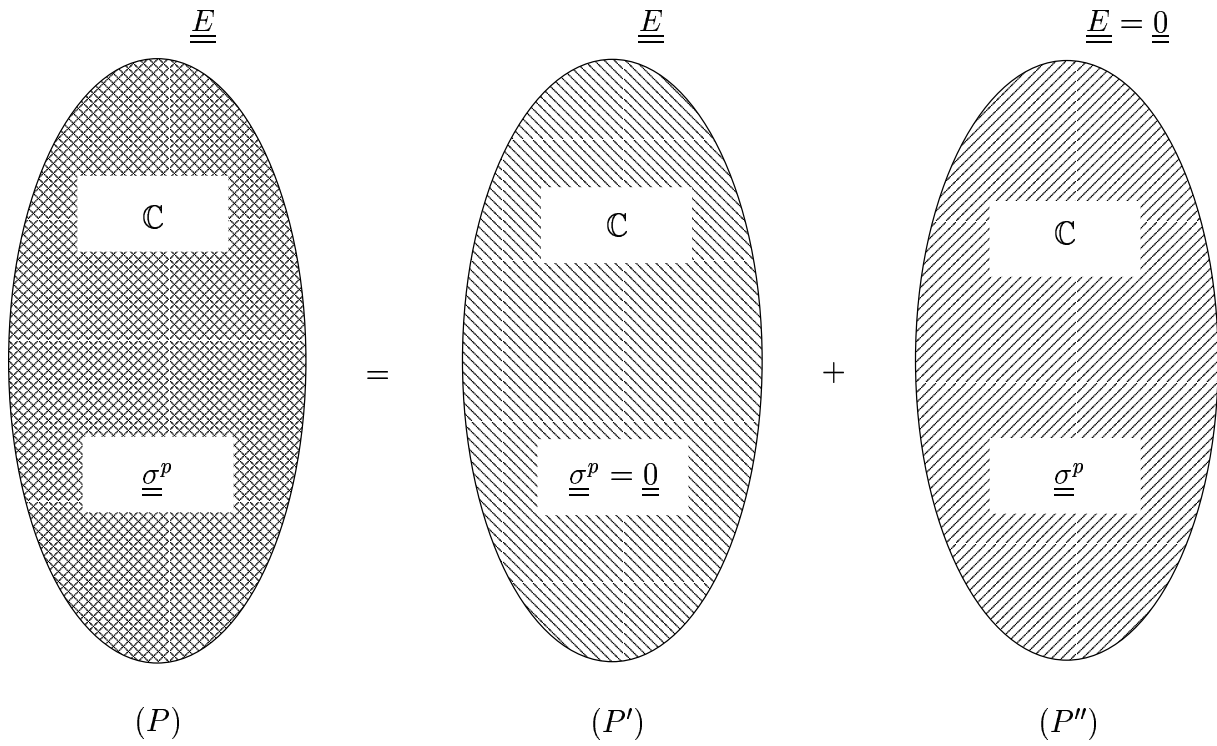


FIG. 5.1: décomposition du problème élastique : $(P) = (P') + (P'')$

$$\left\{ \begin{array}{l} (\underline{\underline{\sigma}}, \underline{\underline{\varepsilon}}) \\ \underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2}(\underline{\underline{\text{grad}}}_z \underline{\underline{\xi}} + {}^T \underline{\underline{\text{grad}}}_z \underline{\underline{\xi}}) \\ \underline{\underline{\text{div}}}_z \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{0}} \quad (\Omega) \\ \underline{\underline{\xi}} = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{z}} \quad (\partial\Omega) \\ \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \underline{\underline{E}} \end{array} \right. = \left\{ \begin{array}{l} (\underline{\underline{\sigma}}', \underline{\underline{\varepsilon}}' = \mathbb{A} : \underline{\underline{E}}) \\ \underline{\underline{\varepsilon}}' = \frac{1}{2}(\underline{\underline{\text{grad}}}_z \underline{\underline{\xi}}' + {}^T \underline{\underline{\text{grad}}}_z \underline{\underline{\xi}}') \\ \underline{\underline{\text{div}}}_z \underline{\underline{\sigma}}' = \underline{\underline{0}} \quad (\Omega) \\ \underline{\underline{\xi}}' = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{z}} \quad (\partial\Omega) \\ \langle \underline{\underline{\varepsilon}}' \rangle = \underline{\underline{E}} \end{array} \right. + \left\{ \begin{array}{l} (\underline{\underline{\sigma}}'', \underline{\underline{\varepsilon}}'') \\ \underline{\underline{\varepsilon}}'' = \frac{1}{2}(\underline{\underline{\text{grad}}}_z \underline{\underline{\xi}}'' + {}^T \underline{\underline{\text{grad}}}_z \underline{\underline{\xi}}'') \\ \underline{\underline{\text{div}}}_z \underline{\underline{\sigma}}'' = \underline{\underline{0}} \quad (\Omega) \\ \underline{\underline{\xi}}'' = \underline{\underline{0}} \quad (\partial\Omega) \\ \langle \underline{\underline{\varepsilon}}'' \rangle = \underline{\underline{0}} \end{array} \right. \quad (5.15)$$

Pour établir la connexion entre les précontraintes locale et globale, à partir de l'expression obtenue en (5.14), il est fructueux de contracter chaque membre par la moyenne sur le v.e.r. du tenseur des déformations associé au problème (P') :

$$\langle \underline{\underline{\varepsilon}}' \rangle_{\Omega} : \underline{\underline{\Sigma}}^p = \langle \underline{\underline{\varepsilon}}' \rangle_{\Omega} : \langle \underline{\underline{\sigma}}'' \rangle_{\Omega} \quad (5.16)$$

En effet, le tenseur des déformations $\underline{\underline{\varepsilon}}'$ étant cinématiquement admissible avec la condition aux limites homogène en déformation dans le problème (P') et le tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}''$ étant équilibré, le lemme de Hill appliqué au couple $(\underline{\underline{\varepsilon}}', \underline{\underline{\sigma}}'')$ permet, en exploitant la relation $:\underline{\underline{\varepsilon}}' >_{\Omega} = \underline{\underline{E}}$, d'aboutir à la formulation suivante :

$$\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}^p = \underline{\underline{\varepsilon}}' : \underline{\underline{\sigma}}'' >_{\Omega} = \underline{\underline{\mathbb{A}}} : \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\sigma}}'' >_{\Omega} = \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\sigma}}'' : \underline{\underline{\mathbb{A}}} >_{\Omega} \quad (5.17)$$

D'après le problème (P''), le champ de contrainte $\underline{\underline{\sigma}}''$ peut se mettre sous la forme :

$$\underline{\underline{\sigma}}'' = \underline{\underline{\sigma}}^p + \underline{\underline{\mathbb{C}}} : \underline{\underline{\varepsilon}}'' \quad (5.18)$$

Si l'on applique (5.18) dans (5.17), on obtient :

$$\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}^p = \underline{\underline{\mathbb{A}}} : \underline{\underline{E}} : (\underline{\underline{\sigma}}^p + \underline{\underline{\mathbb{C}}} : \underline{\underline{\varepsilon}}'') >_{\Omega} = \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\sigma}}^p >_{\Omega} + \underline{\underline{\mathbb{A}}} : \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\mathbb{C}}} : \underline{\underline{\varepsilon}}'' >_{\Omega} \quad (5.19)$$

Remarquons alors que le deuxième terme de (5.19) s'écrit encore :

$$\underline{\underline{\mathbb{A}}} : \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\mathbb{C}}} : \underline{\underline{\varepsilon}}'' >_{\Omega} = \underline{\underline{\varepsilon}}'' : \underbrace{\underline{\underline{\mathbb{C}}} : \underline{\underline{\mathbb{A}}} : \underline{\underline{E}}}_{\underline{\underline{\sigma}}'} >_{\Omega} = \underline{\underline{\varepsilon}}'' : \underline{\underline{\sigma}}' >_{\Omega} \quad (5.20)$$

Pour les mêmes raisons que précédemment, le lemme de Hill s'applique au couple $(\underline{\underline{\varepsilon}}'', \underline{\underline{\sigma}}')$, si bien que :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}'' : \underline{\underline{\sigma}}' >_{\Omega} = \underbrace{\underline{\underline{\varepsilon}}'' >_{\Omega}}_{=0} : \underline{\underline{\sigma}}' >_{\Omega} = 0 \quad (5.21)$$

Finalement, en tenant compte de (5.20) et (5.21), (5.19) s'écrit :

$$\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\Sigma}}^p = \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\sigma}}^p >_{\Omega} \quad (5.22)$$

et le résultat recherché se met sous la forme :

$$\underline{\underline{\Sigma}}^p = \underline{\underline{\mathbb{A}}} : \underline{\underline{\sigma}}^p >_{\Omega} = \underline{\underline{\sigma}}^p : \underline{\underline{\mathbb{A}}} >_{\Omega} \quad (5.23)$$

Ce résultat est classiquement attribué à Levin [83], qui, dans le cadre de la thermoélasticité, a obtenu une expression analogue au sujet de la détermination des coefficients dilatométriques homogénéisés.

Chapitre 6

Approche micromécanique en poroélasticité linéaire

Sommaire

6.1	Introduction	143
6.2	Homogénéisation du comportement poroélastique linéaire . .	144
6.2.1	équations d'état de la poroélasticité linéaire	144
6.2.2	approche alternative des équations de la poroélasticité linéaire .	147
6.2.3	extension au cas non saturé	149

6.1 Introduction

Historiquement, la modélisation du comportement des milieux poreux saturés s’est d’abord développée à une échelle où le volume élémentaire est décrit comme la superposition de deux particules, l’une de fluide, l’autre dite de squelette. Nous l’appellerons “échelle macroscopique” dans la suite. Etant superposées, les deux particules macroscopiques de fluide et de squelette sont indiscernables géométriquement, c’est-à-dire qu’elles sont repérées par le même vecteur-position. C’est à cette échelle que Biot ([15], [16], [17]) a mis en place un cadre thermodynamique dans lequel il a formulé la théorie de la poroélasticité.

Le modèle linéaire est devenu très familier au monde de la Mécanique des Roches, notamment dans la perspective des applications au génie pétrolier. C’est dans ce domaine que s’est développé le souci de relier les constantes tensorielles définissant le comportement macroscopique du milieu poreux aux caractéristiques mécaniques de la matrice solide constituant la particule macroscopique de squelette. A partir de données sur la géométrie de l’espace poreux et sur les propriétés mécaniques de cette matrice, la question est de déterminer celles du squelette. Ces informations géométriques et mécaniques relèvent d’une échelle d’espace plus fine à laquelle les phases solide et fluide occupent des domaines disjoints. Nous l’appellerons “échelle microscopique”.

Les travaux de Auriault et Sanchez-Palencia [54] ont apporté une réponse quantitative à cette problématique avec les outils de l’homogénéisation périodique. Le présent chapitre se préoccupe du cas d’un milieu poreux à microstructure désordonnée.

Une approche macroscopique ne peut trouver en elle-même les réponses aux questions posées sur l’influence des caractéristiques microstructurelles sur le comportement observé à l’échelle de la structure. En revanche, à partir d’une hypothèse sur l’origine du comportement à l’échelle microscopique, l’approche micromécanique apporte des réponses précises, susceptibles d’être confrontées avec l’expérience et d’orienter la recherche expérimentale. La poroélasticité linéaire se présente comme une extension du problème d’élasticité linéaire des matériaux hétérogènes dont l’état initial est *non naturel*. Dans cet esprit, la présence du fluide, dont la pression représente l’action mécanique sur la matrice solide, est gérée par l’introduction d’une précontrainte. On adapte alors la démarche développée au paragraphe précédent.

On réserve comme d’habitude les lettres minuscules (resp. majuscules) aux grandeurs physiques définies à l’échelle microscopique (resp. macroscopique). Dans la suite, la configuration de référence pour le calcul des déformations est celle de l’état naturel (contrainte macroscopique totale et pression de pore nulles).

6.2 Homogénéisation du comportement poroélastique linéaire

On s'intéresse à la situation où un milieu poreux est constitué par un solide élastique linéaire dont le tenseur des modules élastiques est noté $\mathbb{C}^s$. On applique les outils de la micromécanique au milieu poreux en supposant que le problème d'homogénéisation est linéaire, ce qui exclut la prise en compte d'éventuelles non linéarités géométriques.

On note Ω le v.e.r. de milieu poreux, Ω_s la partie solide et Ω_f l'espace poreux saturé par un unique fluide. Pour simplifier, la frontière de Ω est supposée tracée dans le solide. De ce fait, la frontière de Ω_s se compose de la frontière $\partial\Omega$ du v.e.r. et de l'interface fluide-solide qui n'est autre que $\partial\Omega_f$. ϕ désigne la fraction volumique $|\Omega_f| / |\Omega_o|$ de l'espace poreux, rapportée au volume total initial, c'est-à-dire la porosité dite *lagrangienne*.

Le chargement qui s'exerce sur le solide est caractérisé par la déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}$ et la pression p du fluide. $\underline{\xi}$, $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{\sigma}}$ désignent le déplacement, la déformation et la contrainte solutions du problème élastique défini dans Ω_s par $\underline{\underline{E}}$ et p :

$$\partial\Omega_f : \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n} = -p \underline{n} \ ; \ \partial\Omega : \underline{\xi}(\underline{z}) = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{z} \quad (6.1)$$

On convient de prolonger $\underline{\underline{\sigma}}$ par $-p\underline{\underline{\delta}}$ dans Ω_f et d'y prolonger $\underline{\xi}$ par continuité. Désormais, on considère donc $\underline{\underline{\sigma}}$ et $\underline{\xi}$ comme des champs définis sur Ω . L'idée consiste à traiter le solide et le fluide de façon symétrique en écrivant en tout point du v.e.r. -solide ou fluide- le tenseur des contraintes sous la forme suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}} + \underline{\underline{\sigma}}^p \quad \text{avec} \quad \mathbb{C} = \begin{cases} \mathbb{C}^s & \text{dans } \Omega_s \\ 0 & \text{dans } \Omega_f \end{cases} \quad \underline{\underline{\sigma}}^p = \begin{cases} 0 & \text{dans } \Omega_s \\ -p\underline{\underline{\delta}} & \text{dans } \Omega_f \end{cases} \quad (6.2)$$

Le v.e.r. apparaît, par conséquent, comme une structure hétérogène tant du point de vue des valeurs locales de l'élasticité que de la précontrainte.

6.2.1 équations d'état de la poroélasticité linéaire

Le problème étant linéaire, on décompose le chargement défini dans Ω par $\underline{\underline{E}}$ et p en deux : $\underline{\xi}'$, $\underline{\underline{\varepsilon}}'$ et $\underline{\underline{\sigma}}'$ (resp. $\underline{\xi}''$, $\underline{\underline{\varepsilon}}''$ et $\underline{\underline{\sigma}}''$) désignent le déplacement, la déformation et la contrainte solutions dans Ω du problème défini par $\underline{\underline{E}}$ et $p = 0$ (resp. p et $\underline{\underline{E}} = \underline{\underline{0}}$). Conformément à (6.2), $\underline{\underline{\sigma}}'$ et $\underline{\underline{\sigma}}''$ sont respectivement égaux à 0 et $-p\underline{\underline{\delta}}$ dans Ω_f . $\underline{\xi}'$ et $\underline{\xi}''$ sont définis de façon unique dans Ω_s et prolongés par continuité dans Ω_f .

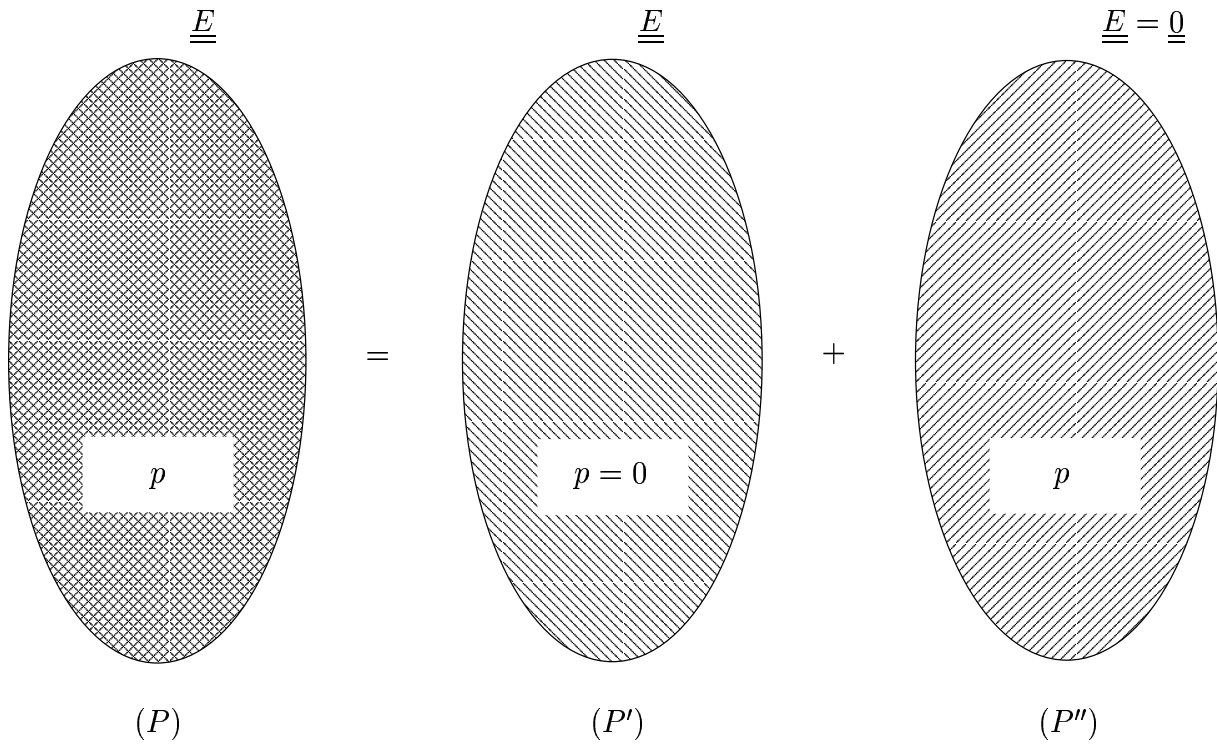


FIG. 6.1: décomposition du problème poroélastique : $(P) = (P') + (P'')$

On note $\mathbb{A}$ le champ de tenseurs de localisation de la déformation défini sur Ω dans le problème $(\underline{\underline{E}}, p = 0)$. Il est tel que $\underline{\underline{\varepsilon}}' = \mathbb{A} : \underline{\underline{E}}$. On en déduit la valeur de la contrainte macroscopique dans ce problème¹ :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}}' \rangle = (1 - \phi) \langle \underline{\underline{\sigma}}' \rangle_s = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}} \quad \text{avec} \quad \mathbb{C}^{hom} = (1 - \phi) \mathbb{C}^s : \langle \mathbb{A} \rangle_s \quad (6.3)$$

Par ailleurs, la solution du problème $(\underline{\underline{E}} = \underline{\underline{0}}, p)$ est proportionnelle à la pression p du fluide, de sorte qu'il existe un tenseur $\underline{\underline{B}}$ tel que $\langle \underline{\underline{\sigma}}'' \rangle = -p \underline{\underline{B}}$:

$$\langle \underline{\underline{\sigma}}'' \rangle = -p \underline{\underline{B}} ; \quad (1 - \phi) \langle \underline{\underline{\sigma}}'' \rangle_s = p (\phi \underline{\underline{\delta}} - \underline{\underline{B}}) \quad (6.4)$$

La contrainte macroscopique $\underline{\underline{\Sigma}}$ est déduite de (6.3) et (6.4) :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}} - p \underline{\underline{B}} \quad (6.5)$$

¹ $\langle . \rangle$, $\langle . \rangle_s$, et $\langle . \rangle_f$ désignent les moyennes prises sur Ω , Ω_s et Ω_f respectivement

Pour déterminer la valeur de $\underline{\underline{B}}$, on applique (5.23) dont il résulte :

$$-p \underline{\underline{B}} = \langle \underline{\underline{\sigma}}^p : \mathbb{A} \rangle \Rightarrow \underline{\underline{B}} = \phi \underline{\underline{\delta}} : \langle \mathbb{A} \rangle_f \quad (6.6)$$

En utilisant (5.5) et (6.3), on peut réécrire (6.6) de la façon suivante :

$$\underline{\underline{B}} = \underline{\underline{\delta}} : (\mathbb{I} - (1 - \phi) \langle \mathbb{A} \rangle_s) = \underline{\underline{\delta}} : (\mathbb{I} - \mathbb{C}^{s-1} : \mathbb{C}^{hom}) \quad (6.7)$$

Dans le cas particulier d'un comportement macroscopique isotrope (modules de compression et de cisaillement macroscopiques K^{hom} et μ^{hom}) et d'un comportement isotrope du solide (modules de compression et de cisaillement K^s et μ^s), (6.7) prend la forme classique suivante :

$$\underline{\underline{B}} = b \underline{\underline{\delta}} \quad \text{avec} \quad b = 1 - \frac{K^{hom}}{K^s} \quad (6.8)$$

(6.7) constitue la généralisation de la formule de Biot à des comportements locaux et globaux anisotropes.

La forme isotrope de (6.5) est :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = 2\mu^{hom} \underline{\underline{E}}_d + K^{hom} (tr \underline{\underline{E}}) \underline{\underline{\delta}} - b p \underline{\underline{\delta}} \quad (6.9)$$

où l'on a noté $\underline{\underline{E}}_d$ la partie déviatorique de $\underline{\underline{E}}$.

La variation du volume de l'espace poreux fait l'objet de la seconde équation d'état macroscopique :

$$\phi - \phi_o = \phi \underline{\underline{\delta}} : \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_f = \phi \underline{\underline{\delta}} : (\langle \underline{\underline{\varepsilon}}' \rangle_f + \langle \underline{\underline{\varepsilon}}'' \rangle_f) \quad (6.10)$$

D'une part, on déduit de (6.6) que :

$$\phi \underline{\underline{\delta}} : \langle \underline{\underline{\varepsilon}}' \rangle_f = \phi \underline{\underline{\delta}} : \langle \mathbb{A} \rangle_f : \underline{\underline{E}} = \underline{\underline{B}} : \underline{\underline{E}} \quad (6.11)$$

D'autre part, compte tenu de la condition $\langle \underline{\underline{\varepsilon}}'' \rangle = \underline{\underline{0}}$ (cf. 5.15), (6.4) montre que :

$$\phi \underline{\underline{\delta}} : \langle \underline{\underline{\varepsilon}}'' \rangle_f = -(1 - \phi) \underline{\underline{\delta}} : \langle \underline{\underline{\varepsilon}}'' \rangle_s = -(1 - \phi) \underline{\underline{\delta}} : \mathbb{C}^{s-1} : \langle \underline{\underline{\sigma}}'' \rangle_s = \frac{p}{M} \quad (6.12)$$

avec :

$$\frac{1}{M} = \underline{\underline{\delta}} : \mathbb{C}^{s-1} : (\underline{\underline{B}} - \phi \underline{\underline{\delta}}) \quad (6.13)$$

A côté de (6.5), la seconde équation d'état de la poroélasticité linéaire s'écrit donc :

$$\phi - \phi_o = \underline{\underline{B}} : \underline{\underline{E}} + \frac{p}{M} \quad (6.14)$$

Notons d'après (6.13) que dans le cas de comportements macroscopique et microscopique isotropes, le coefficient M s'exprime de la façon suivante :

$$\frac{1}{M} = \frac{b - \phi}{K^s} \quad (6.15)$$

Notons encore la forme isotrope de (6.14) :

$$\phi - \phi_o = b \operatorname{tr} \underline{\underline{E}} + \frac{p}{M} \quad (6.16)$$

6.2.2 approche alternative des équations de la poroélasticité linéaire

Nous examinons maintenant une approche alternative des équations d'état qui s'inscrit dans l'esprit des méthodes d'estimations.

Considérons à nouveau un milieu saturé par un fluide à la pression p . Par application directe de la règle de moyenne sur les contraintes, on trouve :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle = (1 - \phi) \mathbb{C}^s : \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_s - p \phi \underline{\underline{\delta}} \quad (6.17)$$

Le problème est donc d'estimer $\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_s$. En adoptant le schéma classique, on pose $\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_s = \underline{\underline{E}}^0$ et l'on estime $\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_f$ comme la déformation uniforme qui s'établit dans un ellipsoïde représentant la morphologie de la phase f , soumis à une pression interne p , placé dans un milieu infini d'élasticité $\mathbb{C}^s$, avec la déformation $\underline{\underline{E}}^0$ à l'infini.

La solution de ce problème est obtenue classiquement à partir de celle du problème

d'Eshelby généralisé :

$$\begin{cases} <\underline{\underline{\varepsilon}}>_f = (\mathbb{I} - \mathbb{S}_f)^{-1} : (\underline{\underline{E}}^0 + p \mathbb{S}_f : \mathbb{C}^{s-1} : \underline{\underline{\delta}}) \\ <\underline{\underline{\varepsilon}}>_s = \underline{\underline{E}}^0 \end{cases} \quad (6.18)$$

où $\mathbb{S}_f$ est le tenseur d'Eshelby relatif à la forme de l'ellipsoïde considéré pour représenter la phase f et à l'élasticité du solide. La condition $<\underline{\underline{\varepsilon}}> = \underline{\underline{E}}$ permet de déterminer $\underline{\underline{E}}^0$:

$$\phi <\underline{\underline{\varepsilon}}>_f + (1 - \phi) <\underline{\underline{\varepsilon}}>_s = \underline{\underline{E}} \Rightarrow \quad (6.19)$$

$$\underline{\underline{E}}^0 = (\phi (\mathbb{I} - \mathbb{S}_f)^{-1} + (1 - \phi) \mathbb{I})^{-1} : (\underline{\underline{E}} - p \phi (\mathbb{I} - \mathbb{S}_f)^{-1} : \mathbb{S}_f : \mathbb{C}^{s-1} : \underline{\underline{\delta}})$$

La relation d'homogénéisation donnant $\mathbb{C}^{hom}$ s'écrit ici :

$$\mathbb{C}^{hom} = (1 - \phi) \mathbb{C}^s : (\phi (\mathbb{I} - \mathbb{S}_f)^{-1} + (1 - \phi) \mathbb{I})^{-1} \quad (6.20)$$

dont on tire :

$$\phi (\mathbb{I} - \mathbb{S}_f)^{-1} = (1 - \phi) \mathbb{S}^{hom} : \mathbb{C}^s - (1 - \phi) \mathbb{I} \quad (6.21)$$

Par ailleurs, il est facile de voir que :

$$(\mathbb{I} - \mathbb{S}_f)^{-1} : \mathbb{S}_f = (\mathbb{I} - \mathbb{S}_f)^{-1} - \mathbb{I} \quad (6.22)$$

En combinant (6.21) et (6.22), on obtient :

$$\phi (\mathbb{I} - \mathbb{S}_f)^{-1} : \mathbb{S}_f = (1 - \phi) \mathbb{S}^{hom} : \mathbb{C}^s - \mathbb{I} \quad (6.23)$$

En reportant (6.23) dans l'expression de $\underline{\underline{E}}^0$, on a donc :

$$<\underline{\underline{\varepsilon}}>_s = \underline{\underline{E}}^0 = (\phi (\mathbb{I} - \mathbb{S}_f)^{-1} + (1 - \phi) \mathbb{I})^{-1} : (\underline{\underline{E}} - p [(1 - \phi) \mathbb{S}^{hom} : \underline{\underline{\delta}} - \mathbb{C}^{s-1} : \underline{\underline{\delta}}]) \quad (6.24)$$

qu'il reste à introduire dans (6.17). Compte tenu de (6.20), il vient :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}} - p (\underline{\underline{\delta}} - \mathbb{C}^{hom} : \mathbb{C}^{s-1} : \underline{\underline{\delta}}) = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}} - p \underline{\underline{B}} \quad (6.25)$$

où $\underline{\underline{B}}$ a la même expression qu'en (6.7).

Cette approche confirme donc le résultat obtenu antérieurement à partir du théorème de Levin. Notons que l'approche de la section 6.2.1 a le mérite de ne pas être sujette aux critiques classiques dont peuvent faire l'objet les méthodes d'estimations, et qui s'appliquent donc à la démarche qui vient d'être exposée.

6.2.3 extension au cas non saturé

Les équations de la poroélasticité linéaire peuvent être généralisées sans peine dans le cas où le milieu poreux Ω_f se décompose en une partition $\Omega_{f_1} \cup \Omega_{f_2}$, l'espace Ω_{f_1} étant saturé par un fluide à la pression p et l'espace Ω_{f_2} étant vide. Les deux domaines Ω_{f_1} et Ω_{f_2} ne communiquent pas.

Comme en 6.2, on écrit le comportement local sous la forme "affine" suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}} + \underline{\underline{\sigma}}^p \quad \text{avec} \quad \mathbb{C} = \begin{cases} \mathbb{C}^s & \text{dans } \Omega_s \\ 0 & \text{dans } \Omega_{f_1} \\ 0 & \text{dans } \Omega_{f_2} \end{cases} \quad \underline{\underline{\sigma}}^p = \begin{cases} 0 & \text{dans } \Omega_s \\ -p \underline{\underline{\delta}} & \text{dans } \Omega_{f_1} \\ 0 & \text{dans } \Omega_{f_2} \end{cases} \quad (6.26)$$

Le théorème de Levin autorise à écrire :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\Sigma}}^p \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{\Sigma}}^p = \langle \underline{\underline{\sigma}}^p : \mathbb{A} \rangle \quad (6.27)$$

On a donc, d'après (6.26) et (6.27) :

$$\underline{\underline{\Sigma}}^p = -p \phi_1 \underline{\underline{\delta}} : \langle \mathbb{A} \rangle_{f_1} \quad (6.28)$$

où ϕ_i ($i=1,2$) désigne la fraction volumique de Ω_{f_i} avec $\phi = \phi_1 + \phi_2$. L'équation d'état en contraintes prend donc la forme suivante :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}} - \underline{\underline{B}}_1 p \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{B}}_1 = \phi_1 \underline{\underline{\delta}} : \langle \mathbb{A} \rangle_{f_1} \quad (6.29)$$

$\mathbb{C}^{hom}$ est, comme précédemment, le tenseur des modules d'élasticité drainée. La situation où les morphologies des pores des familles Ω_{f_1} et Ω_{f_2} sont identiques constitue un cas particulier intéressant. Avec cette hypothèse, il vient en effet :

$$\langle \mathbb{A} \rangle_{f_1} = \langle \mathbb{A} \rangle_{f_2} = \langle \mathbb{A} \rangle_f \quad (6.30)$$

La condition $\langle \mathbb{A} \rangle = \mathbb{I}$ s'écrit donc :

$$(1 - \phi) \langle \mathbb{A} \rangle_s + \phi \langle \mathbb{A} \rangle_f = \mathbb{I} \quad (6.31)$$

On obtient donc d'après (6.7) :

$$\underline{\underline{B}}_1 = \frac{\phi_1}{\phi} \underline{\underline{\delta}} : (\mathbb{I} - (1 - \phi) \langle \mathbb{A} \rangle_s) = \frac{\phi_1}{\phi} \underline{\underline{B}} \quad (6.32)$$

de sorte que l'équation d'état en contrainte devient :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}} - p \frac{\phi_1}{\phi} \underline{\underline{B}} \quad (6.33)$$

On remarque que ϕ_1/ϕ s'apparente à un degré de saturation de l'espace poreux et que (6.33) fait apparaître la contrainte effective de Bishop $\underline{\underline{\Sigma}} + p(\phi_1/\phi) \underline{\underline{B}}$ [58].

Envisageons le cas particulier où le domaine Ω_{f_1} est une famille de fissures parallèles que l'on peut représenter par des ellipsoïdes aplatis. On note $\mathbb{S}_1$ le tenseur d'Eshelby correspondant.

Si l'on adopte l'estimation diluée, il est possible d'estimer la moyenne du tenseur de localisation dans Ω_{f_1} à l'aide du tenseur d'Eshelby $\mathbb{S}_1$:

$$\langle \mathbb{A} \rangle_{f_1} = (\mathbb{I} - \mathbb{S}_1)^{-1} \quad (6.34)$$

Le tenseur $\underline{\underline{B}}_1$ prend donc la forme suivante :

$$\underline{\underline{B}}_1 = \phi_1 \underline{\underline{\delta}} : \langle \mathbb{A} \rangle_{f_1} = \phi_1 \underline{\underline{\delta}} : (\mathbb{I} - \mathbb{S}_1)^{-1} \quad (6.35)$$

Par ailleurs, rappelons que ce schéma néglige l'interaction mécanique entre les pores des familles Ω_{f_1} et Ω_{f_2} . Pour cette raison, il permet d'approcher $\mathbb{C}^{hom}$ de la façon suivante :

$$\mathbb{C}^{hom} = \mathbb{C}^s : (\mathbb{I} - \phi_1 \langle \mathbb{A} \rangle_{f_1} - \phi_2 \langle \mathbb{A} \rangle_{f_2}) \approx \mathbb{C}_o^{hom} : (\mathbb{I} - \phi_1 \langle \mathbb{A} \rangle_{f_1}) \quad (6.36)$$

où l'on a posé :

$$\mathbb{C}_o^{hom} = \mathbb{C}^s : (\mathbb{I} - \phi_2 \langle \mathbb{A} \rangle_{f_2}) \quad (6.37)$$

$\mathbb{C}_o^{hom}$ représente le tenseur des modules d'élasticité d'un milieu poreux fictif dont la matrice solide est identique à celle du milieu réel (élasticité $\mathbb{C}^s$), et dont l'espace poreux, *dépourvu de fissures*, est réduit au domaine Ω_{f_2} . Ce milieu poreux fictif sera à ce titre appelé *milieu poreux sain*. En comparant (6.35) et (6.36), on observe que :

$$\underline{\underline{B}}_1 = \underline{\underline{\delta}} : (\mathbb{I} - \mathbb{C}_o^{hom}{}^{-1} : \mathbb{C}^{hom}) = (\mathbb{I} - \mathbb{C}^{hom} : \mathbb{C}_o^{hom}{}^{-1}) : \underline{\underline{\delta}} \quad (6.38)$$

En ce qui concerne le calcul de $\mathbb{C}^{hom}$ et de $\underline{\underline{B}}_1$, les relations (6.36) et (6.38) indiquent que tout se passe comme si les fissures (saturées sous pression) étaient incluses dans une matrice solide homogène fictive d'élasticité $\mathbb{C}_o^{hom}$.

Quatrième partie

**APPLICATION AU GONFLEMENT
DES ARGILES**

Chapitre 7

Introduction

Sommaire

7.1	Le gonflement des argiles	157
7.1.1	un aperçu sur la microstructure des argiles	157
7.1.2	le phénomène d'hydratation	160
7.1.3	le gonflement osmotique	161
7.1.4	bilan	162
7.2	Manifestation du gonflement osmotique des argiles	163

Lorsque l'on s'intéresse au comportement des sols sous sollicitations mécaniques, il est d'usage de les classer dans deux catégories principales : les sols "grenus" et les sols "fins". Ils diffèrent tout particulièrement par la nature de leur interaction avec l'eau. Les sols grenus possèdent la particularité de ne pas réagir avec l'eau interstitielle, tout au moins aux échelles de temps usuelles, si bien que leur interaction avec celle-ci est purement mécanique.

Pour les sols fins, constitués en grande partie par des particules d'argile, le comportement mécanique dépend de la teneur en eau et de la composition chimique de l'eau interstitielle. Au delà des propriétés mécaniques des constituants solides, il existe donc pour ces matériaux des facteurs physico-chimiques intervenant dans la détermination de leur comportement. Ces interactions physico-chimiques entre les particules d'argile et l'eau interstitielle conduisent à l'apparition d'une force répulsive entre les particules pouvant s'étendre sur des distances considérables (à l'échelle de la microstructure).

7.1 Le gonflement des argiles

Le "gonflement des argiles" est une thématique qui anime les débats de la communauté scientifique depuis de nombreuses années. De fait, ce comportement particulier des matériaux argileux, et plus généralement de tous les géomatériaux constitués au moins en partie d'argiles (présentes en abondance dans la lithosphère), a été largement étudié sur le plan expérimental. De nombreux auteurs ([124], [109], [110], [95]) s'accordent à associer le gonflement des argiles à deux principaux phénomènes : le gonflement dû à l'hydratation des cations échangeables et le gonflement d'origine osmotique lié à la concentration des sels en solution. On constate que ces deux manifestations du gonflement, d'origine différente, sont étroitement liées à la microstructure de l'argile. En raison de la grande diversité des microstructures d'argiles rencontrées dans la pratique, il convient de préciser la nature de ces microstructures. Dans cet esprit, on commence tout d'abord par présenter la microstructure des 3 principales familles d'argiles rencontrées dans le sous-sol : les Kaolinites, les Montmorillonites et les Illites. On peut estimer que le comportement des autres types d'argiles occupe une position intermédiaire vis-à-vis des comportements présentés.

On s'attache dans la suite à la description du comportement gonflant de ces trois types d'argile.

7.1.1 un aperçu sur la microstructure des argiles

Les argiles rencontrées dans la pratique sont des matériaux poreux dont la phase solide, le minéral argileux, est constituée de particules en forme de “plaques”.

Ces particules d’argile, sont formées par des empilements de feuillets argileux, liés entre eux par des forces de liaison. Le gonflement des argiles est précisément contrôlé par l’intensité de ces liaisons inter-feuillets. Une première étape dans l’analyse du comportement gonflant des argiles consiste donc à préciser la nature de ces liaisons pour chacune des 3 familles d’argiles considérées.

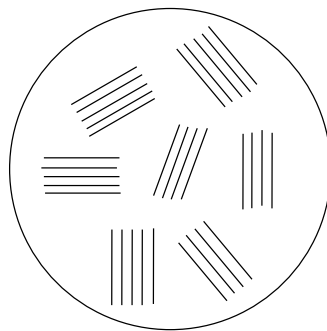
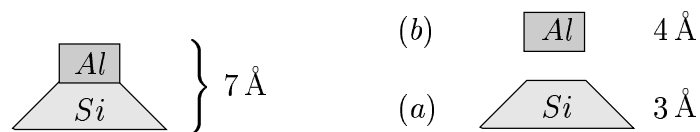


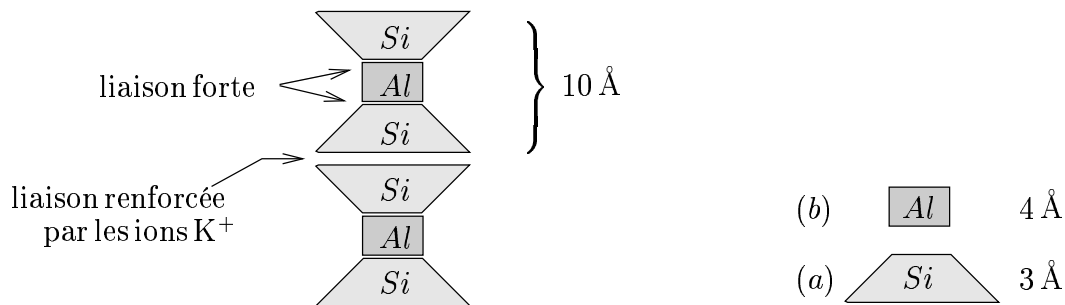
FIG. 7.1: schématisation d’une argile

1. Pour les argiles de la classe des Kaolinites, dites “peu gonflantes”, une particule d’argile est formée d’un empilement de plusieurs feuillets, ayant chacun une épaisseur approximativement égale à 7 Å (voir schéma ci-dessous), véritablement soudés les uns aux autres sous l’action de forces de liaison très importantes.



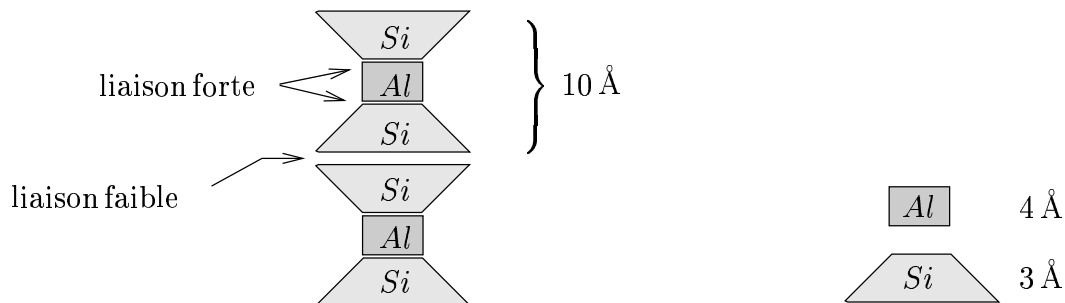
N.B. : un feuillet élémentaire est constitué par l’association de deux unités structurales de base : (a) le tétrèdre silicium et (b) l’octaèdre aluminium (ou magnésium).

2. Pour les argiles de la classe des Illites, potentiellement gonflantes, les liaisons entre les feuillets sont moins fortes. Toutefois, la présence d’ions potassium K^+ entre les feuillets contribue à renforcer ces liaisons si bien que le comportement des Illites se rapproche de celui des Kaolinites. Leur géométrie, plus aplatie, préserve néanmoins une tendance au gonflement.



N.B. : un feuillet élémentaire est constitué par l'association de trois unités structurales de base : (a) le tétraèdre silicium, (b) l'octaèdre aluminium (ou magnésium) et un autre (a) tétraèdre silicium.

3. Pour les argiles de la classe des smectites (Montmorillonite essentiellement), potentiellement très gonflantes, les liaisons entre les feuillets sont nettement moins fortes. En effet, le développement de substitutions isomorphes¹ (Mg^{2+} pour Al^{3+}) à la surface de ces feuillets entraîne un excès de charges négatives qui se fixent à la surface des feuillets. Afin de rétablir l'électroneutralité, les cations de l'espace interfeuillet, dits cations échangeables, se fixent à la surface des feuillets et assurent ainsi la liaison entre les feuillets. L'intensité de ces liaisons dépend à la fois de la valence des cations et du degré d'électronégativité des surfaces.



N.B. : le feuillet élémentaire est identique à celui observé chez les argiles de la famille des Illites.

A la lumière de cette brève présentation, les différentes classes d'argile se distinguent, au niveau de la microstructure, par l'intensité des forces de liaison entre les feuillets des particules d'argile. Cette différence est en fait à la base de la différence de comportement gonflant entre ces trois familles d'argile. En effet, l'intensité du gonflement est principalement contrôlée par la capacité du phénomène d'hydratation à "casser" les liaisons entre

¹mécanismes chimiques par lesquels les cations naturellement présents à la surface d'une particule sont remplacés par des cations d'une valence inférieure. Il en résulte une charge nette négative à la base du phénomène de gonflement osmotique

les feuillets des particules d'argile.

7.1.2 le phénomène d'hydratation

On se place dans la situation où l'argile étudiée est initialement sèche, ou partiellement saturée. La première manifestation du comportement gonflant d'une argile est associée à l'hydratation des cations échangeables adsorbés. Les charges électriques négatives à la surface des particules attirent les “parties positives” des molécules d'eau de telle sorte que celles-ci se fixent à la surface pour former jusqu'à 4 couches de molécules d'eau.

1. Pour les Kaolinites, les forces de liaison inter-feuillets sont nettement supérieures aux forces d'hydratation en raison de l'absence de cations adsorbés entre les feuillets argileux. En d'autres termes, l'eau ne pénètre pas à l'intérieur de l'espace inter-feuillets si bien que l'épaisseur des couches d'eau séparant les feuillets est inchangée. L'hydratation des cations échangeables se développe néanmoins sur les faces externes des particules, la structure lamellaire étant préservée.
2. Pour les Illites, en raison de la présence des ions K^+ , le comportement est analogue à celui des Kaolinites. Seule la surface externe des particules est hydratée.
3. Pour une argile de la classe des smectites (Montmorillonite), les cations échangeables constituent des “ponts” entre ces feuillets qui assurent leur liaison. La distance inter-feuillets est alors approximativement de 10 Å. Les feuillets, négativement chargés, sont liés entre eux par les cations échangeables et par des forces d'attraction du type *van der Waals*. L'hydratation des cations entraînent l'insertion de molécules d'eau entre les feuillets. On représente sur la figure 7.2 les différentes étapes de cette hydratation [87].

Ce processus mobilise une force capable de rompre les liaisons initiales entre les feuillets argileux (≈ 10 Å). Ce type de gonflement, appelé *gonflement intracristallin* ou encore *gonflement primaire*, est susceptible de générer, sous confinement, des pressions de gonflement au delà de 100 Mpa. On montre, de plus, qu'il peut conduire à une augmentation du volume de l'ordre de 100 %, correspondant à une distance entre les feuillets avoisinant les 20 Å. Ce nouvel espacement définit l'état de déformation asymptotique d'une smectite soumise à un gonflement intracristallin.

En résumé, le phénomène d'hydratation est présent quelle que soit la famille d'argile considérée. Sa manifestation et son intensité diffèrent néanmoins d'une famille à l'autre. Pour les Kaolinites et les Illites, il ne concerne que la surface externe des particules d'argile. Pour les argiles de la famille des smectites, l'hydratation a pour conséquence la rupture des liaisons inter-feuillets initiales. Les liaisons entre ces feuillets, séparés par une vingtaine

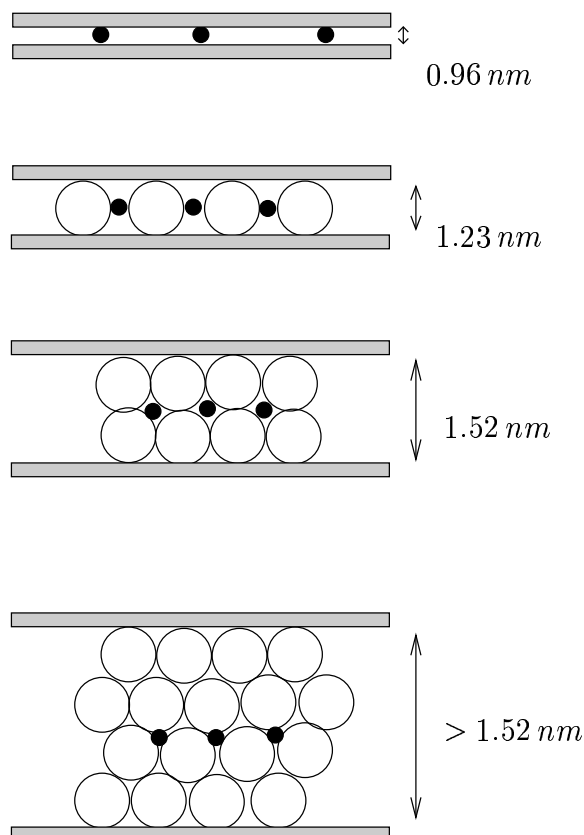


FIG. 7.2: gonflement intracristallin d'une Montmorillonite (d'après Madsen et Vonmoos [87])

d'Angströms, sont alors très faibles. C'est cette faiblesse qui à l'origine de la deuxième manifestation du gonflement des argiles : le gonflement osmotique.

7.1.3 le gonflement osmotique

La deuxième manifestation du gonflement des argiles fait référence au phénomène d'osmose, et porte à ce titre le nom de *gonflement osmotique*. Ce gonflement est lié aux variations de concentration ionique du fluide saturant. Il intervient alors même que le gonflement par hydratation est stabilisé. A ce stade, les particules d'argile sont toujours formées d'amas de feuillets, plus ou moins liés entre eux. La valence des ions en solution joue alors un rôle essentiel.

- Dans le cas où les cations échangeables sont au moins bivalents, l'équilibre atteint après l'hydratation des cations adsorbés est préservé, quel que soit le type d'argile, et les particules d'argile gardent leur structure “en amas de feuillets”. Le gonflement osmotique se développe alors uniquement entre les particules, et non entre les feuillets. Il s'en trouve, par conséquent, fortement limité.

- Si les cations échangeables sont monovalents, le comportement des Kaolinites et des Illites reste inchangé (le gonflement se produit entre les particules) à ceci près que l'intensité du gonflement osmotique est plus important. Pour les Montmorillonites, en revanche, les liaisons inter-feuillets, trop faibles, sont rompues. Les amas de feuillets sont alors divisés progressivement si bien qu'une particule se réduit désormais à un unique feuillet argileux (ou plaquette d'argile).

Le gonflement osmotique, encore appelé *gonflement intercristallin* par opposition au gonflement intracristallin des smectites, met alors en jeu des forces capables de repousser deux plaquettes en vis-à-vis à des dizaines d'Angströms l'une de l'autre. On définit classiquement l'état de dispersion des plaquettes pour un espacement de l'ordre de 130 Å.

En conclusion, le gonflement osmotique est présent quel que soit le type d'argile concerné. Son intensité dépend de l'interaction électrique entre les ions en solution et les surfaces chargées électriquement. Plus la surface est importante plus le gonflement est potentiellement important. La surface spécifique, *i.e.* le rapport entre la surface de la phase solide et le poids du matériau (notée S_m), est un bon indice du potentiel de gonflement. La division de la phase solide, dans le cas d'une Montmorillonite, augmente la surface spécifique si bien qu'elle est potentiellement très gonflante. C'est d'ailleurs pour la même raison que les Illites sont “plus gonflantes” que les Kaolinites. En effet, même si elles ne se divisent pas, les particules d'argiles pour une Illite sont des objets “moins massifs”, davantage aplatis, que dans le cas des Kaolinites. Par conséquent, leur surface spécifique est plus importante, tout comme leur potentiel de gonflement.

7.1.4 bilan

En définitive, les gonflements par hydratation et osmotique sont présents dans toutes les familles d'argiles, dont on a présenté ici les 3 principaux représentants. Leur manifestation, à l'échelle de l'ingénieur, est cependant fortement dépendante de la famille à laquelle elles appartiennent et fait appel au concept de surface spécifique. Pour une même masse de particules d'argile, le comportement gonflant est lié au nombre de particules et à leur surface totale. Plus la surface spécifique est importante, plus l'argile est potentiellement gonflante. La division des particules dans le cas d'une smectite augmente très significativement sa surface spécifique (voir annexe 11.1) si bien qu'une Montmorillonite ($S_m \approx 800 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$) est potentiellement très gonflante, une Illite ($S_m \approx 80 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$) “moyennement” gonflante et une Kaolinite ($S_m \approx 15 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$) “faiblement” gonflante.

On retiendra aussi que cette différence de géométrie de la phase solide, pour chacune des familles présentées, est directement liée à l'intensité des forces de liaison entre les feuillets formant les particules d'argile à l'état sec, c'est-à-dire pour des matériaux argileux à te-

neur en eau très faible. On a vu qu'elle est également tributaire de la concentration des sels en solution, et encore plus fortement, de la valence de leurs cations puisque l'hydratation n'est capable de rompre les liaisons inter-feuillets, dans le seul cas des Montmorillonites, que pour des cations monovalents.

Il est désormais acquis que la dénomination générique du “gonflement des argiles” recouvre en fait deux phénomènes dont la répercussion au niveau des contraintes et des déformations est manifestement très différente. Les conditions d'expérimentation permettent alors de préciser le “régime de gonflement” dans lequel se trouve l'échantillon argileux.

Lorsqu'un échantillon initialement sec, ou partiellement saturé, est mis en contact avec une solution, l'origine principale de contrainte de gonflement est l'hydratation des cations adsorbés. L'intensité du gonflement empêché peut alors atteindre plusieurs dizaines de MPa.

Pour un état de saturation totale, ou quasi-totale, le gonflement observé est essentiellement d'origine osmotique. L'intensité maximale de ce dernier est de l'ordre du MPa.

Notre étude s'inscrit dans le cadre de la modélisation du comportement gonflant des argiles en contact avec des structures souterraines : tunnels, puits de forage pétrolier,...

A l'exception de situations particulières (climat aride, cycles de désaturation/resaturation), l'argile naturelle est saturée si bien que le gonflement lié à l'hydratation a déjà eu lieu. Le gonflement susceptible de se produire est donc de nature osmotique. Sur la base de cet argument, l'étude proposée dans la suite est consacrée à **la modélisation du gonflement osmotique des argiles**.

7.2 Manifestation du gonflement osmotique des argiles

Nous avons annoncé que les argiles saturées de la classe des smectites (Montmorillonite) exhibent un comportement poromécanique sensible à la concentration des sels en solution dans la porosité. Un échantillon d'une telle argile, initialement en équilibre avec une solution saline dont la concentration en sel est notée² n_{ext}^s manifeste une tendance au gonflement (resp. à la contraction) lorsque cette concentration n_{ext}^s diminue (resp. augmente). Ces phénomènes peuvent être étudiés au laboratoire à l'appareil œdométrique. L'échantillon est en contact avec la solution extérieure par l'intermédiaire d'une pierre poreuse. La pression totale p_{ext} de la solution extérieure est maintenue *constante*. On fait alors varier la concentration n_{ext}^s du soluté dans cette solution et l'on observe le déplacement vertical de la pierre poreuse. Pour empêcher ce déplacement, il est nécessaire d'appliquer

² $_{ext}$ pour extérieur

une force verticale $-F \underline{e}_y$, qui fournit une mesure de l'intensité du gonflement : l'intensité de cette force augmente alors avec la diminution de la concentration n_{ext}^s . La figure 7.3 présente le principe d'un essai de gonflement de ce type.

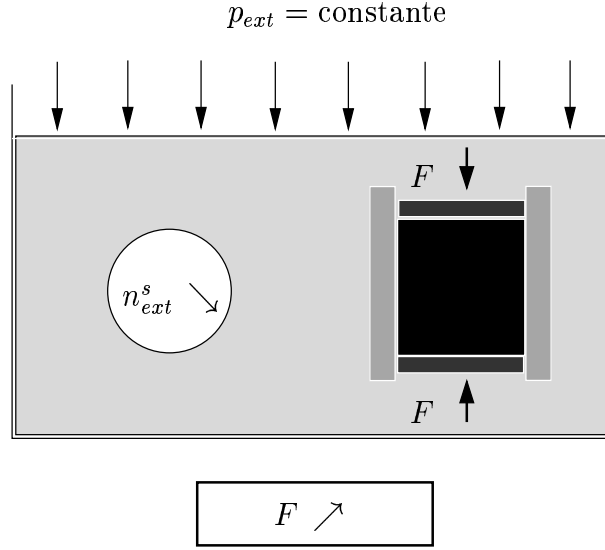


FIG. 7.3: mesure expérimentale de la pression de gonflement

Le Chapitre 8 expose l'interprétation quantitative du phénomène à l'échelle microscopique dans le cadre de la théorie classique de la double couche diffuse ([63], [121], [77], [95]). Les Chapitres 9 et 10 proposent ensuite une modélisation mécanique de la réponse de l'échantillon à un tel essai.

1. Il s'agit, **d'une part**, de rendre compte de la variation de l'état de contraintes et de déformations dans l'échantillon entre l'état initial et l'état asymptotique correspondant à l'équilibre avec la nouvelle concentration extérieure (Chapitre 9). Ceci requiert une écriture appropriée de la loi de comportement, qui est formulée ici dans le cadre de la poroélasticité. Deux approches de la loi de comportement sont mises en œuvre.

La première est purement macroscopique. Pour cela, on se place dans le cadre de la thermodynamique des milieux poreux ([17], [31]). L'idée consiste à généraliser l'approche classique au cas d'un milieu "réactif" pour lequel il existe une interaction entre le sel et la phase solide.

Par nature, ces théories ne sont pas en mesure d'exploiter de façon *directe* les données locales sur le comportement des constituants, la morphologie de l'espace poreux et plus généralement la physique qui se joue à la petite échelle. Pour y remédier, la seconde approche proposée est de nature micromécanique. Par définition, elle a vo-

cation à relier les informations locales au comportement macroscopique observé. On verra que cette approche permet en particulier l'identification de deux contributions à l'élasticité des argiles : l'une purement mécanique, l'autre d'origine électrique, traduisant à l'échelle macroscopique l'existence d'une interaction électrique entre les sels en solution et les particules chargées électriquement.

2. **D'autre part**, on s'attache à décrire la phase transitoire de l'essai à l'oedomètre présenté à la figure 7.3. C'est l'objet du Chapitre 10 qui propose une formulation des lois de transport de l'eau et du sel dans le milieu poreux. On examine en particulier la validité des relations de symétrie d'Onsager.

Finalement, la démarche théorique proposée est confrontée aux résultats expérimentaux obtenus par la société TOTAL dans le cadre d'une campagne d'essais visant à identifier le comportement contractant d'une argilite ("shale") exposée à une augmentation de la concentration saline extérieure.

Chapitre 8

Interprétation physique du gonflement osmotique

Sommaire

8.1	Étude de l'interaction particules/soluté	169
8.2	Théorie de la double couche diffuse	172
8.3	Approche mécanique du gonflement osmotique	174
8.3.1	l'approche classique (du type Van't Hoff)	174
8.3.2	définition tensorielle de la contrainte de gonflement	180
8.4	Conclusions	185

On distingue dans la suite deux échelles d'espace. L'échelle microscopique, pour laquelle le vecteur position est noté $\underline{z}$, est celle où l'on suppose qu'il est possible de distinguer géométriquement une phase solide et une phase fluide disjointes. En particulier, cette échelle permet de décrire les variations des concentrations $n^\pm(\underline{z})$ en cations et en anions à l'intérieur de l'espace poreux. A l'échelle macroscopique, un volume élémentaire de milieu poreux (v.e.r.) est décrit comme la superposition de trois particules matérielles, se rapportant respectivement à la phase solide et aux constituants eau et sel de la phase fluide. On appelle *squelette* la perception macroscopique de la phase solide. Ces trois particules macroscopiques sont géométriquement superposées, c'est-à-dire repérées par le même vecteur-position noté $\underline{x}$. Le v.e.r. au point macroscopique $\underline{x}$ sera noté $d\Omega(\underline{x})$.

8.1 Étude de l'interaction particules/soluté

C'est à l'échelle microscopique que le gonflement osmotique des argiles trouve son explication. Pour fixer le cadre de notre travail, on considère un échantillon d'argile en contact avec une solution saline dans les situations expérimentales présentées précédemment. Dans la suite, l'indice 'ext' se réfèrera à cette solution que l'on appellera "solution extérieure". Si les particules¹ d'argile constituant la phase solide du matériau poreux n'étaient pas électriquement chargées, les concentrations ioniques en cations n^+ et en anions n^- dans la porosité connectée seraient uniformes et égales à la concentration n_{ext}^s ² de la solution extérieure. L'équilibre thermodynamique entre la porosité connectée du matériau argile et la solution extérieure requiert l'égalité des potentiels chimiques associés. Dans ce cas, le potentiel chimique ne dépendrait que de la concentration de la solution extérieure n_{ext}^s :

$$\mu^\pm(\underline{z}) = kT \text{Log } n^\pm(\underline{z}) \quad ; \quad n^\pm(\underline{z}) = n_{ext}^s \quad (8.1)$$

où k est la constante de Boltzmann et T la température (en °K).

En fait, les particules élémentaires d'argile qui constituent la roche étudiée portent des charges électriques négatives qui interagissent avec les cations et les anions en solution dans l'espace poreux (cf. Fig 8.1). Intuitivement, les cations sont attirés tandis que les anions sont repoussés par les particules. En conséquence, les concentrations $n^+(\underline{z})$ et $n^-(\underline{z})$ ne sont ni égales, ni uniformes, ce qui se traduit par l'existence d'un champ électrique à

¹une particule correspond désormais à l'objet matériel concerné par le gonflement osmotique : elle s'identifie à une plaquette dans le cas d'une smectite en interaction avec une solution saline monovalente.

²l'exposant s se rapporte au sel

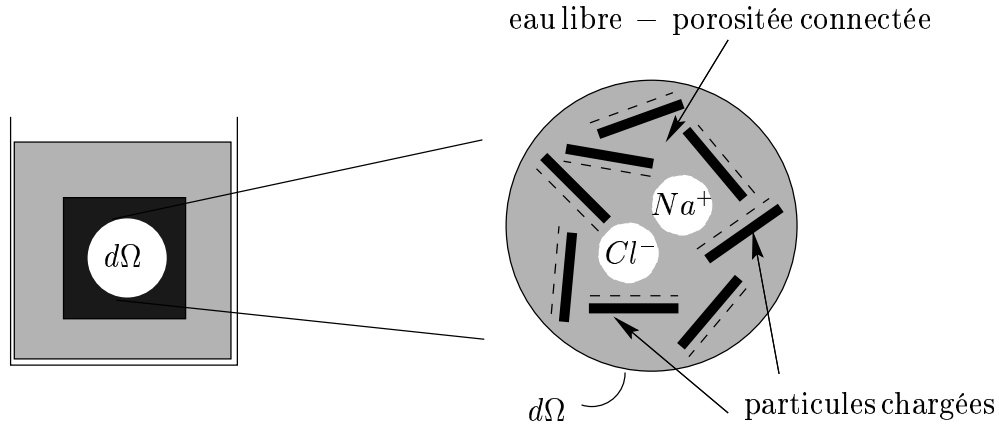


FIG. 8.1: modèle conceptuel de la microstructure d'une argile gonflante au NaCl

l'échelle microscopique. De fait, les potentiels chimiques $\mu^\pm(\underline{z})$ des ions en solution comprennent un terme supplémentaire d'énergie électrique³ :

$$\mu^\pm(\underline{z}) = kT \text{Log } n^\pm(\underline{z}) \pm |v| e\varphi(\underline{z}) \quad (8.2)$$

où l'on rappelle que $\underline{z}$ est la variable d'espace locale, e la charge électrique, v désigne la valence des ions et $\varphi(\underline{z})$ le potentiel électrique. Pour rendre compte de l'équilibre thermodynamique dans le v.e.r. $d\Omega(\underline{x})$, on définit en ce point une solution saline neutre, en équilibre avec le fluide saturant l'espace poreux de $d\Omega(\underline{x})$. On note $p(\underline{x})$ la pression totale et $n_{th}^s(\underline{x})$ la concentration en sel de cette solution fictive. Dans les conditions expérimentales décrites dans la section précédente, on constate que cette solution fictive est identique à la solution extérieure, à savoir $n_{th}^s(\underline{x}) = n_{ext}^s$ et $p(\underline{x}) = p_{ext}$, lorsque l'équilibre entre l'échantillon et la solution extérieure est réalisé. A contrario, dans la phase transitoire du comportement, les champs macroscopiques $n_{th}^s(\underline{x})$ et $p(\underline{x})$ ne sont pas uniformes dans l'échantillon, de sorte que la solution fictive dépend du point macroscopique considéré. D'une façon générale, l'équilibre thermodynamique des espèces ioniques à l'échelle du v.e.r. impose l'uniformité des potentiels chimiques $\mu^\pm(\underline{z})$:

$$(\forall \underline{z} \in d\Omega(\underline{x})) \quad \mu^\pm(\underline{z}) = kT \text{Log } n_{th}^s(\underline{x}) \quad (8.3)$$

On déduit alors de l'équation (8.2) que les concentrations en cations $n^+(\underline{z})$ et en anions $n^-(\underline{z})$ sont données par les distributions de Boltzmann contrôlées par le potentiel électrique local $\varphi(\underline{z})$:

³cf. annexe 11.2

$$n^{\pm}(\underline{z}) = n_{th}^s(\underline{x}) \exp \frac{\mp ve\varphi(\underline{z})}{kT} \quad (8.4)$$

L'équation de Poisson permet de relier le potentiel électrique $\varphi(\underline{z})$ et la densité de charge ρ ($[\rho]=C/m^2$) définis dans l'espace interparticulaire :

$$-\epsilon\epsilon_0 \Delta\varphi(\underline{z}) = \rho \quad \text{avec} \quad \rho = e \sum_i v_i n^i \quad (8.5)$$

où $\epsilon\epsilon_0$ est la constante diélectrique et Δ l'opérateur laplacien.

En présence de cations et d'anions de valence opposée, on a : $\rho = v e (n^+(\underline{z}) - n^-(\underline{z}))$ si bien que l'équation de Poisson s'écrit :

$$-\epsilon\epsilon_0 \Delta\varphi(\underline{z}) = v e (n^+(\underline{z}) - n^-(\underline{z})) \quad (8.6)$$

En combinant (8.4) et (8.6), on aboutit à l'équation de Poisson-Boltzmann à laquelle doit satisfaire le potentiel $\varphi(\underline{z})$:

$$\Delta\varphi(\underline{z}) = \frac{2ve}{\epsilon\epsilon_0} n_{th}^s(\underline{x}) \sinh \left(\frac{ve\varphi(\underline{z})}{kT} \right) \quad (8.7)$$

L'écriture sous forme adimensionnelle de l'équation de Poisson-Boltzmann permet l'identification d'une longueur caractéristique, appelée *longueur de Debye*, qui contrôle les variations de $\varphi(\underline{z})$ à l'échelle du pore. Elle dépend notamment de $n_{th}^s(\underline{x})$:

$$L(\underline{x}) = \left(\frac{\epsilon\epsilon_0 kT}{2v^2 e^2 n_{th}^s(\underline{x})} \right)^{1/2} \quad (8.8)$$

On verra, dans la suite, de quelle façon cette longueur caractéristique permet de statuer sur l'existence d'une interaction électrique locale répulsive capable de générer un gonflement observable à l'échelle de l'échantillon.

Examinons à présent le cas de l'eau qui joue le rôle de solvant. Soit μ_e le potentiel chimique moléculaire de l'eau dans l'espace poreux du v.e.r. $d\Omega(\underline{x})$. Il est par construction égal à celui de l'eau dans la solution fictive. On note V_m et $\mu_e^*(p_o)$ le volume et le potentiel chimique moléculaires de l'eau pure à la pression de référence p_o . En négligeant la compressibilité de l'eau pure, on montre que μ_e est donné par [2] :

$$\mu_e(\underline{x}) = \mu_e^*(p_o) + V_m(p^e(\underline{x}) - p_o) \quad \text{avec} \quad p^e(\underline{x}) = p(\underline{x}) - 2kT n_{th}^s(\underline{x}) \quad (8.9)$$

Qualitativement, on observe que la présence de sel dans une solution à la pression $p(\underline{x})$ abaisse le potentiel chimique de l'eau. Ce résultat est central dans l'interprétation classique du phénomène d'osmose.

Dans la suite, on appellera pression partielle de l'eau la quantité $p^e(\underline{x})$ introduite dans (8.9). On appellera également pression partielle du sel la quantité $p^s(\underline{x}) = 2kTn_{th}^s(\underline{x})^4$. D'après (8.3) et (8.9), p^e et p^s contrôlent respectivement les potentiels chimiques μ_e et $\mu_s = 2\mu^\pm$ du solvant et du soluté. Ces pressions partielles interviendront dans l'écriture des lois de transport des constituants de la phase fluide.

8.2 Théorie de la double couche diffuse

L'écart à l'uniformité des concentrations ioniques est liée, on l'a vu, à l'existence d'un potentiel électrique à l'échelle des pores (cf. 8.6). La détermination pratique du champ électrique $\varphi(\underline{z})$ passe par la résolution d'un problème électrostatique à l'échelle microscopique défini par (8.7) et par des conditions aux limites appropriées sur la frontière solide. Etant donnée la complexité de la microstructure d'une argile, ce travail est en général très délicat.

La théorie de la double couche diffuse ("*e.d.l. theory*") offre un cadre théorique simplifié dans lequel la géométrie locale est composée de deux particules parallèles. Cette modélisation permet de réduire le problème à une situation unidimensionnelle [77]. A cet effet, les surfaces de chacune des particules, situées aux plans $z = \pm h$, sont supposées de taille infinie. On peut considérer que cette hypothèse de travail est vérifiée dans le cas des argiles gonflantes de la classe des smectites considérées ici (cf. Chapitre 7).

S'agissant de l'écriture des conditions aux limites vérifiées par le potentiel électrique à la surface des particules d'argile, la littérature offre certaines imperfections qui méritent d'être éclaircies [1]. Dans de nombreux systèmes colloïdaux, on définit un potentiel constant à la surface des particules. Dans le cas des argiles gonflantes, le développement de substitutions isomorphes à la surface des particules a pour conséquence de les charger de façon quasi-uniforme. Par conséquent, on considère que ces surfaces portent chacune une charge électrique uniforme $\sigma < 0$ ($[\sigma] = \text{C/m}^2$), et non un potentiel électrique constant⁵.

⁴à l'échelle du v.e.r., le sel est interprété comme une entité solide indissociable (NaCl, par exemple) regroupant la contribution des anions et des cations

⁵on pourrait envisager d'appliquer une condition aux limites de type potentiel constant au niveau des bords des particules d'argile [95] mais l'on négligera leur effet devant la taille des particules supposée infinie

Dans le cadre de cette théorie simplificatrice, la variable vectorielle de position à l'échelle microscopique $\underline{z}$ est remplacée par une variable scalaire, notée z (Fig. 8.2).

Soit h la demi-distance séparant les deux particules d'argile. Le champ électrique $\varphi(z)$ et les concentrations en cations $n^+(z)$ et en anions $n^-(z)$ peuvent être déterminés numériquement en fonction des deux variables n_{th}^s et h .

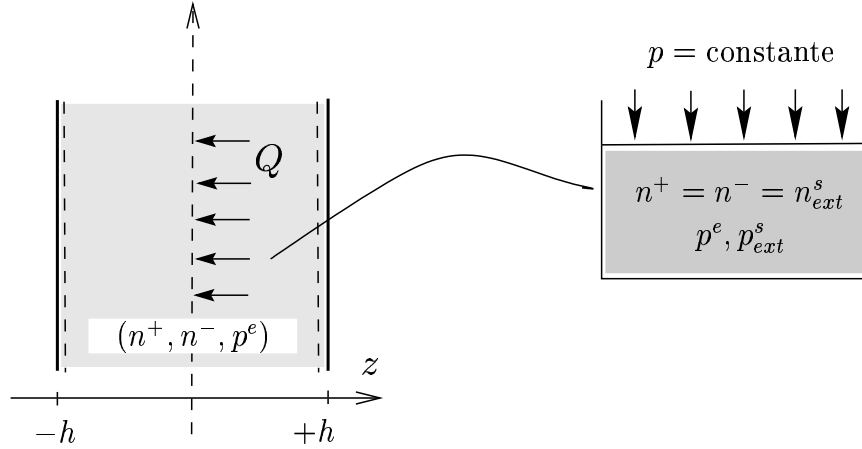


FIG. 8.2: origine de la pression de gonflement

La première condition aux limites du problème posé est liée à la symétrie du problème. De fait, le champ électrique doit être nul au plan moyen, d'équation $z = 0$:

$$-E_z = \frac{d\varphi}{dz} \Big|_{z=0} = 0 \quad (8.10)$$

La deuxième condition aux limites traduit l'électroneutralité, requise à l'échelle du v.e.r., que l'on écrit sur une moitié du système pour des raisons de symétrie évidentes. Avec (8.6), il vient :

$$\sigma + \int_0^h v e (n^+(z) - n^-(z)) dz = \sigma + \epsilon \epsilon_0 \int_0^h \left(-\frac{d^2\varphi}{dz^2} \right) dz = 0 \quad (8.11)$$

dont on tire, en considérant (8.10), la relation :

$$\frac{d\varphi}{dz} \Big|_{z=\pm h} = \frac{\sigma}{\epsilon \epsilon_0} < 0 \quad (8.12)$$

La résolution du problème défini par (8.7)-(8.10)-(8.12) par un schéma numérique, basé

sur la méthode des Éléments Finis dans un contexte 1D non linéaire, est présentée en détail dans l'annexe 11.3. La détermination des inconnues du problème, dans le cadre de la théorie de la double couche diffuse, en découle.

Il est possible d'établir des solutions analytiques approchées de ce problème dans le cadre d'hypothèses simplificatrices. Malheureusement, leur validité est souvent restreinte à des situations de moindre intérêt : soit le potentiel électrique doit être suffisamment petit (en valeur absolue), ce qui correspond aux cas des fortes concentrations et donc à des pressions de gonflement de faible intensité, soit au contraire le potentiel est suffisamment grand pour négliger l'influence de la distribution des anions dans les pores (cas des faibles concentrations). La solution de ce problème est donnée en annexe 11.4. Elle est, en fait, mal adaptée au problème du gonflement des argiles puisqu'elle ne gère pas l'existence d'une interaction entre les couches diffuses attachées à chacune des particules. Son domaine d'application concerne davantage le comportement gonflant des colloïdes contrôlé par une unique double couche diffuse.

8.3 Approche mécanique du gonflement osmotique

L'explication du phénomène de gonflement observé sur des échantillons d'argile passe par l'analyse des conséquences mécaniques de l'interaction entre le sel et les particules d'argile. Pour une valeur donnée de $\sigma < 0$, le potentiel électrique $\varphi(z)$, solution du problème unidimensionnel, est une fonction négative sur le domaine $z = [0, h]$. Cela signifie, d'après (8.4), que les concentrations locale et moyenne en cations $n^+(z)$ et $\langle n^+ \rangle$ dans l'espace poreux sont plus grandes que la concentration n_{th}^s de la solution extérieure. À l'inverse, les concentrations locale et moyenne en anions $n^-(z)$ et $\langle n^- \rangle$ dans l'espace poreux sont plus faibles que la concentration n_{th}^s de la solution extérieure. Intuitivement, ceci correspond au fait que les cations (chargés positivement) sont attirés par les particules d'argile chargées négativement alors que les anions (chargés négativement) sont repoussés. Par conséquent, la solution interparticulaire perd localement sa neutralité.

8.3.1 l'approche classique (du type Van't Hoff)

Si l'on divise le système formé par les deux particules parallèles et la solution saline interparticulaire en deux sous-systèmes identiques séparés par le plan moyen, d'équation $z = 0$, on montre, en utilisant (8.11), que la résultante du champ électrique généré par les charges élémentaires contenues dans un sous-système est nulle. Par conséquent, la force par unité de surface exercée par un sous-système sur l'autre est une *force de contact* Q , égale à la somme de la pression partielle de l'eau p^e et des pressions partielles des anions

et des cations au plan moyen :

$$Q = kT(n^+(0) + n^-(0)) + p^e \quad (8.13)$$

Classiquement, lorsque l'on s'intéresse au gonflement osmotique des argiles, on définit une surpression osmotique, ou pression osmotique de gonflement, initialement introduite par Van't Hoff pour rendre compte du comportement des membranes semi-sélectives ("leaky membrane") telles que les particules d'argile. Cette surpression osmotique est définie comme la différence entre la force d'interaction entre deux particules d'argile et la pression totale de la solution extérieure :

$$\pi^g = Q - p \quad (8.14)$$

En introduisant (8.9) et (8.13) dans (8.14), on obtient finalement :

$$\pi^g(h, n_{th}^s) = kT (n^+(0) + n^-(0) - 2 n_{th}^s) \quad (8.15)$$

A partir de (8.4), on montre de plus que $n^+(z) n^-(z) = (n_{th}^s)^2$, et en particulier :

$$n^+(0) n^-(0) = (n_{th}^s)^2 \quad \text{avec :} \quad \begin{cases} n^+(0) \geq n_{th}^s \\ n^-(0) \leq n_{th}^s \end{cases} \quad (8.16)$$

De (8.16) découle la positivité de la pression de gonflement⁶, donnée en (8.15) : $\pi^g \geq 0$. Cela signifie que la pression de gonflement représente localement une interaction de répulsion entre les particules d'argile dont (8.15) fournit une estimation quantitative. Ce résultat justifie la terminologie employée.

D'après (8.8), lorsque l'on augmente la concentration équivalente n_{th}^s , on diminue la longueur de Debye. Par conséquent, l'interaction électrique tend à disparaître pour des valeurs croissantes de la concentration de la solution extérieure. On définit alors une concentration extérieure seuil n_{seuil}^s à partir de laquelle le potentiel électrique au plan moyen est nul⁷ si bien que les concentrations en cations et en anions sont uniformes et égales à la concentration extérieure. Dans ces conditions, (8.15) montre que la pression de gonflement disparaît.

⁶il suffit, pour s'en convaincre, d'exploiter le fait que la moyenne arithmétique est supérieure ou égale à la moyenne géométrique : $(\alpha + \beta)/2 \geq \sqrt{\alpha\beta}$, $\forall \alpha, \beta \geq 0$

⁷en toute rigueur, le potentiel électrique tend asymptotiquement vers 0 ; on suppose ici qu'il est nul en dessous d'une certaine valeur infinitésimale

Ce raisonnement suggère que la pression de gonflement est une fonction décroissante de la concentration extérieure⁸. Les calculs numériques effectués dans le cadre de la théorie de la double couche confirment cette intuition. La figure 8.3 présente les résultats de cette simulation numérique. La variation de la pression de gonflement, définie par (8.15), y est représentée en fonction de la concentration $n_{ext}^s (= n_{th}^s)$ de la solution extérieure ($\epsilon=80$, $T=300$ °K, $v=1$, densité de charge (négative) sur les particules d'argile : $\sigma=0.2$ C/m²).

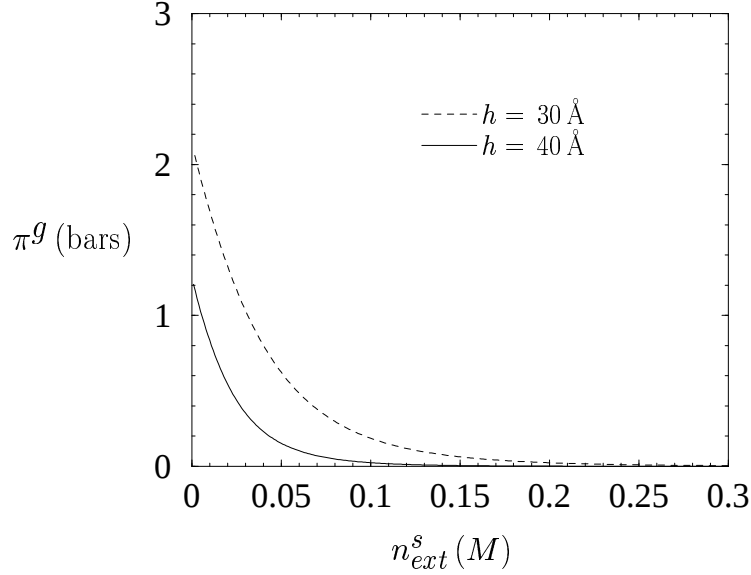


FIG. 8.3: évolution de la pression de gonflement en fonction de n_{ext}^s

Manifestement, pour un espacement donné entre les particules d'argile, la pression de gonflement apparaît comme une fonction décroissante de la concentration thermodynamique équivalente (*i.e.* celle de la solution extérieure à l'équilibre). Au passage, on retrouve l'existence d'un seuil en concentration à partir duquel la pression de gonflement s'annule. Pour un même matériau, il est défini pour un espacement interparticulaire donné et varie naturellement en fonction des propriétés physiques du matériau. On traduit ce résultat par l'inégalité suivante :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial \pi^g}{\partial n_{th}^s} < 0 & , \quad \forall n_{th}^s < n_{seuil}^s \\ \pi^g = 0 & , \quad \forall n_{th}^s \geq n_{seuil}^s \end{array} \right. \quad (8.17)$$

(8.15) indique que la répulsion sera d'autant plus significative que la concentration des

⁸une étude mathématique plus fine sur la résolution d'une équation "quasi-elliptique" non linéaire devrait permettre de lever cette indétermination.

cations au plan moyen $n^+(0)$ diffère de celle des anions $n^-(0)$. Cet écart à l'électroneutralité intervient chaque fois que le champ électrique $\varphi(z)$ ne peut être négligé au plan moyen. A l'inverse, l'action mécanique de cette répulsion devient négligeable lorsque ces deux concentrations sont égales, c'est-à-dire lorsque l'électroneutralité de la solution interstitielle est restaurée.

Plus précisément, une perturbation d'origine électrique au plan moyen entraînant une évolution de l'interaction de répulsion sera effective lorsque la demi-distance interparticulaire h sera de l'ordre de $L(\underline{x})$ (cf. 8.8). A contrario, les effets mécaniques macroscopiques de l'interaction locale entre les particules solides et le sel en solution seront négligeables pour des valeurs de h grandes devant L .

En résumé, pour empêcher toute variation des distances interparticulaires, il est nécessaire d'appliquer sur l'échantillon argileux un effort dont l'intensité est plus grande que la pression totale du fluide. Cette force, d'après (8.17), est d'autant plus intense que la concentration de la solution est faible. Elle est négligeable au dessus d'une valeur seuil n_{seuil}^s . On retrouve exactement le phénomène observé sur le test de la figure 7.3 (Chapitre 7) pour lequel une force de compression d'intensité croissante doit être appliquée pour empêcher toute déformation volumique de l'échantillon argileux soumis à un chargement en concentration extérieure décroissante.

équation d'état pour le modèle 1D Dans certains cas, notamment celui des smectites saturées par une solution saline composée de cations monovalents (KCl et NaCl essentiellement), la théorie de la double couche diffuse présente une bonne estimation du comportement gonflant [95]. Madsen et Vonmoos [86] ont mis en évidence une excellente corrélation entre les résultats expérimentaux et les estimations théoriques dans la détermination du gonflement d'origine osmotique de l'*Opalinum Shale*.

Dans le cas général, malgré d'évidentes imperfections, largement discutées dans la littérature, la théorie de la double couche diffuse, et sa modélisation unidimensionnelle de deux particules d'argile parallèles, proposent un cadre théorique intéressant pour la compréhension du phénomène physico-chimique à la base du gonflement osmotique des argiles.

A partir de (8.14), on voit que l' "équation d'état" gouvernant le comportement de ce modèle unidimensionnel, sous sa forme différentielle, s'écrit :

$$dQ = dp^e + k dh + \beta^s dp^s \quad \text{avec :} \quad \begin{cases} k &= \frac{\partial \pi^g}{\partial h} \big|_{p^s} \\ \beta^s &= 1 + \frac{\partial \pi^g}{\partial p^s} \big|_h \end{cases} \quad (8.18)$$

Pourvu que la concentration soit inférieure à la concentration de seuil, si les pressions d'eau et de sel sont maintenues constantes ($dp^e = dp^s = 0$), (8.18) montre que ce système unidimensionnel se comporte comme un ressort non-linéaire. Sa rigidité tangente k dépend, en effet, non seulement de la pression de sel mais aussi de l'espace interparticulaire. Le comportement de ce "ressort" sous pression de sel constante, définie par la concentration $n_{th}^s = 0.001 M$, est illustré sur la figure 8.4a. Naturellement, on s'attend à retrouver cette rigidité non-linéaire, d'origine physico-chimique, dans la loi constitutive du comportement à l'échelle macroscopique.

Un autre mode de chargement consiste à fixer la contrainte π^g et à faire varier la pression p^s . On observe alors la variation dh de l'espace interparticulaire. Dans ces conditions, (8.18) prévoit un gonflement ($dp^s < 0$), ou une contraction ($dp^s > 0$). La figure 8.4b illustre ce propos : la distance h y est tracée en fonction de la concentration d'équilibre n_{th}^s pour une valeur constante de $\pi^g = 1$ bar. Dans ce cas, on observe qu'une chute de n_{th}^s , de $0.1M$ à $0.001M$, a pour conséquence de doubler la distance interparticulaire h .

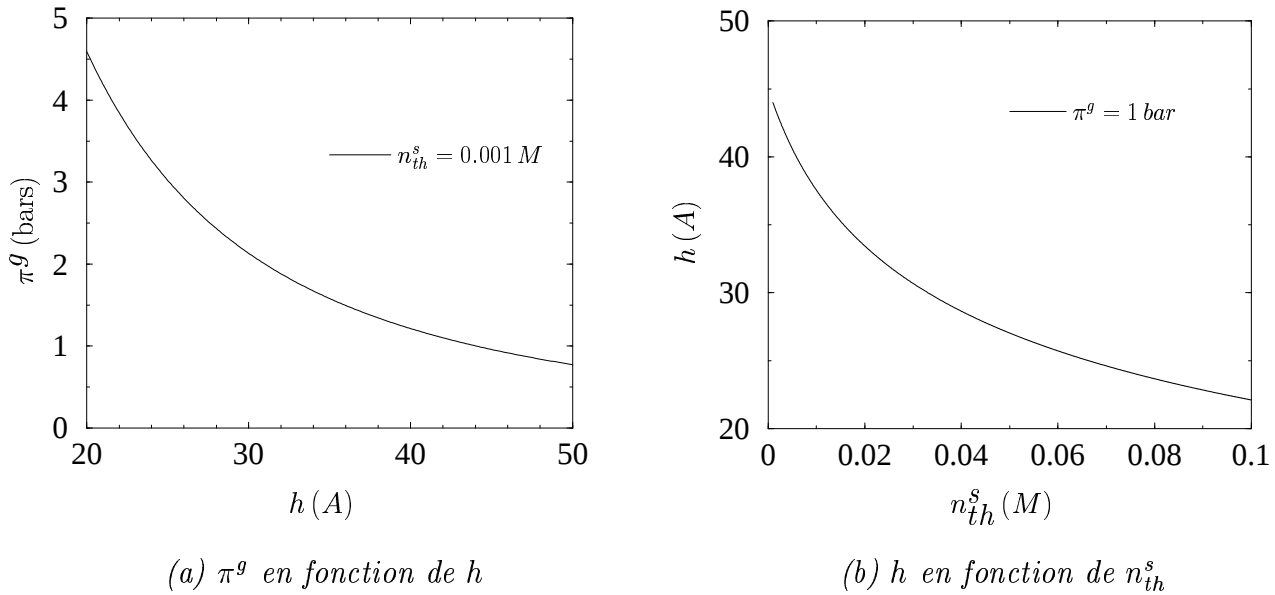


FIG. 8.4: simulation des essais de compression

Afin de généraliser le modèle unidimensionnel de la double couche diffuse au cas des argiles “réelles”, on cherche classiquement à définir une demi-distance interparticulaire moyenne $\bar{h}$. Un raisonnement dû à Yong et Warkentin [124] permet de relier la demi-distance interparticulaire moyenne $\bar{h}$ et la porosité eulérienne n . Notons S , la surface d’une particule, $2\bar{h}S$ est alors le volume de l’espace poreux attaché à chaque groupement de particules. Soit N , le nombre de particules composant la phase solide d’un matériau argileux, la porosité eulérienne est donnée de façon évidente par $n = 2\bar{h}SN$. De plus, $2SN$ est la surface totale de la phase solide par unité de volume. Elle est, par conséquent, liée à la surface spécifique S_m (surface totale de solide par unité de masse) par la relation $2SN = \rho^{sd}(1 - n)S_m$ où ρ^{sd} est la masse volumique de la phase solide.

Finalement, on aboutit à :

$$\bar{h} = l \frac{n}{1 - n} \quad \text{avec} \quad l = \frac{1}{\rho^{sd} S_m} \quad (8.19)$$

D’après (8.19), $\bar{h}$ est d’autant plus faible que la surface spécifique S_m , caractéristique intrinsèque du matériau argileux, est grande (cas des smectites). $\bar{h}$ devient alors du même ordre de grandeur que la longueur de Debye (8.8). Par conséquent, (8.19) suggère que le gonflement est plus important pour des grandes valeurs de la surface spécifique. On a déjà vu que le gonflement est d’autant plus intense que la valence des ions en solution est petite⁹, c’est-à-dire pour des ions monovalents, et que la concentration saline du milieu extérieur est faible. La discussion pourra désormais s’appuyer sur le concept de surface spécifique du matériau argileux.

le concept d’activité macroscopique La concentration moyenne en sel n^s dans la porosité connectée est définie par : $n^s = \langle n^- \rangle$ dans la mesure où la concentration en anions représente exactement la concentration en sel effectivement en solution¹⁰. L’écart entre cette concentration moyenne, ou encore concentration macroscopique vraie, et la concentration thermodynamique équivalente n_{th}^s est décrit par le rapport :

$$A = \frac{n_{th}^s}{n^s} \quad (8.20)$$

Comme on l’a déjà vu, en l’absence d’un potentiel électrique à l’échelle des pores la

⁹les résultats expérimentaux ([124], [95]) confirment cette propriété annoncée par la théorie de la double couche à travers la définition de la longueur de Debye

¹⁰on rappelle que les cations sont en excès dans la porosité pour assurer l’électroneutralité globale, compte tenu des charges négatives portées par les particules d’argile

concentration en anions $n^-(z)$ serait uniforme et égale à la concentration thermodynamique équivalente n_{th}^s si bien que A serait égale à 1. En réalité, l'interaction électrique repousse les anions “loin” des particules d'argile électronégatives si bien que $A > 1$. A permet de quantifier à l'échelle macroscopique l'écart à l'électroneutralité de la solution interparticulaire. Il rend compte de l'intensité de l'interaction entre les charges portées par les particules d'argile et les ions en solution. D'un point de vue thermodynamique, l'existence d'une interaction entre le solide et le sel implique que le système solide/sel n'est pas idéal. A rend compte de cet écart à l'idéalité du mélange solide/sel. On l'identifiera, par la suite, au coefficient d'activité macroscopique du sel dans la porosité connectée. On verra (cf section 9.1) comment ce concept peut être introduit dans la modélisation mécanique du gonflement à l'échelle macroscopique.

A ce propos, Dormieux et al. [30] ont montré que la dérivée du coefficient d'activité par rapport à la distance interparticulaire contrôle l'effet de la concentration extérieure sur la pression de gonflement :

$$\frac{\partial \pi^g}{\partial n_{th}^s} = 2kT \left(\frac{\partial(h/A)}{\partial h} - 1 \right) \quad (8.21)$$

8.3.2 définition tensorielle de la contrainte de gonflement

La démarche théorique présentée jusqu'à maintenant se focalise sur la répulsion qui s'exerce perpendiculairement aux particules d'argile. A l'œdomètre, où les particules sont supposées parallèles entre elles¹¹, cela se traduit par une analyse de la seule force verticale si bien que l'état de contrainte peut s'identifier à une grandeur scalaire.

Peu d'attention semble avoir été accordée à une éventuelle contrainte de gonflement dans les directions parallèles aux particules. Typiquement, à l'œdomètre, la contrainte radiale ne fait pas l'objet de mesure dans le contexte de l'étude du gonflement. Pourtant, dans des essais de gonflement empêché (déformation verticale nulle) menés au Laboratoire Régional des Ponts et Chaussées (LRPC) d'Aix-en-Provence [111], l'auteur suggère que la contrainte radiale pourrait jouer, dans certains cas, le rôle de contrainte principale majeure de compression. Cette hypothèse permettrait d'expliquer les ruptures d'éprouvettes observées en diverses circonstances dans le cadre de ce programme expérimental.

On va donc s'attacher à décrire l'existence d'une contrainte de gonflement dans les directions du plan des particules d'argile en tirant parti du système de deux particules parallèles analysé par la théorie de la double couche. La contrainte de gonflement apparaîtra alors comme une grandeur tensorielle.

Pour établir les relations d'équilibre du système formé par les deux particules et le fluide

¹¹au laboratoire, cet agencement est provoqué par l'application d'une préconsolidation ([18], [95])

saturant, on isole un volume élémentaire dans l'espace interparticulaire et on effectue un bilan des efforts dans les directions appartenant au plan des particules¹² comme indiqué sur la figure 8.5.

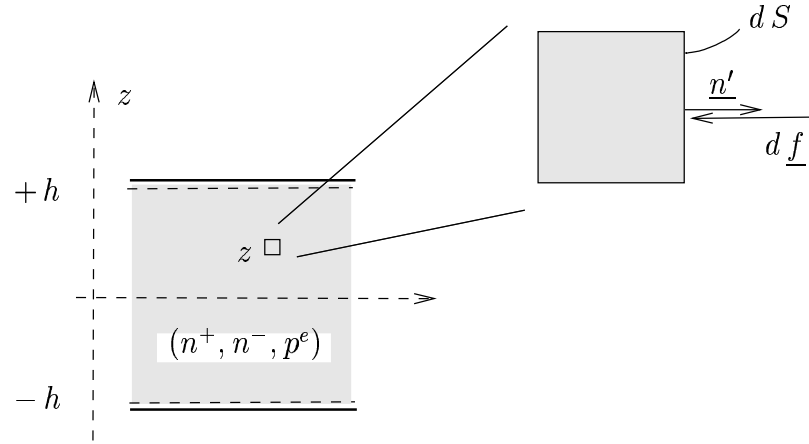


FIG. 8.5: bilan des efforts dans le plan des particules

On note que le champ électrique n'a pas de composante dans le plan des particules. L'effort $d \underline{f}$ qui s'exerce sur la surface élémentaire dS , dont la normale $\underline{n}'$ appartient au plan des particules, est donc une force de contact :

$$d \underline{f} = - [kT(n^+(z) + n^-(z)) + p^e] \underline{n}' dS \quad (8.22)$$

Son intensité est indépendante de l'orientation de $\underline{n}'$ dans le plan des particules.

A l'échelle de la cellule de base formée par les deux particules et l'espace poreux les séparant, on introduit la pression moyenne Q' qui prévaut dans ces directions :

$$Q' = kT(< n^+ > + < n^- >) + p^e \quad (8.23)$$

Par analogie avec l'approche classique¹³, on définit, à partir de (8.9) et (8.23), une pression de gonflement dans les directions du plan des particules, notée¹⁴ $\pi^{g'}$, de la façon suivante :

$$\pi^{g'}(h, n_{th}^s) = Q' - p = kT (< n^+ > + < n^- > - 2 n_{th}^s) \quad (8.24)$$

¹²le bilan des efforts dans la direction normale aux particules correspond à la démarche habituelle de la théorie de la double couche

¹³*i.e.* celle de la théorie de la double couche diffuse (section 8.3.1)

¹⁴on montre la positivité de la composante tangentielle $\pi^{g'} \geq 0$ (voir annexe 11.5)

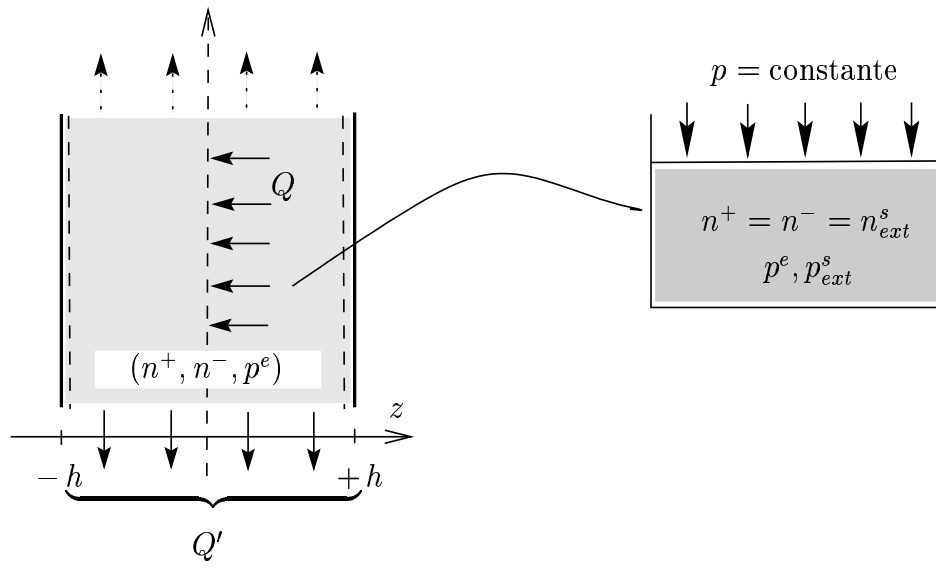


FIG. 8.6: état de contrainte moyen dans un pore

Le raisonnement présenté permet donc d'envisager, à l'échelle de l'espace poreux délimité par deux particules, une définition de l'état de contrainte sous la forme d'un tenseur du second ordre $\underline{\underline{Q}}$ de composantes Q et Q' dans les plans respectivement orthogonal et parallèle aux particules :

$$\underline{\underline{Q}} = Q \underline{n} \otimes \underline{n} + Q' (\underline{t}_1 \otimes \underline{t}_1 + \underline{t}_2 \otimes \underline{t}_2) \quad (8.25)$$

où $\underline{n}$ désigne le vecteur unitaire normal aux particules d'argile et $(\underline{t}_1, \underline{t}_2, \underline{n})$ un repère orthonormé attaché aux particules.

On est ainsi amené à généraliser de façon tensorielle le concept scalaire de pression osmotique initialement introduit par Van't Hoff. On introduit, pour cela, le tenseur de pression de gonflement défini à l'échelle du pore :

$$\underline{\underline{\Pi}}^g = \underline{\underline{Q}} - p \underline{\underline{\delta}} = \pi^g \underline{n} \otimes \underline{n} + \pi^{g'} (\underline{t}_1 \otimes \underline{t}_1 + \underline{t}_2 \otimes \underline{t}_2) \quad (8.26)$$

où les pressions π^g et $\pi^{g'}$ sont données en (8.15) et (8.24) respectivement.

Dans la perspective d'exprimer l'influence de l'interaction entre le sel en solution et la phase solide sur le comportement macroscopique d'une argile gonflante, il est capital, dans le cadre d'une modélisation micromécanique, de clarifier la question de l'état de

contrainte qui règne dans un pore¹⁵. Naturellement, une étude plus fine pourrait aboutir à la formulation d'un état de contrainte local prenant en considération la contribution des forces à distance agissant sur un volume élémentaire suffisamment petit devant la taille caractéristique d'un pore. Notre approche, plus “grossière”, ne prétend pas répondre à cette question. Elle se concentre sur une meilleure représentation de l'état de contrainte moyen qui règne dans un pore.

représentation des efforts intérieurs de type Cauchy Notre objectif, *in fine*, est la formulation d'une loi de comportement macroscopique incluant la physique de la petite échelle. L'approche micromécanique proposée dans la suite vise à déterminer le comportement macroscopique à partir de la formulation du comportement à l'échelle microscopique. Cette démarche n'est envisageable que si l'on est en mesure de définir une contrainte de Cauchy microscopique.

En l'absence de composante du champ électrique parallèlement au plan des particules, la pression Q' de (8.23) est un candidat naturel pour une représentation des efforts intérieurs dans les directions correspondantes.

Dans la direction normale aux particules, l'exercice est plus délicat. En effet, la présence d'un champ électrique à l'échelle microscopique compromet *a priori* toute définition d'une contrainte de Cauchy sinon au plan moyen, d'équation $z = 0$, pour lequel on a montré que la résultante des efforts appliqués par un sous-système sur l'autre se ramène à une action de contact¹⁶.

Plus précisément, imaginons deux sous-systèmes non symétriques séparés au plan tangent d'équation $z = h_0$ (cf. Fig 8.7).

Si l'on effectue le bilan des forces exercées par le sous-système compris entre $z = -h$ et $z = h_0$ sur le sous-système complémentaire, on met en évidence une force de contact à l'interface égale à la somme des pressions partielles des ions en solution à l'abscisse $z = h_0$, notée $Q_0(h_0)$ sur la figure 8.7 :

$$Q_0 = p^e + kT (n^+(h_0) + n^-(h_0)) \quad (8.27)$$

mais aussi une force d'origine électrique, notée $F_0(h_0)$, liée au déséquilibre électrique (absence d'électroneutralité) dans chacun des sous-systèmes.

¹⁵représenté ici par deux particules séparées par une solution saline

¹⁶dans la construction classique des efforts intérieurs de type Cauchy, on suppose que les actions à distance peuvent être représentées par une densité indépendante du choix du sous-système. Cette hypothèse est manifestement prise en défaut ici, où le champ électrique à prendre en compte dans le calcul des actions à distance dépend manifestement du choix du sous-système

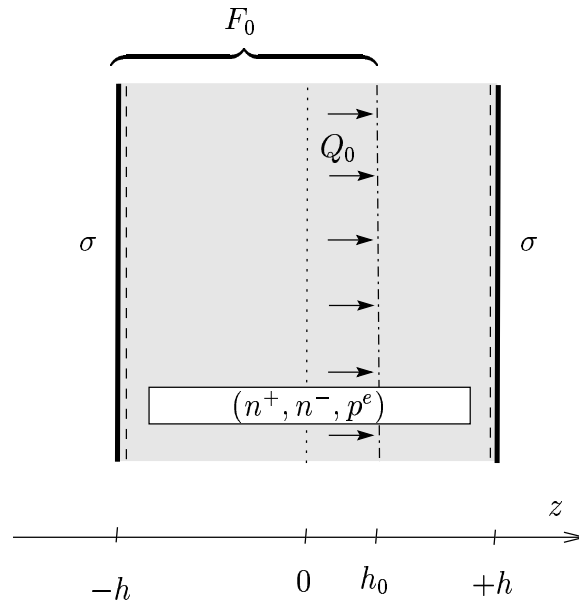


FIG. 8.7: bilan des forces

N.B. : Q_0 et F_0 dépendent *a priori* de l'abscisse h_0 considérée.

Cette force électrique F_0 est appliquée sur l'ensemble des charges contenues dans le sous-système de droite, noté q . E_0 désignant le champ électrique résultant des charges du sous-système de gauche, elle s'exprime classiquement comme le produit de q par E_0 :

$$F_0 = \underbrace{\frac{1}{2\epsilon\epsilon_0} \left[\int_{-h}^{h_0} v e (n^+(z) - n^-(z)) dz + \sigma \right]}_{E_0} \cdot \underbrace{\left[\int_{h_0}^h v e (n^+(z) - n^-(z)) dz + \sigma \right]}_q \quad (8.28)$$

L'électroneutralité du sous-système compris entre $z = -h$ et le plan moyen $z = 0$, exprimée par (8.11), permet de simplifier l'expression de F_0 sous la forme suivante :

$$F_0 = -\frac{\epsilon\epsilon_0}{2} \left[\int_0^{h_0} \frac{v e (n^+(z) - n^-(z))}{\epsilon\epsilon_0} dz \right]^2 = -\frac{\epsilon\epsilon_0}{2} \left[\frac{d\varphi}{dz} \Big|_{h_0} \right]^2 \quad (8.29)$$

En remarquant que le dernier terme de cette égalité peut encore se mettre sous la forme :

$$\frac{1}{2} \left[\frac{d\varphi}{dz} \Big|_{h_0} \right]^2 = \int_0^{h_0} \frac{d^2\varphi}{dz^2} \frac{d\varphi}{dz} dz = -\frac{kT}{\epsilon\epsilon_0} \int_0^{h_0} \frac{v e}{kT} [n^+(z) - n^-(z)] \frac{d\varphi}{dz} dz \quad (8.30)$$

on montre, après intégration, que la force électrique F_0 ainsi calculée se réduit à :

$$F_0 = kT (n^+(0) + n^-(0)) - kT (n^+(h_0) + n^-(h_0)) \quad (8.31)$$

Finalement, le bilan des actions exercées par le sous-système de gauche ($z < h_0$) sur le sous-système de droite ($z > h_0$) **est indépendant du choix de h_0** . Il se ramène à l'action de contact exercée au plan moyen ($z = 0$) où la force d'origine électrique est nulle en raison de l'électroneutralité de chaque sous-système de part et d'autre du plan moyen :

$$\begin{cases} F_0(h_0) + Q_0(h_0) = Q \\ \frac{\partial}{\partial h_0} (F_0 + Q_0) = 0 \end{cases} \quad (8.32)$$

où l'on a utilisé (8.27) et (8.31).

D'après (8.32), les efforts intérieurs dans la direction normale aux particules sont équivalents, à l'échelle d'un pore délimité par deux particules parallèles, à une contrainte de compression uniforme égale à l'effort de contact au plan moyen ($z = 0$).

Ce résultat permet d'affirmer que le tenseur $\underline{\underline{Q}}$ de (8.25) fournit une représentation des efforts intérieurs de type Cauchy à l'échelle d'un pore, intégrant à la fois la pression du fluide et la surpression osmotique. Il sera capital pour la mise en œuvre de la formulation micromécanique proposée à la section 9.2 du chapitre suivant.

8.4 Conclusions

Le présent chapitre a été consacré à l'étude de l'origine du gonflement osmotique à l'échelle microscopique. La théorie de la double couche constitue un support théorique précieux pour la compréhension du phénomène. Mais la validité de cette théorie unidimensionnelle est limitée essentiellement par l'hypothèse d'une géométrie simplifiée où les particules d'argile sont parallèles deux à deux. Nous supposons *de facto* que les effets de friction sont négligeables [18]. Il n'est donc pas possible, en général, de rendre compte du comportement d'un v.e.r. dans la mesure où l'interaction entre les particules d'argile, à l'échelle microscopique, est non seulement de nature physico-chimique mais aussi de nature mécanique¹⁷.

L'approche macroscopique, basée sur la thermodynamique des milieux poreux, et le modèle micromécanique développés dans la suite ont pour principal objectif de s'accommoder

¹⁷celle-ci peut même prédominer dans certains cas, notamment ceux où les particules d'argile sont regroupées en amas de plaquettes, c'est-à-dire pour des argiles de la classe des Illites et des Kaolinites pour lesquelles la théorie de la double couche diffuse n'est pas adaptée

de ces difficultés en incorporant à l'échelle macroscopique les informations fournies par la physique du phénomène de gonflement proposée par le modèle unidimensionnel. Concrètement, il s'agit de généraliser "l'équation d'état" (8.18), obtenue dans le cadre de la théorie de la double couche, au cas tridimensionnel où les tenseurs de déformation $\underline{\underline{E}}$ et de contrainte $\underline{\underline{\Sigma}}$ macroscopiques sont les correspondants tridimensionnels de h et de Q respectivement.

Chapitre 9

Lois constitutives macroscopiques

Sommaire

9.1	Une approche thermodynamique macroscopique	189
9.1.1	équations d'état macroscopiques	190
9.1.2	modélisation d'un essai de gonflement	194
9.1.3	extension aux transformations finies	196
9.2	Une approche micromécanique	199
9.2.1	définition des contraintes locales	199
9.2.2	principe de la méthode d'homogénéisation	200
9.2.3	comparaison avec l'approche macroscopique	202
9.2.4	application au comportement des argilites	205

L'objectif du présent chapitre est la formulation, à l'échelle macroscopique, de la loi de comportement poroélastique d'une argile saturée sujette au gonflement osmotique. Le matériau argileux est considéré comme un milieu poreux composé de deux phases : la matrice solide dont on observe le gonflement et la phase fluide formée de deux composantes, l'eau libre de la porosité connectée et le sel en solution. La loi de comportement macroscopique se doit de tenir compte de l'interaction électrique entre l'électrolyte (le sel) et les particules d'argile chargées négativement, présentée au chapitre précédent.

Deux approches sont alors possibles. La première, purement macroscopique, fait l'objet du premier paragraphe. Le deuxième paragraphe présente une approche micromécanique complémentaire à la précédente.

9.1 Une approche thermodynamique macroscopique

On a vu dans la section précédente que l'origine du gonflement osmotique des argiles se situe dans l'existence d'une interaction à distance, de type électrique, entre la phase solide et le sel de la solution interstitielle. Afin de prendre en considération à l'échelle macroscopique cette interaction, dont l'origine se situe à l'échelle microscopique, nous présentons ici une généralisation au cas des milieux poreux saturés dont la solution interstitielle n'est pas idéale de l'approche thermodynamique classique des milieux poreux saturés [31].

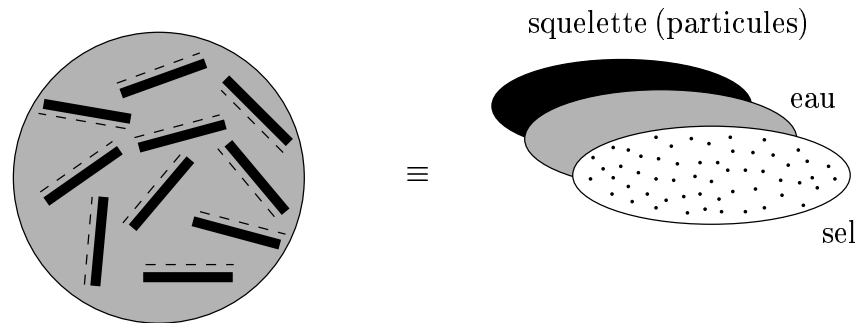


FIG. 9.1: représentation macroscopique d'un milieu poreux saturé par une solution saline

Pour cela, nous séparons la phase fluide, *i.e.* la solution saturant la porosité connectée, en deux composantes indépendantes : l'eau “libre” et le sel. A l'échelle macroscopique, le système élémentaire apparaît désormais comme la superposition de trois particules élémentaires : le squelette, perception macroscopique des particules d'argile et des autres constituants solides présents, l'eau (indiquée par e) et le sel (indiqué par s). Le milieu poreux est ainsi considéré comme la superposition de trois milieux continus.

Soit V_0 (resp. V), le volume initial (resp. actuel) occupé par le système élémentaire. La

porosité eulérienne (resp. lagrangienne) n (resp. ϕ) est définie classiquement comme le rapport du volume actuel V^p de la porosité connectée sur le volume actuel (resp. initial) du système élémentaire :

$$n = \frac{V^p}{V} \quad ; \quad \phi = \frac{V^p}{V_o} \quad (9.1)$$

On adopte ici la vision macroscopique développée par Biot, pour laquelle le système élémentaire est suivi dans la transformation du squelette. Son évolution est décrite par le tenseur des déformations $\underline{\underline{E}}$ du squelette et par la masse $m^\alpha V_0$ de chacune des composantes de la phase fluide¹. La déformation volumique $E = tr \underline{\underline{E}}$ du squelette est définie par : $E = V/V_0 - 1$. Lorsque les constituants solides à l'échelle microscopique sont incompressibles, la variation de la porosité lagrangienne est égale à la déformation volumique du squelette :

$$E = \phi - \phi_o \quad (9.2)$$

Dans ce cas, il est possible de relier les porosités lagrangienne et eulérienne :

$$\frac{n}{1-n} = \frac{\phi}{1-\phi_o} \quad (9.3)$$

Par ailleurs, les masses volumiques apparentes de chacune des composantes de la phase fluide dans le v.e.r. sont reliées à leur masse volumique intrinsèque et à la porosité lagrangienne :

$$m^e = \rho^e \phi \quad ; \quad m^s = \rho^s \phi \quad ; \quad \rho^s = n^s M_s \quad (9.4)$$

où M_s est la masse moléculaire du sel. D'après la définition du coefficient d'activité macroscopique (8.20) (cf. section 8.3.1), on observe que :

$$m^s = \frac{1}{A} \rho_{ext}^s \phi \quad ; \quad \rho_{ext}^s = n_{ext}^s M_s \quad (9.5)$$

9.1.1 équations d'état macroscopiques

On propose ici une modélisation poroélastique non linéaire du phénomène de gonflement dont l'origine a été identifiée au chapitre précédent. Ce modèle macroscopique est présenté dans le cadre de la thermodynamique des milieux poreux. Nous limiterons en outre notre propos à des évolutions isothermes.

¹ m^α ($\alpha = e, s$) désigne la masse volumique apparente de chacune des composantes de la phase fluide

Cette dernière est basée sur deux hypothèses fondamentales. La première postule la nullité de la dissipation intrinsèque dans le système étudié :

$$d\Psi = \underline{\underline{\Sigma}} : d\underline{\underline{E}} + \mu^s dm^s + \mu^e dm^e \quad (9.6)$$

où $\underline{\underline{\Sigma}}$ est le tenseur des contraintes de Cauchy macroscopique, et μ^α , le potentiel chimique de la composante α de la porosité connectée.

La deuxième hypothèse consiste à postuler l'énergie libre totale ΨV_o contenue dans le système élémentaire comme une fonction du tenseur de déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}$ et des masses volumiques apparentes m^α .

La combinaison de ces deux hypothèses permet d'aboutir à l'écriture des équations d'état macroscopiques pour toute évolution isotherme :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\underline{E}}} \quad ; \quad \mu^e = \frac{\partial \Psi}{\partial m^e} \quad ; \quad \mu^s = \frac{\partial \Psi}{\partial m^s} \quad (9.7)$$

On constate, ainsi, que la force thermodynamique associée à la masse volumique apparente de la composante α n'est pas sa pression partielle p^α mais bien son potentiel chimique μ^α . Dans la mesure où l'on cherche à développer une approche mécanique du problème du gonflement des argiles, il est plus judicieux de faire intervenir de façon explicite les pressions partielles de chaque composante de la phase fluide. A cet effet, on utilise l'équation d'état de chacune de ces composantes, qui fournit la relation existant entre la pression partielle p^α et le potentiel chimique μ^α .

Pour l'eau, cette relation se met simplement sous la forme :

$$d\mu^e = \frac{dp^e}{\rho^e} \quad (9.8)$$

ou encore, en introduisant l'énergie libre spécifique φ^e de l'eau :

$$\mu^e = \varphi^e + \frac{p^e}{\rho^e} \quad ; \quad d\varphi^e = p^e \frac{d\rho^e}{\rho^{e2}} \quad (9.9)$$

On a vu au chapitre précédent que l'interaction entre le sel et le solide, constitué au moins en partie de particules d'argile chargées électriquement, est responsable de l'écart à l'idéalité de la solution interstitielle. L'existence de cette interaction doit apparaître dans l'écriture de l'équation d'état de la composante sel du fluide saturant. Comme on l'a vu dans la section 8.1, l'équilibre thermodynamique entre la solution saline saturant la porosité connectée et la solution fictive² impose par définition de celle-ci l'égalité entre

²i.e. thermodynamiquement équivalente

les potentiels chimiques μ^s et $\mu_{ext}^s = 2kT \text{Log } n_{ext}^s$. D'autre part, la pression thermodynamique du sel dans la porosité connectée p^s n'est autre que la pression partielle du sel dans la solution fictive, *i.e.* $p^s = 2kT n_{ext}^s$. On aboutit, par conséquent, au résultat suivant :

$$d\mu^s = d\mu_{ext}^s = \frac{dp^s}{\rho_{ext}^s} = \frac{1}{A} \frac{dp^s}{\rho^s} \quad (9.10)$$

La présence de l'activité macroscopique A dans (9.10) traduit l'effet de l'interaction sel/solide sur l'équation d'état du composant sel.

En introduisant l'énergie libre spécifique φ_{ext}^s du sel dans la solution fictive, on trouve encore :

$$\mu^s = \varphi_{ext}^s + \frac{p^s}{\rho_{ext}^s} \quad ; \quad d\varphi_{ext}^s = p^s \frac{d\rho_{ext}^s}{\rho_{ext}^s{}^2} \quad (9.11)$$

On introduit le groupement $\Psi - m^e \varphi^e - m^s \varphi_{ext}^s$, c'est-à-dire l'énergie libre totale diminuée des énergies libres de l'eau et du sel dans la solution fictive. En l'absence d'une interaction sel/solide, cette quantité représenterait l'énergie libre de la phase solide. Dans le cas présent, elle incorpore de fait l'énergie d'interaction sel/solide :

$$\Psi_{int}^{sq} = \Psi - m^e \varphi^e - m^s \varphi_{ext}^s \quad (9.12)$$

En utilisant (9.6), (9.9) et (9.11), la différentiation de (9.12) donne :

$$d\Psi_{int}^{sq} = \underline{\underline{\Sigma}} : d\underline{\underline{E}} + p^e d\left(\frac{m^e}{\rho^e}\right) + p^s d\left(\frac{m^s}{\rho_{ext}^s}\right) \quad (9.13)$$

D'après (9.4) et (9.5), ce résultat peut encore se mettre sous la forme :

$$d\Psi_{int}^{sq} = \underline{\underline{\Sigma}} : d\underline{\underline{E}} + p^e d\phi + p^s d\left(\frac{\phi}{A}\right) \quad (9.14)$$

(9.14) montre que la différence de traitement entre l'eau et le sel est directement liée à l'existence d'une interaction entre le sel et le solide, définie par le coefficient d'activité macroscopique A .

p^e et p^s apparaissent désormais clairement comme les forces thermodynamiques associées respectivement à la porosité lagrangienne ϕ et à la porosité *corrigée* ϕ/A .

Dans les milieux poreux saturés "classiques", la contrainte effective introduite par Terzaghi rend compte de l'action du fluide sur la déformation macroscopique du squelette. Lorsque

la phase solide est incompressible, elle est définie par la combinaison de la contrainte totale et de la pression totale du fluide de la forme³ $\underline{\underline{\Sigma}} + p\underline{\underline{\delta}}$. Ce concept a été généralisé au cas des géomatériaux à phase solide compressible par Biot sous la forme $\underline{\underline{\Sigma}} + b p \underline{\underline{\delta}}$ ($b \neq 1$). Dans la suite, on se place pour simplifier dans l'hypothèse où la **phase solide** est **incompressible** ($b = 1$).

Sous cette hypothèse, la relation (9.2) dans (9.14) permet de faire apparaître une contrainte effective "partielle", somme de la contrainte totale $\underline{\underline{\Sigma}}$ et de la pression partielle de l'eau p^e :

$$d\Psi_{int}^{sq} = (\underline{\underline{\Sigma}} + p^e \underline{\underline{\delta}}) : d\underline{\underline{E}} + p^s d\left(\frac{\phi}{A}\right) \quad (9.15)$$

Pour aboutir à l'expression d'une contrainte effective relative à la pression totale, il faudrait pouvoir introduire la pression partielle de sel. Cela n'est possible, d'après (9.15), que si $A = 1$, *i.e.* lorsqu'il n'existe aucune interaction électrique entre la phase solide et le sel en solution⁴.

La relation (9.15) amène à considérer Ψ_{int}^{sq} comme une fonction de $\underline{\underline{E}}$ et ϕ/A . Les équations d'état s'écrivent alors :

$$\underline{\underline{\Sigma}} + p^e \underline{\underline{\delta}} = \frac{\partial \Psi_{int}^{sq}}{\partial \underline{\underline{E}}} ; \quad p^s = \frac{\partial \Psi_{int}^{sq}}{\partial (\phi/A)} \quad (9.16)$$

En différenciant ces équations, on introduit un module de Biot M^s , un coefficient de Biot tensoriel du sel $\underline{\underline{B}}^s$ et un tenseur des modules élastiques $\mathbb{C}$, pouvant être déterminés à partir des dérivées d'ordre 2 de Ψ_{int}^{sq} . Il s'agit évidemment de coefficients tangents :

$$d\underline{\underline{\Sigma}} + dp^e \underline{\underline{\delta}} = \mathbb{C} : d\underline{\underline{E}} - M^s \underline{\underline{B}}^s d\left(\frac{\phi}{A}\right) \quad (9.17)$$

$$dp^s = M^s \left(-\underline{\underline{B}}^s : d\underline{\underline{E}} + d\left(\frac{\phi}{A}\right) \right) \quad (9.18)$$

On notera que le raisonnement thermodynamique établit l'égalité des coefficients de $d(\phi/A)$ dans (9.17) et $d\underline{\underline{E}}$ dans (9.18).

Un autre point de vue consiste à travailler avec le couple de variables d'état $(\underline{\underline{E}}, p^s)$ (et non $(\underline{\underline{E}}, \phi/A)$!). La forme correspondante des équations d'état est alors :

$$d\underline{\underline{\Sigma}} + dp^e \underline{\underline{\delta}} = \mathbb{C}_o : d\underline{\underline{E}} - \underline{\underline{B}}^s dp^s \quad (9.19)$$

³écrit ici avec la convention de contrainte positive en traction de la MMC

⁴on note que l'incompressibilité supposée des constituants solides entraîne $d\phi = d\underline{\underline{E}} : \underline{\underline{\delta}} = dE$ (cf. (9.2))

$$d\left(\frac{\phi}{A}\right) = \frac{1}{M^s} dp^s + \underline{\underline{B}}^s : d\underline{\underline{E}} \quad (9.20)$$

où $\mathbb{C}_o = \mathbb{C} - M^s \underline{\underline{B}}^s \otimes \underline{\underline{B}}^s$.

Manifestement, (9.19) constitue la généralisation au cas macroscopique tridimensionnel de l'équation d'état du "ressort" (8.18) introduite dans le cadre du modèle unidimensionnel du chapitre précédent. Dans le cas isotrope, où l'on a $\underline{\underline{B}}^s = b^s \underline{\underline{\delta}}$, (9.2) dans (9.20) permet d'obtenir l'expression suivante du coefficient de Biot du sel :

$$b^s = \frac{\partial(\phi/A)}{\partial E} \Big|_{p^s} = \frac{\partial(\phi/A)}{\partial \phi} \Big|_{p^s} \quad (9.21)$$

D'après (9.21), si le mélange eau-sel était idéal, *i.e.* si $A = 1$, on trouverait $b^s = 1$. En d'autres termes, l'écart à l'unité du coefficient d'activité macroscopique A se traduit dans le modèle mécanique par le fait que le coefficient de Biot associé au sel b^s n'est pas égal à 1. Plus l'interaction électrique entre les particules d'argile et le sel est importante, plus la différence $1 - b^s$ est grande.

Finalement, l'écart à l'idéalité de la solution saline de la porosité connectée se traduit dans le modèle mécanique par une déviation par rapport à la formulation classique en contrainte effective de Terzaghi.

9.1.2 modélisation d'un essai de gonflement

Il s'agit maintenant de tester la loi constitutive (9.19) formulée au paragraphe précédent. Est-elle capable de rendre compte des phénomènes observés au cours des essais de gonflement décrits en introduction ?

Pour simplifier, on se place dans le cas isotrope $\underline{\underline{B}}^s = b^s \underline{\underline{\delta}}$.

On examine ici deux situations expérimentales permettant de mettre en évidence le phénomène de gonflement osmotique des argiles.

Le premier type d'essais est destiné à produire une information quantitative sur le comportement gonflant de l'échantillon sous l'action d'une diminution de la concentration du milieu extérieur. C'est celui qui a été présenté au Chapitre 7 (cf. figure 7.3).

Le second, plutôt qualitatif, consiste à observer le comportement d'un échantillon d'argile libre de contrainte dans les mêmes conditions de chargement (cf. figure 9.2).

Le chargement est défini par une chute de la concentration en sel de la solution extérieure

$dn_{ext}^s < 0$ alors même que la pression totale de cette solution est maintenue constante. On rappelle que l'on se place dans la configuration d'équilibre entre la solution extérieure et la porosité connectée. Par conséquent, la solution thermodynamique équivalente peut être identifiée à la solution extérieure. On obtient ainsi $p^s = 2kTn_{ext}^s$, si bien que la pression partielle du sel décroît ($dp^s < 0$) pour le chargement considéré ici.

La pression totale étant maintenue constante au cours de l'essai, on a $dp = 0$, ce qui implique que $dp^e = -dp^s$. D'après ces conditions de chargement, (9.19) peut se simplifier sous la forme :

$$d\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}_o : d\underline{\underline{E}} - (b^s - 1) dp^s \underline{\underline{\delta}} \quad (9.22)$$

1. Pour les essais à déformation volumique empêchée ($d\underline{\underline{E}} = \underline{\underline{0}}$), l'équation (9.22) fournit une relation linéaire entre l'incrément de contrainte macroscopique $d\underline{\underline{\Sigma}}$ et l'incrément de pression de sel $dp^s < 0$, ou encore, de dn_{ext}^s :

$$d\underline{\underline{E}} = \underline{\underline{0}} \Rightarrow d\underline{\underline{\Sigma}} = (1 - b^s) dp^s \underline{\underline{\delta}} \quad (9.23)$$

On constate alors que la contrainte mobilisée au cours de ce chargement est compressive $d\underline{\underline{\Sigma}} < 0$ si et seulement si $b^s \leq 1$.

2. Pour les essais à contrainte constante, (9.22) permet d'exprimer l'incrément de déformation en fonction de dp^s :

$$d\underline{\underline{E}} = (b^s - 1) \frac{dp^s}{K_o} ; \quad K_o^{-1} = \underline{\underline{\delta}} : \mathbb{C}_o^{-1} : \underline{\underline{\delta}} \quad (9.24)$$

On constate qu'un gonflement $d\underline{\underline{E}} \geq 0$ se produit au cours de ce chargement si et seulement si $b^s \leq 1$.

On a vu précédemment que la relation $b^s \neq 1$ traduit l'écart à l'idéalité de la solution saline. Plus précisément, (9.24) montre très clairement que la tendance au gonflement est contrôlée quantitativement par la différence $1 - b^s$, c'est-à-dire l'écart à une formulation en contrainte effective de Terzaghi.

Si l'on utilise le concept de distance moyenne entre les particules d'argile, introduit en (8.19), et la relation (9.3), on est conduit à poser :

$$b^s = \frac{\partial(\phi/A)}{\partial\phi} \Big|_{p^s} \approx \frac{\partial(\bar{h}/A)}{\partial\bar{h}} \Big|_{p^s} \quad (9.25)$$

En combinant (8.21) et (9.25), il est possible de montrer que b^s est directement relié à la

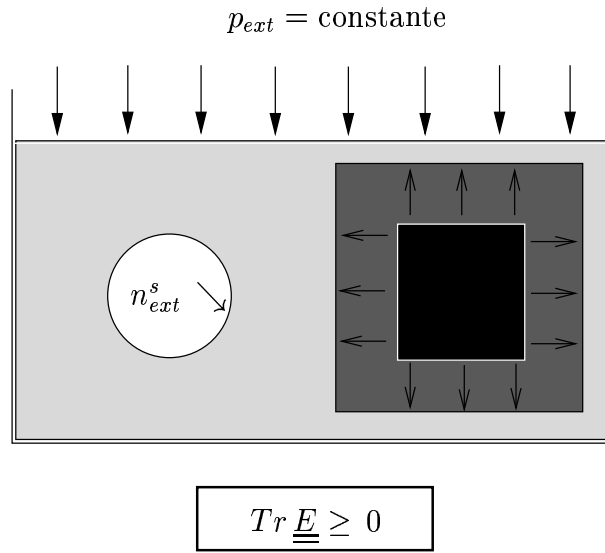


FIG. 9.2: gonflement osmotique libre

pente (négative) de la courbe d'évolution de la pression de gonflement en fonction de la pression de sel $\pi^g(p^s)$:

$$b^s = 1 + \frac{\partial \pi^g}{\partial p^s} \leq 1 \quad (9.26)$$

Sous cette forme, $\underline{\underline{B}}^s = b^s \underline{\underline{\delta}}$ apparaît clairement comme le correspondant tensoriel du scalaire β^s du modèle unidirectionnel proposé en (8.18).

En vertu de (9.26), la théorie de la double couche diffuse offre un cadre théorique permettant la détermination de b^s en fonction de la concentration de la solution fictive n_{ext}^s . Les résultats numériques sont présentés sur la figure 9.3.

Nous observons que l'écart au principe de la contrainte effective est d'autant plus marqué que la concentration en sel de la solution fictive n_{ext}^s est faible. De la même façon, l'écart à l'unité de b^s augmente si l'on diminue l'espace entre les particules d'argile. Dans les deux cas, le raisonnement qualitatif sur la longueur de Debye (8.8) indique que l'on augmente l'interaction sel/solide, ce qui se traduit par une augmentation de la différence $1 - b^s$.

9.1.3 extension aux transformations finies

On s'intéresse ici à l'extension de l'approche thermodynamique développée dans ce chapitre aux transformations finies. Cette démarche est motivée par l'ordre de grandeur des déformations mises en jeu dans le phénomène de gonflement osmotique des argiles.

Soit $\underline{\underline{F}}$ le gradient de la transformation du squelette et $J = \det \underline{\underline{F}}$ son jacobien. Le tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff est défini à partir de $\underline{\underline{\sigma}}$ de la façon suivante :

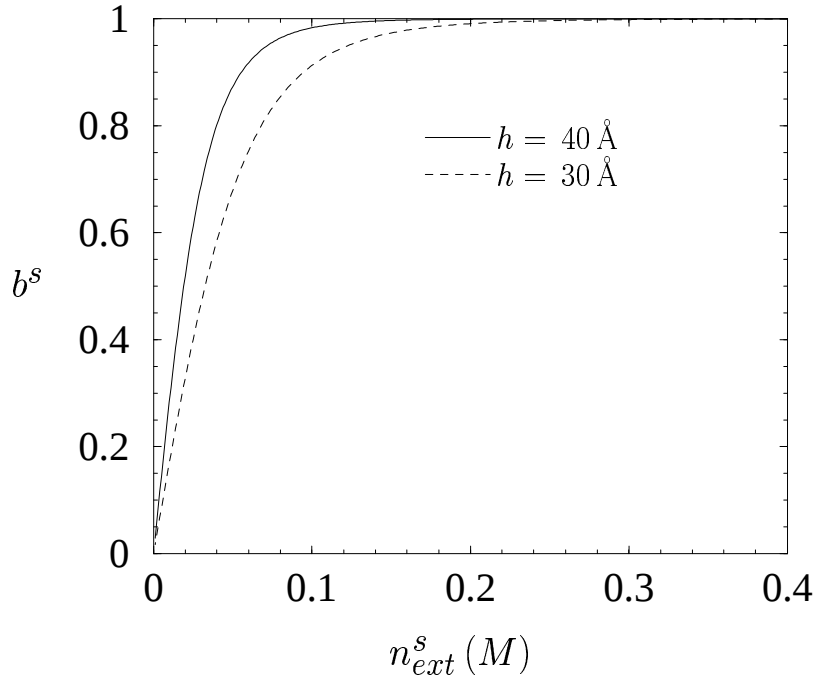


FIG. 9.3: écart au principe de la contrainte effective

$$\underline{\underline{\pi}} = J \underline{\underline{F}}^{-1} \underline{\underline{\sigma}}^t \underline{\underline{F}}^{-1} \quad (9.27)$$

De même, le tenseur des déformations de Green-Lagrange est défini par :

$$\underline{\underline{\Delta}} = \frac{1}{2}(\underline{\underline{F}}^T \underline{\underline{F}} - \underline{\underline{\delta}}) \quad (9.28)$$

L'idée consiste à obtenir une formulation de la loi de comportement du matériau en transformations finies sous forme différentielle analogue à (9.14) où $\underline{\underline{\pi}}$ et $\underline{\underline{\Delta}}$ vont jouer le rôle de $\underline{\underline{\sigma}}$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}$ respectivement.

Il convient en premier lieu d'établir l'homologue en transformations finies de (9.13) :

$$d\Psi_{int}^{sq} = \underline{\underline{\pi}} : d\underline{\underline{\Delta}} + p^e d\left(\frac{m^e}{\rho^e}\right) + p^s d\left(\frac{m^s}{\rho_{ext}^s}\right) \quad (9.29)$$

Les équations d'état se mettent alors sous la forme :

$$d\underline{\underline{\pi}} = \mathbb{C}_o : d\underline{\underline{\Delta}} - \underline{\underline{B}}^e dp^e - \underline{\underline{B}}^s dp^s \quad (9.30)$$

$$d\left(\frac{\phi}{A}\right) = \frac{1}{M^s} dp^s + \underline{\underline{B}}^s : d\underline{\underline{\Delta}} \quad (9.31)$$

où l'on montre (voir annexe 11.6) que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{B}}^e = \frac{\partial J}{\partial \underline{\underline{\Delta}}} = J(\underline{\underline{F}}^T, \underline{\underline{F}}) \\ \underline{\underline{B}}^s = \frac{\partial(\phi/A)}{\partial \phi} \Big|_{p^s} \underline{\underline{B}}^e \end{array} \right. \quad (9.32)$$

9.2 Une approche micromécanique

La vision macroscopique, présentée dans la section précédente, a permis de mettre en évidence la structure des équations macroscopiques gouvernant le comportement d'argiles sensibles au gonflement d'origine osmotique. Elles gèrent macroscopiquement l'existence d'un gonflement du matériau dont l'origine se situe à une échelle inférieure.

On cherche désormais à établir une connexion entre les informations disponibles à l'échelle de la microstructure et le comportement observé à l'échelle de la structure. Par nature, cette méthodologie doit permettre d'identifier l'origine des termes intervenant dans les équations gouvernant le comportement d'une argile gonflante.

Il s'agit d'adapter la démarche présentée au Chapitre III.6 en considérant le matériau argileux comme un milieu poreux saturé dans lequel les efforts intérieurs dans la phase fluide ne se réduisent pas à la seule pression hydrostatique du fluide.

9.2.1 définition des contraintes locales

La présente section s'attache à formuler le comportement mécanique macroscopique du v.e.r. $d\Omega(\underline{x})$ en appliquant la technique d'homogénéisation présentée au Chapitre III.6.

- Le comportement de la phase solide, ou encore matrice solide, est supposé élastique linéaire. On note $\mathbb{C}^s$, son tenseur des rigidités élastiques ('s' pour solide). A cette échelle, la loi de comportement élastique relie linéairement les tenseurs des contraintes et des déformations microscopiques $\underline{\underline{\sigma}}$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}$ respectivement :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C}^s : \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (9.33)$$

- La définition du comportement du fluide à l'échelle locale est beaucoup plus délicate. Nous définissons localement un pore par le domaine fluide compris entre deux particules d'argile parallèles. L'orientation de ce pore est définie par le vecteur normal unitaire aux particules, auxquelles on attache le repère orthonormé $(\underline{t}_1, \underline{t}_2, \underline{n})$. Chaque pore possède une orientation spécifique.

Rappelons que le fluide saturant l'espace poreux connecté est en équilibre avec la solution fictive de concentration saline $n_{th}^s(\underline{x})$ et de pression totale $p(\underline{x})$. Contrairement à la situation classique d'un fluide dont l'interaction avec la phase solide du matériau est purement mécanique, nous avons vu à la section 8.3.2 que la pression totale $p(\underline{x})$ est insuffisante pour représenter les efforts intérieurs dans le fluide, et qu'il faut recourir au tenseur $\underline{\underline{Q}}$ de (8.25).

Le tenseur de pression de gonflement, lié à l'interaction électrique à l'échelle locale, apparaît alors comme un complément à la pression totale hydrostatique du fluide. De fait,

l'état de contrainte dans la phase fluide est défini par un tenseur non sphérique :

$$\underline{\underline{\sigma}}^f = -p\underline{\underline{\delta}} - \underline{\underline{\Pi}}^g \quad ; \quad \underline{\underline{\Pi}}^g = \pi^{g'} (\underline{t}_1 \otimes \underline{t}_1 + \underline{t}_2 \otimes \underline{t}_2) + \pi^g \underline{n} \otimes \underline{n} \quad (9.34)$$

Il est important de noter que l'introduction du tenseur des contraintes $\underline{\underline{\Pi}}^g$ comme transcription mécanique de l'interaction électrique n'a été justifiée que dans le cas d'un pore délimité par deux particules d'argile parallèles. On prendra garde à ne pas généraliser ce résultat au cas de pores de forme quelconque.

En dépit de ses hypothèses simplificatrices, la théorie de la double couche diffuse a permis de mettre en évidence la dépendance des pressions de gonflement π^g et $\pi^{g'}$ en fonction de la concentration thermodynamique $n_{th}^s(\underline{x})$ et de la distance interparticulaire. Cette dernière, contrairement à $n_{th}^s(\underline{x})$, varie d'un pore à l'autre à l'intérieur du v.e.r.. De la même façon, les pressions de gonflement précitées ne sont pas uniformes dans $d\Omega(\underline{x})$, contrairement aux potentiels chimiques qui leur sont associés.

Néanmoins, comme pour (8.19), on se place dans la situation où l'on peut définir un demi-espace interparticulaire moyen, noté $\bar{h}$, pour lequel $\pi^g(n_{th}^s(\underline{x}), \bar{h})$ et $\pi^{g'}(n_{th}^s(\underline{x}), \bar{h})$ représentent de bonnes estimations des pressions de gonflement réelles. Celles-ci seront donc désormais supposées uniformes dans $d\Omega(\underline{x})$.

Dans l'hypothèse de la phase solide incompressible, la déformation volumique macroscopique $E = tr \underline{\underline{E}}$ et la variation de l'espace interparticulaire ne sont pas indépendantes. Plus précisément, si l'on combine (8.19) avec (9.2) et (9.3), on obtient :

$$(d\bar{h}/\bar{h}) = (dE/\phi) \quad (9.35)$$

D'après (9.35), les pressions de gonflement π^g et $\pi^{g'}$ pourront être interprétées comme des fonctions des deux variables d'état macroscopiques E et $n_{th}^s = p^s/2kT$.

9.2.2 principe de la méthode d'homogénéisation

On étudie maintenant la détermination du comportement d'un v.e.r. dans le cadre d'une démarche micromécanique. Cela requiert la définition du comportement à l'échelle locale. Le comportement du solide, supposé élastique linéaire, est donné par la relation (9.33). L'état de contrainte dans la phase fluide vérifie (9.34).

Comme à la Partie III de ce mémoire, l'idée consiste à traiter le comportement de chacune des phases de façon analogue. Il suffit pour cela de définir le comportement local de la façon suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{z}) = \mathbb{C}(\underline{z}) : \underline{\underline{\varepsilon}} + \underline{\underline{\sigma}}^p(\underline{z}) \quad (9.36)$$

où $\underline{\underline{\sigma}}^p(\underline{z})$ représente le tenseur des précontraintes locales.

Les quantités $\mathbb{C}(\underline{z})$ et $\underline{\underline{\sigma}}^p(\underline{z})$ mises en jeu dans (9.36), hétérogènes dans le v.e.r., sont homogènes dans chacune des deux phases :

$$\text{phase solide : } \begin{cases} \mathbb{C}(\underline{z}) = \mathbb{C}^s \\ \underline{\underline{\sigma}}^p(\underline{z}) = \underline{\underline{0}} \end{cases} \quad \text{phase fluide : } \begin{cases} \mathbb{C}(\underline{z}) = 0 \\ \underline{\underline{\sigma}}^p(\underline{z}) = \underline{\underline{\sigma}}^f \end{cases} \quad (9.37)$$

En raison de la linéarité du comportement de la phase solide, le tenseur des contraintes macroscopiques $\underline{\underline{\Sigma}}$ apparait comme une fonction de 4 paramètres de chargement, à savoir le tenseur des déformations macroscopiques $\underline{\underline{E}}$, la pression totale du fluide interstitiel p et des pressions de gonflement π^g et $\pi^{g'}$.

Dans le cas d'un comportement "drainé" ($p = \pi^g = \pi^{g'} = 0$), l'approche micromécanique se réfère classiquement au concept de *tenseur de localisation* $\mathbb{A}(\underline{z})$ (cf. Partie III). L'équation d'état macroscopique s'écrit donc :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}_{dr} : \underline{\underline{E}} \quad \text{avec} \quad \mathbb{C}_{dr} = \mathbb{C}^{hom} = \langle \mathbb{C}(\underline{z}) : \mathbb{A}(\underline{z}) \rangle \quad (9.38)$$

$\mathbb{C}_{dr}$ peut être interprété comme le tenseur des modules d'élasticité en condition drainée dont on a vu qu'il pouvait être déterminé expérimentalement pourvu que l'on satisfasse aux conditions $p = \pi^g = \pi^{g'} = 0$.

A partir de (9.37) et (9.38), et en utilisant la relation $\langle \mathbb{A} \rangle = \mathbb{I}$, $\mathbb{C}_{dr}$ s'exprime en fonction du tenseur des élasticités de la matrice :

$$\mathbb{C}_{dr} = \mathbb{C}^s : (\mathbb{I} - \phi \langle \mathbb{A} \rangle_f) \quad (9.39)$$

Dans le cas général, les conditions $p = \pi^g = \pi^{g'} = 0$ ne sont pas satisfaites. La micromécanique gère cette situation en introduisant dans l'expression du comportement à l'échelle macroscopique un tenseur des précontraintes $\underline{\underline{\Sigma}}^p$, correspondant macroscopique du tenseur des précontraintes $\underline{\underline{\sigma}}^p$ introduit dans (9.36). L'existence de ce tenseur et sa correspondance avec son homologue à l'échelle locale ont été étudiées dans la Partie III de ce mémoire. L'équation d'état macroscopique s'écrit alors :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}_{dr} : \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\Sigma}}^p \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{\Sigma}}^p = \langle \underline{\underline{\sigma}}^p(\underline{z}) : \mathbb{A}(\underline{z}) \rangle \quad (9.40)$$

Le tenseur des précontraintes macroscopiques $\underline{\underline{\Sigma}}^p$ intègre l'information sur la contribution de la pression totale du fluide et des pressions de gonflement dans l'évaluation de l'état de contrainte à l'échelle macroscopique.

$$\underline{\underline{\Sigma}}^p = -p\phi\underline{\underline{\delta}} : \langle \mathbb{A} \rangle_f - \phi < \underline{\underline{\Pi}}^g : \mathbb{A} \rangle_f \quad (9.41)$$

En introduisant (9.34) dans (9.41), on est amenés à définir les grandeurs suivantes :

$$\begin{cases} \underline{\underline{B}}_t = \phi < \underline{t}_1 \otimes \underline{t}_1 + \underline{t}_2 \otimes \underline{t}_2 : \mathbb{A} \rangle_f \\ \underline{\underline{B}}_n = \phi < \underline{n} \otimes \underline{n} : \mathbb{A} \rangle_f = \underline{\underline{B}} - \underline{\underline{B}}_t \end{cases} \quad (9.42)$$

où $\underline{\underline{B}}$ est le tenseur de Biot classique, donné en (III.(6.6)), obtenu en l'absence de pression de gonflement.

Dans (9.42), $\underline{\underline{B}}_t$ et $\underline{\underline{B}}_n$ représentent les moyennes des projections respectivement tangentielle et normale de $\mathbb{A}$ dans le repère local attaché aux groupements de particules d'argile.

Finalement, en tenant compte de III.(6.6), (9.41) et (9.42), l'équation de comportement macroscopique s'écrit :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}_{dr} : \underline{\underline{E}} - p\underline{\underline{B}} - \pi^g \underline{\underline{B}}_n - \pi^{g'} \underline{\underline{B}}_t \quad (9.43)$$

dans laquelle la contribution de chacune des pressions de gonflement est corrigée par un tenseur des coefficients de Biot associé.

D'autre part, on a vu en III.(6.7) que le tenseur des coefficients de Biot $\underline{\underline{B}}$ est relié au tenseur élastique macroscopique et au tenseur élastique de la matrice solide. Puisque l'on s'intéresse essentiellement au cas de matériaux argileux pour lesquels on suppose que la matrice solide est incompressible, on a la relation : $\mathbb{C}^{s-1} : \underline{\underline{\delta}} = 0$, si bien que : $\underline{\underline{B}} = \underline{\underline{\delta}}$.

9.2.3 comparaison avec l'approche macroscopique

La présente section confronte les résultats de l'approche thermodynamique macroscopique (section 9.1, eq. (9.19)), et ceux déterminés par l'approche micromécanique dans le paragraphe précédent. Cela nécessite d'exprimer l'équation (9.43) sous forme différentielle. On obtient alors pour une matrice solide incompressible :

$$d\underline{\underline{\Sigma}} + dp^e \underline{\underline{\delta}} = \mathbb{C}_o : d\underline{\underline{E}} - dp^s \underline{\underline{B}}^s \quad (9.44)$$

dans laquelle on a, en utilisant (9.35) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{(a)} \quad \mathbb{C}_o = \mathbb{C}_{dr} - \frac{\bar{h}}{\phi} \frac{\partial \pi^g}{\partial \bar{h}} \underline{\underline{B}}_n \otimes \underline{\underline{\delta}} - \frac{\bar{h}}{\phi} \frac{\partial \pi^{g'}}{\partial \bar{h}} \underline{\underline{B}}_t \otimes \underline{\underline{\delta}} \\ \text{(b)} \quad \underline{\underline{B}}^s = \underline{\underline{\delta}} + \frac{\partial \pi^g}{\partial p^s} \underline{\underline{B}}_n + \frac{\partial \pi^{g'}}{\partial p^s} \underline{\underline{B}}_t \end{array} \right. \quad (9.45)$$

Ces résultats méritent plusieurs commentaires.

1. L'approche micromécanique confirme la structure des équations d'état (9.19) formulées dans le cadre d'un raisonnement purement macroscopique, basé sur la thermodynamique des milieux poreux. En particulier, cette approche prévoit que l'écart à la formulation de la contrainte effective de Terzaghi est directement relié à l'existence d'une pression de gonflement.

2. L'approche micromécanique montre que le tenseur des modules d'élasticité tangents est la somme de deux contributions. La première, représentée par $\mathbb{C}_{dr}$, est de nature purement **mécanique**. Elle rend compte exclusivement de l'interaction mécanique entre les particules d'argile constituant, au moins en partie, la matrice solide du matériau argileux. De plus, (9.39) montre que cette élasticité ne dépend que du tenseur élastique de la matrice $\mathbb{C}^s$ et de la morphologie des pores par l'intermédiaire de $\langle \mathbb{A} \rangle_f$. C'est cette contribution que le modèle unidimensionnel "du ressort", de la section 8.3, était incapable de prendre en compte.

Le second terme est quant à lui de nature **physico-chimique**. La comparaison avec la rigidité k introduite par le modèle 1D dans l'expression (8.18) montre que l'origine physique de ce second terme est exactement celle dont rend compte le modèle 1D. La méthode d'homogénéisation conduit donc à une généralisation tridimensionnelle de "l'équation d'état" (8.18).

3. Les expressions de $\mathbb{C}_o$ et $\underline{\underline{B}}^s$ contiennent l'information sur l'anisotropie du comportement macroscopique lié à l'anisotropie de l'orientation des pores. Manifestement, cette information disparaît si l'on néglige la différence entre π^g et $\pi^{g'}$. Dans ce cas, on vérifie la relation $\underline{\underline{B}}_n + \underline{\underline{B}}_t = \underline{\underline{\delta}}$ (voir (9.42)), et l'on obtient une modélisation macroscopique isotrope de l'interaction physico-chimique :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{(a)} \quad \mathbb{C}_o = \mathbb{C}_{dr} - \frac{\bar{h}}{\phi} \frac{\partial \pi^g}{\partial \bar{h}} \underline{\underline{\delta}} \otimes \underline{\underline{\delta}} \\ \text{(b)} \quad \underline{\underline{B}}^s = (1 + \frac{\partial \pi^g}{\partial p^s}) \underline{\underline{\delta}} \end{array} \right. \quad (9.46)$$

On constate que (9.46b) confirme l'estimation obtenue par (9.26).

discussion et perspectives

Les résultats établis au paragraphe précédent permettent de discuter la contribution de l'élasticité de la phase solide dans la détermination de l'élasticité macroscopique d'un matériau argileux.

En effet, l'usage veut que l'on compare systématiquement les courbes de gonflement du type *indice des vides* = $f(\text{contrainte appliquée})$, obtenues dans des essais de compression à l'œdomètre ([18], [124], [95]), aux résultats théoriques proposés par la théorie de la double couche. Classiquement, la qualité de la prédiction théorique dépend de la nature de l'argile :

1. Pour les argiles gonflantes de la famille des smectites, la comparaison est très satisfaisante pour de très faibles concentrations de la solution extérieure [18]. A ce propos, il est important de préciser que cette comparaison n'est pertinente que dans la phase de décompression-recompression du matériau. En effet, dans la première phase de compression, l'orientation des particules d'argile est totalement aléatoire si bien que l'hypothèse principale de la-dite théorie sur l'arrangement parallèle des particules n'est pas vérifiée. A l'issue de cette phase de compression, les particules sont globalement parallèles entre elles.
2. Dans les autres situations (fortes concentrations, cations polyvalents, Kaolinites, voire Illites), la théorie de la double couche sous-estime l'élasticité réelle du matériau dans la mesure où elle néglige, de fait, les contacts entre les constituants solides. Notre modélisation apporte une réponse qualitative et quantitative à cette question. Elle met en évidence une élasticité macroscopique égale à la somme de deux élasticités de nature différente : l'une mécanique, l'autre physico-chimique.

Du point de vue micromécanique, l'argile peut être représentée comme un composite dans lequel l'espace interparticulaire s'identifie à une inclusion fluide noyée dans une phase matricielle dont l'élasticité est associée à l'existence de ponts entre les particules d'argile. Les dimensions usuelles de l'espace interparticulaire permettent d'envisager une géométrie inclusionnaire du type ellipsoïdes aplatis dont on sait, par ailleurs, estimer le tenseur

d'Eshelby [47]. Un calcul utilisant la démarche micromécanique présentée en 9.2.2 conduirait à une estimation quantitative de chacune des contributions élastiques. Plus précisément, on pourrait alors envisager leur influence en fonction du niveau de concentration et de la famille d'argile considérée. Si la géométrie très aplatie des Montmorillonites tend naturellement à privilégier une élasticité du type double-couche, celle, plus massive, des Kaolinites favorise les contacts entre les particules. Dans ce cas, l'élasticité mécanique est certainement prépondérante.

N.B. : l'élasticité de la "matrice" étant certainement fortement non linéaire, il serait plus fructueux d'en tenir compte dans la modélisation proposée. On se reportera aux travaux de P. Suquet [118] sur l'homogénéisation d'un comportement localement non linéaire pour une approche systématique.

Dans la pratique, l'argile rentre dans la composition de nombreux géomatériaux. C'est le cas notamment des argilites pour lesquelles l'argile, dont le comportement intègre une composante physique et une composante mécanique, coexiste avec d'autres matériaux de comportement essentiellement mécanique. De plus, l'argilite apparaît comme un matériau pour lequel il existe une échelle intermédiaire où l'on distingue deux phases : l'une physique, l'autre mécanique dont le comportement a été obtenu par une première homogénéisation (cf. (9.43) et III.(6.5)).

Il est clair qu'un raisonnement micromécanique est bien adapté à cette représentation biphasique de l'argilite. Le choix porte alors sur le rôle matriciel ou inclusionnaire de l'argile.

9.2.4 application au comportement des argilites

On se propose d'adapter le raisonnement micromécanique présenté en 9.2.2 pour estimer l'impact du gonflement osmotique de l'argile sur le comportement de l'argilite.

Les argilites, encore appelées *schistes argileux*, sont des géomatériaux dont la microstructure est composée par différents matériaux de comportements très divers (cf. fig 9.4) :

1. de l'argile, le plus souvent en amas compactés,
2. des minéraux non-argileux tels le sable, le limon et le quartz,
3. des ciments et du silica,
4. un espace poreux, saturé ou non.

Du point de vue de l'homogénéisation, nous traiterons l'argilite comme un matériau biphasique constitué d'argile (phase I) et d'une phase complémentaire (phase II) dans laquelle le solide est inerte sur le plan physico-chimique par rapport à la solution saline :

- Phase I : le matériau argileux est supposé constitué au moins en partie d'argiles gonflantes au sens du gonflement osmotique. Son comportement, supposé isotrope, est

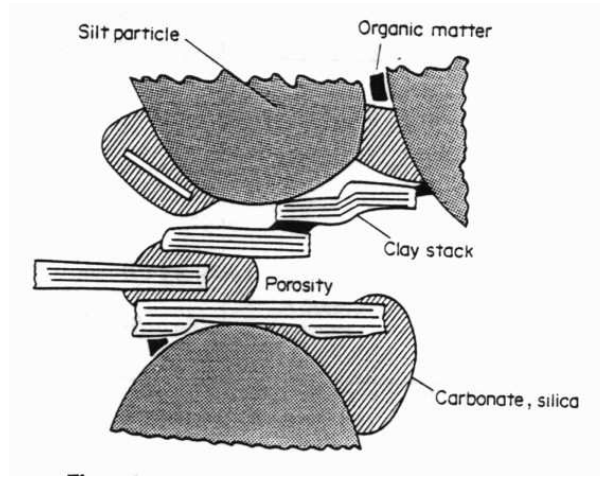


FIG. 9.4: un modèle conceptuel pour les argilites

donné par (9.43). Le gonflement osmotique est supposé isotrope. L'hypothèse d'incompressibilité des constituants solides du matériau argileux est une nouvelle fois retenue. Par conséquent, (9.43) se réduit finalement à⁵ :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C}_{dr} : \underline{\underline{\varepsilon}} - (p + \pi^g) \underline{\underline{\delta}} \quad (9.47)$$

- Phase II : c'est la phase complémentaire de la précédente. Elle regroupe tous les constituants non-argileux de l'argilite et s'identifie à un milieu poreux saturé par un fluide de même composition que celui saturant l'espace poreux de la phase argileuse. Son comportement, supposé élastique isotrope, est donné par⁶ :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C}_c : \underline{\underline{\varepsilon}} - p \underline{\underline{\delta}} \quad (9.48)$$

Pour ces deux matériaux, la structure des équations d'état relève donc de la forme générale $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{z}}) = \mathbb{C}(\underline{\underline{z}}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{z}}) + \underline{\underline{\sigma}}^p(\underline{\underline{z}})$.

Cook [29] soulève la question de la morphologie de la microstructure d'une argilite. Considérant l'argilite comme un composite défini par une phase matricielle (milieu 1) et une phase inclusionnaire (milieu 2), il envisage deux configurations :

- la première, “*very shaley sand*”, appelée *morphologie A* dans la suite, s'apparente à un composite à matrice poroélastique (phase II) comportant des inclusions d'argile (phase I) :

⁵on passe en minuscule pour rendre compte de l'échelle à laquelle on travaille

⁶“c” pour complémentaire

$$\text{milieu 1 : } \begin{cases} \mathbb{C}_1 = \mathbb{C}_c \\ \underline{\underline{\sigma}}_1^p = -p \underline{\underline{\delta}} \end{cases} \quad \text{milieu 2 : } \begin{cases} \mathbb{C}_2 = \mathbb{C}_{dr} \\ \underline{\underline{\sigma}}_2^p = -(p + \pi^g) \underline{\underline{\delta}} \end{cases} \quad (9.49)$$

– la deuxième, “*very sandy shale*”, appelée *morphologie B* dans la suite, s’identifie plutôt à une matrice argileuse (phase I) comportant des inclusions poroélastiques (phase II) :

$$\text{milieu 1 : } \begin{cases} \mathbb{C}_1 = \mathbb{C}_{dr} \\ \underline{\underline{\sigma}}_1^p = -(p + \pi^g) \underline{\underline{\delta}} \end{cases} \quad \text{milieu 2 : } \begin{cases} \mathbb{C}_2 = \mathbb{C}_c \\ \underline{\underline{\sigma}}_2^p = -p \underline{\underline{\delta}} \end{cases} \quad (9.50)$$

$$\underline{\underline{NB}} : \underline{\underline{\sigma}}_\alpha^p = \sigma_\alpha^p \underline{\underline{\delta}} \quad (\alpha = 1, 2).$$

Rappelons que $\mathbb{C}_{dr}$ représente l’élasticité d’origine mécanique de l’argile, attribuée à l’existence de ponts solides entre les particules d’argile.

La modélisation proposée dans la suite s’appuie sur la représentation du milieu homogénéisé, *i.e.* l’argilite, comme un matériau composite comportant une matrice et une phase inclusionnaire (cf. Fig. 9.5). La méthodologie est identique à celle présentée au Chapitre III.6.

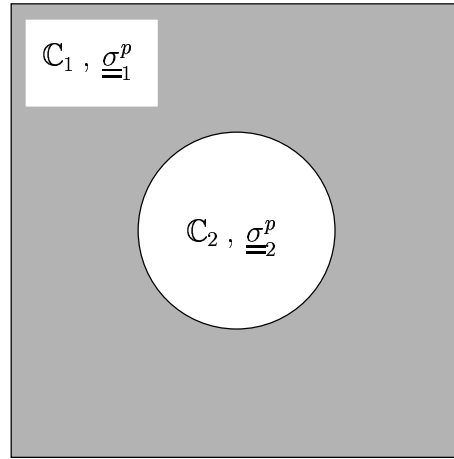


FIG. 9.5: représentation schématique d’une argilite

On rappelle que le comportement macroscopique peut se mettre sous la forme :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\Sigma}}^p \quad (9.51)$$

où $\mathbb{C}^{hom}$ désigne le tenseur d’élasticité de l’argilite et $\underline{\underline{\Sigma}}^p$, le tenseur des précontraintes macroscopiques. Le recours au schéma d’estimation de Mori-Tanaka, permet une détermination de l’élasticité homogénéisée⁷ :

⁷on pourra se reporter à [126] pour plus de détails

$$\mathbb{C}^{hom} = \mathbb{C}_1 + (1 - f_1) (\mathbb{C}_2 - \mathbb{C}_1) : \langle \mathbb{A} \rangle_2 \quad (9.52)$$

avec :

$$\langle \mathbb{A} \rangle_2 = (\mathbb{I} + \mathbb{P}_1 : (\mathbb{C}_2 - \mathbb{C}_1))^{-1} : \langle (\mathbb{I} + \mathbb{P}_1 : (\mathbb{C} - \mathbb{C}_1))^{-1} \rangle^{-1} \quad (9.53)$$

Pour fixer les idées, notre propos se limitera à des inclusions de forme sphérique pour lesquelles la forme du tenseur $\mathbb{P}_1$ est très simple⁸ :

$$\mathbb{P}_1 = \frac{\alpha_1}{3k_1} \mathbb{J} + \frac{\beta_1}{2\mu_1} \mathbb{K} \quad \text{avec :} \quad \begin{cases} \alpha_1 = \frac{3k_1}{3k_1 + 4\mu_1} \\ \beta_1 = \frac{6}{5} \frac{(k_1 + 2\mu_1)}{(3k_1 + 4\mu_1)} \end{cases} \quad (9.54)$$

Le schéma utilisé (Mori-Tanaka) prévoit dans ces conditions que le matériau hétérogène étudié a un comportement global isotrope, défini par les deux modules μ^{hom} et k^{hom} :

$$\mathbb{C}^{hom} = 3K^{hom} \mathbb{J} + 2\mu^{hom} \mathbb{K} \quad (9.55)$$

Par conséquent, (9.52)-(9.53)-(9.54)-(9.55) fournissent l'expression du module de compression K^{hom} de l'argilite :

$$K^{hom} = k_1 + (1 - f_1) (k_2 - k_1) \frac{1}{1 + f_1 \frac{\alpha_1}{k_1} (k_2 - k_1)} \quad (9.56)$$

D'autre part, on démontre que l'expression du tenseur des précontraintes $\underline{\underline{\Sigma}}^p$ est donnée par⁹ :

$$\underline{\underline{\Sigma}}^p = \langle \underline{\underline{\sigma}}^p \rangle + (\mathbb{C}^{hom} - \langle \mathbb{C} \rangle) : (\mathbb{C}_2 - \mathbb{C}_1)^{-1} : (\underline{\underline{\sigma}}_2^p - \underline{\underline{\sigma}}_1^p) \quad (9.57)$$

La moyenne des précontraintes sur le v.e.r. se réduit, d'après (9.49) et (9.50), à :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}}^p \rangle = -(p + f_a \pi^g) \underline{\underline{\delta}} \quad (9.58)$$

⁸ $\mathbb{J}_{ijkl} = \frac{1}{3} \delta_{ij} \delta_{kl}$, $\mathbb{J} + \mathbb{K} = \mathbb{I}$

⁹ par analogie avec le problème thermoélastique traité par Levin [126]

où f_a est la fraction volumique d'argile dans l'argilite.

La combinaison de (9.55), (9.56), (9.57) et (9.58) aboutit alors à :

$$\underline{\underline{\Sigma}}^p = -(p + f_a \pi^g) \underline{\underline{\delta}} - (1 - f_1) \frac{(\sigma_2^p - \sigma_1^p)}{1 + \frac{1 + 4\mu_1/3k_1}{f_1(k_2/k_1 - 1)}} \underline{\underline{\delta}} \quad (9.59)$$

avec : $4\mu_1/3k_1 = \frac{2(1 - 2\nu_1)}{1 + \nu_1}$.

La loi de comportement de l'argilite (9.51) possède finalement une structure analogue à (9.47) où la pression de gonflement π^g est corrigée par un coefficient b' qui rend compte de la fraction volumique d'argile, des élasticités mises en jeu, et de la morphologie considérée :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}} - p \underline{\underline{\delta}} - b' \pi^g \underline{\underline{\delta}} \quad \text{avec } b' = f_a + \frac{\epsilon(1 - f_1)}{1 + \frac{1 + 4\mu_1/3k_1}{f_1(k_2/k_1 - 1)}} \quad (9.60)$$

où $\epsilon = -1$ (resp. $\epsilon = +1$) et $f_1 = 1 - f_a$ (resp. $f_1 = f_a$) pour la morphologie A (resp. B).

A titre d'illustration, on considère l'essai de gonflement libre isotrope sous pression constante (Fig.9.2) présenté en 9.1.2. Il est défini macroscopiquement par le couple ($\underline{\underline{E}} = E \underline{\underline{\delta}}$, $\underline{\underline{\Sigma}} = -p \underline{\underline{\delta}}$). Dans ces conditions, (9.60) s'écrit désormais¹⁰ :

$$E = \frac{1}{3} \frac{b' \pi^g}{K^{hom}} \quad (9.61)$$

où K^{hom} est donné en (9.56).

Pour simplifier, on suppose que le coefficient de Poisson ne varie pas d'une phase à l'autre et vaut $\nu_1 = 1/3$.

On est à présent en mesure de tester l'impact de chacune des deux morphologies retenues sur le potentiel de gonflement de l'argilite. Dans les deux cas, le module de compression k_c de la phase non-argileuse est supposé donné et le rapport $\kappa = k_{dr}/k_c$ est un paramètre du modèle.

- la morphologie A confère au matériau argileux le rôle de phase inclusionnaire dans une matrice dont le comportement est celui d'un matériau poreux saturé par un fluide à la pression p . En vue d'exprimer la déformation macroscopique "osmotique" (9.61) associée à cette représentation de l'argilite, on précise en premier lieu les expressions

¹⁰la configuration sous pression p avant gonflement est choisie comme référence

du module de compression homogénéisé K_A^{hom} et du paramètre b'_A , données respectivement en (9.56) et (9.60) :

$$\begin{cases} K_A^{hom} = k_c \frac{f_a(\kappa - 1) + (1 + 2\kappa)}{2f_a(1 - \kappa) + (1 + 2\kappa)} \\ b'_A = \frac{3f_a}{2f_a(1 - \kappa) + (1 + 2\kappa)} \end{cases} \quad (9.62)$$

D'après (9.61), la déformation macroscopique se met donc sous la forme¹¹ :

$$E_A = \frac{f_a}{2f_a(1 - \kappa) + (1 + 2\kappa)} \frac{\pi^g}{K_A^{hom}} \quad (9.63)$$

- la morphologie B intervertit les rôles joués par chacune des phases dans le premier cas. Le matériau argileux constitue désormais la phase matricielle de l'argilite. Dans ce cas, on exprime le module de compression homogénéisé K_B^{hom} et le paramètre b'_B sous la forme :

$$\begin{cases} K_B^{hom} = k_c \frac{\kappa(f_a(\kappa - 1) + 3)}{2f_a(1 - \kappa) + 3\kappa} \\ b'_B = \frac{f_a(\kappa + 2)}{2f_a(1 - \kappa) + 3\kappa} \end{cases} \quad (9.64)$$

La déformation macroscopique est alors donnée par :

$$E_B = \frac{f_a(2 + \kappa)}{3(2f_a(1 - \kappa) + 3\kappa)} \frac{\pi^g}{K_B^{hom}} \quad (9.65)$$

On présente ci-après l'influence de f_a et κ sur l'évolution du module de compression homogénéisé et de la déformation "osmotique" de l'argilite suivant le type de morphologie considéré.

- **étude de K^{hom}** : D'après la figure 9.6(a), à k_c fixé le module de compression homogénéisé est une fonction croissante de la variable κ . Ce résultat était évidemment attendu puisqu'il consiste à examiner, à k_c fixé, l'effet d'une augmentation de k_{dr} . Pour une répartition spatiale isotrope des phases, K_A^{hom} et K_B^{hom} constituent des bornes (celles de Hashin-Shtrikman) encadrant le module K^{hom} réel. Par ailleurs, lorsque κ tend vers 1 ($\kappa > 0.6$) et pour une fraction volumique d'argile donnée, on retrouve l'indépendance

¹¹ K^{hom} est une grandeur accessible expérimentalement ; c'est la raison pour laquelle la pression π^g est normalisée par K^{hom} dans (9.63) et (9.65)

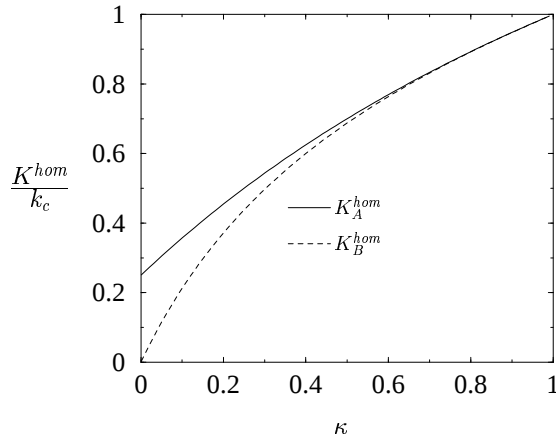
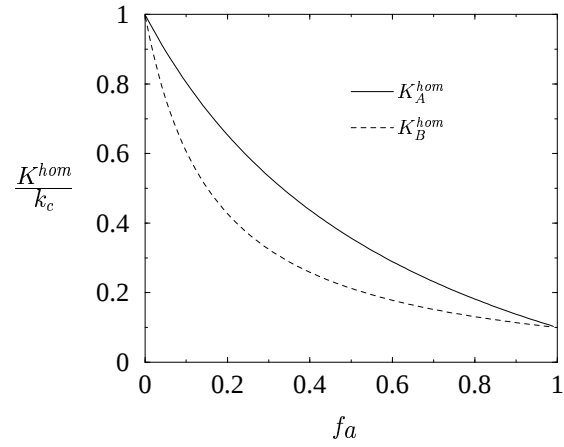
(a) K^{hom} en fonction de κ ($f_a=0.5$)(b) K^{hom} en fonction de f_a ($\kappa=0.1$)

FIG. 9.6: évolution du module de compression de l'argilite

attendue du module de compression homogénéisé vis-à-vis de la morphologie retenue.

La figure 9.6(b) fournit, pour une valeur de κ donnée et dans le cadre des hypothèses de travail, des bornes du module de compression homogénéisé, sous la forme d'un fuseau, en fonction de la fraction volumique d'argile. L'écart entre les deux courbes est contrôlé par la valeur de κ . Il augmente lorsque $\kappa \rightarrow 0$.

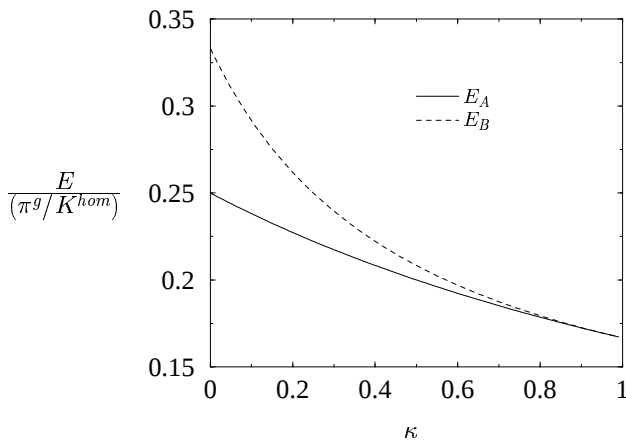
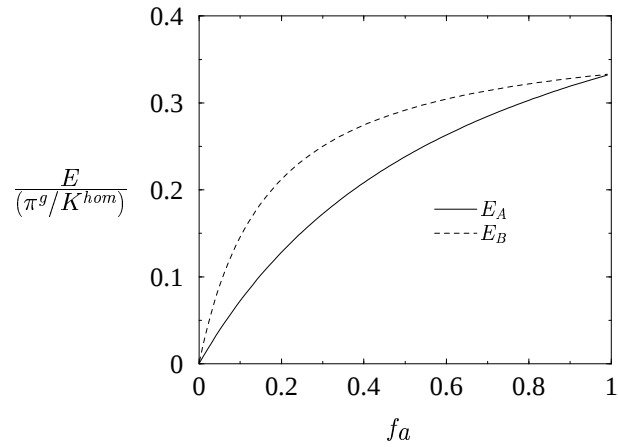
(a) E en fonction de κ ($f_a=0.5$)(b) E en fonction de f_a ($\kappa=0.1$)

FIG. 9.7: évolution de la déformation “osmotique” de l'argilite

- **étude du gonflement libre** : Pour une valeur donnée de la fraction volumique de la phase argileuse, les deux courbes de la figure 9.7(a) montrent que le rapport $E/(\pi^g / K^{hom})$ est fini pour l'intervalle de κ considéré. Ces deux courbes d'apparence voisine correspondent cependant physiquement à des comportements très différenciés. En effet, lorsque l'on fait tendre κ vers 0, la figure 9.6(a) prévoit, pour la morphologie B , un module de compression qui tend vers 0. Par conséquent, la déformation macroscopique devient “infinie” si l'argile constitue la phase matricielle et ne dispose pas d'élasticité mécanique ($k_{dr} \rightarrow 0$). Ce scénario est cohérent avec de nombreux résultats expérimentaux qui ont mis en évidence des gonflements libres “infinis” pour des matériaux argileux, composés essentiellement d'argile gonflante, en contact avec une solution d'eau pure (cf. Fig.9.2).

En revanche, pour la morphologie B , l'existence d'une élasticité de la matrice environnante permet de contrôler le gonflement osmotique de l'argile inclusionnaire si bien que la déformation macroscopique reste finie.

D'autre part, lorsque les modules de compression de chacune des deux phases sont du même ordre de grandeur ($\kappa \approx 1$), le matériau se déforme indépendamment de la morphologie considérée.

- **forme différentielle de la loi de comportement d'une argilite** : Dans le cadre de la modélisation macroscopique du gonflement osmotique présentée ici, la correspondance entre les lois de comportement des argiles (9.43) et des argilites (9.60) permet d'identifier le coefficient de Biot du sel d'une argilite b_α^s en fonction du coefficient de Biot du sel d'une argile b^s , en exploitant le raisonnement présenté en 9.2.3. L'indice $\alpha = A, B$ fait référence à la morphologie du composite.

Sous forme différentielle, (9.60) s'écrit :

$$d\underline{\underline{\Sigma}} + dp^e \underline{\underline{\delta}} = \mathbb{C}_o^{hom} : d\underline{\underline{E}} - b_\alpha^s dp^s \underline{\underline{\delta}} \quad (9.66)$$

· $\mathbb{C}_o^{hom}$ est le correspondant “argilite” de $\mathbb{C}_o$ dans (9.44) et (9.46.(a)).

Pour s'en convaincre, il suffit d'exprimer la relation de localisation entre la déformation de l'argile $\underline{\underline{\varepsilon}}_I$ et la déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}$:

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_I = \langle \mathbb{A} \rangle_I : \underline{\underline{E}} \quad (9.67)$$

On obtient alors la relation homologue de (9.35) :

$$(d\bar{h}/\bar{h}) = (\underline{\delta} : < \mathbb{A} >_I : d\underline{E})/\phi \quad (9.68)$$

En tenant compte de (9.68), $\mathbb{C}_o^{hom}$ se met exactement sous la forme annoncée :

$$\mathbb{C}_o^{hom} = \mathbb{C}^{hom} - \frac{\bar{h}}{\phi} \frac{\partial \pi^g}{\partial \bar{h}} (\underline{\delta} : < \mathbb{A} >_I) \otimes \underline{\delta} \quad (9.69)$$

(9.69) montre que l'effet osmotique introduit une non linéarité dans la formulation différentielle du comportement de l'argilite analogue à celle obtenue dans le cas des argiles (cf. (9.46.a)). L'équivalence est obtenue lorsque $< \mathbb{A} >_I = \mathbb{I}$, *i.e.* lorsque l'effet de morphologie disparaît (loi des mélanges).

$\cdot b_\alpha^s$ ($\alpha = A, B$) est donné par :

$$b_\alpha^s = 1 + b'_\alpha(\kappa, f_a) [b^s - 1] \quad (9.70)$$

où b^s est défini en (9.46.(b)) et b'_α est donné en (9.62) (resp. (9.64)) pour la morphologie A (resp. B).

Alors que b^s rend compte de l'effet osmotique sur le comportement de l'argile, (9.70) montre que b_α^s contrôle le même effet sur le comportement de l'argilite en intégrant les caractéristiques mécaniques (k_{dr} , k_c), la valeur de la fraction volumique d'argile (f_a) et des considérations morphologiques.

Evidemment, on remarque qu'en l'absence de gonflement d'origine osmotique ($b^s = 1$), on trouve bien $b_\alpha^s = 1$ et (9.66) s'identifie à une formulation de Terzaghi.

La valeur de b' intègre toute l'information nécessaire pour effectuer le changement d'échelle relatif à l'effet osmotique. Plus précisément, d'après (9.70), b' représente le rapport entre l'écart à l'unité de b_α^s et celui de b^s :

$$b' = \frac{b_\alpha^s - 1}{b^s - 1} \quad (9.71)$$

En d'autres termes, il constitue une estimation de la répercussion sur le comportement macroscopique de l'argilite de l'existence d'une interaction sel/solide dans la phase argileuse. Les figures 9.8(a) et 9.8(b) illustrent (9.70) pour les deux types de morphologie envisagés pour représenter l'argilite.

Pour l'intervalle $0 \leq \kappa \leq 1$ considéré, les résultats de la figure 9.8 montrent que $b' \leq 1$. Par conséquent, puisque $b^s \leq 1$ (cf. (9.26)) alors $b_\alpha^s \leq b^s$. L'effet osmotique est en quelque

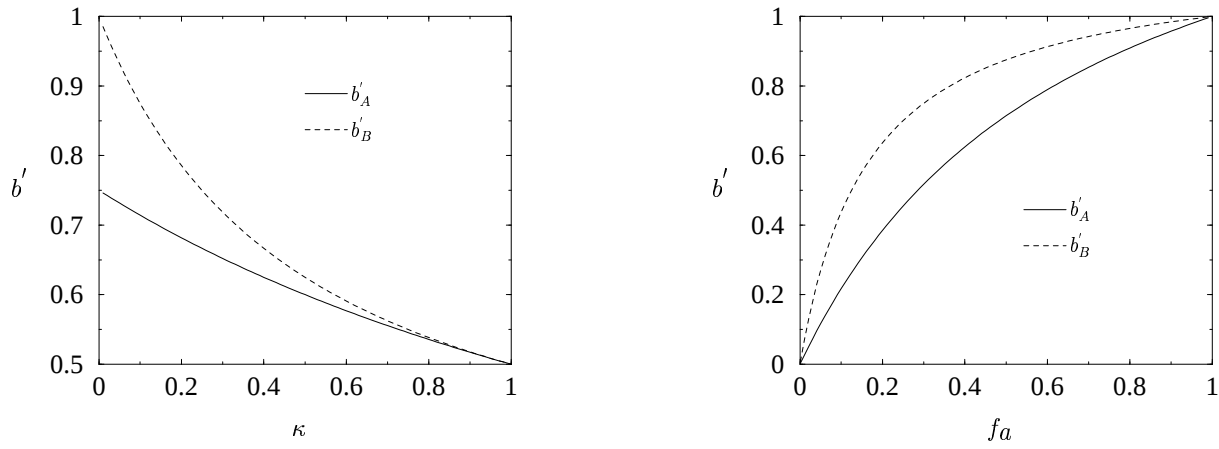
(a) b' en fonction de κ ($f_a=0.5$)(b) b' en fonction de f_a ($\kappa=0.1$)

FIG. 9.8: correspondance des écarts à l'unité

sorte tempéré par le mélange de l'argile avec une phase inerte. Il l'est d'autant plus pour la morphologie A dans laquelle l'argile inclusionnaire se trouve "piégée" dans une matrice élastique.

La figure 9.8(a) montre, pour des valeurs de κ proches de 1, que l'effet de morphologie disparaît si bien que l'on tend vers une loi des mélanges :

$$\kappa \approx 1 \Rightarrow b'_A = b'_B = f_a \quad (9.72)$$

L'intérêt de ce résultat réside dans le fait qu'il permet d'estimer le coefficient de Biot du sel d'une argilite à partir d'une information disponible minimale, *i.e* le coefficient de Biot du sel b^s et la fraction volumique de l'argile f_a .

On retiendra que, pour les argilites, le coefficient de Biot du sel dépend non seulement de la concentration en sel n_{ext}^s et de l'espacement moyen entre les particules $\bar{h}$ mais aussi de la fraction volumique d'argile f_a , du rapport κ des modules élastiques des deux phases constituant l'argilite et de la morphologie de l'argilite.

Chapitre 10

Simulation de l'essai œdométrique en phase transitoire

Sommaire

10.1 Introduction	217
10.2 Approche phénoménologique du transport	217
10.2.1 l'approche (usuelle) thermodynamique	218
10.2.2 l'approche mécanique	222
10.3 Simulation de l'essai	227
10.3.1 le dispositif expérimental	227
10.3.2 analyse des résultats expérimentaux	230
10.3.3 les équations du problème	234
10.3.4 tassement de l'échantillon	236
10.4 Résolution	237
10.4.1 problème sans couplage	238
10.4.2 présentation des simulations théoriques	242
10.4.3 problème avec couplage	243
10.4.4 présentation des résultats théoriques	248

10.1 Introduction

A partir d'une situation d'équilibre, on expose un échantillon d'argilite, placé dans une cellule œdométrique, à une solution saline extérieure concentrée au niveau de sa face supérieure. La contrainte verticale s'exerçant sur l'échantillon est maintenue constante. En mesurant la pression à la base de l'échantillon, on observe un régime transitoire comportant une phase de décroissance de la pression puis un retour progressif vers la valeur initiale. Dans le même temps, on observe une contraction de l'échantillon. Ce comportement contractant est interprété ici comme le résultat d'un incrément positif de concentration saline. La simulation d'un tel essai comporte deux aspects :

1. Il s'agit d'une part de rendre compte des déformations permanentes dans l'échantillon entre l'état initial et l'état asymptotique correspondant à l'équilibre avec la nouvelle concentration extérieure. Si l'évolution de l'état de contrainte et des pressions entre les états initial et asymptotique est connue, la formulation macroscopique (9.66) développée à la section 9.2.4 répond à la question¹ :

$$d\underline{\underline{\Sigma}} + dp^e \underline{\underline{\delta}} = \mathbb{C}_o^{hom} : d\underline{\underline{E}} - b^s dp^s \underline{\underline{\delta}} \quad (10.1)$$

2. La description de la phase transitoire de l'essai nécessite de disposer en outre d'une formulation des lois de transport de l'eau et du sel dans le milieu poreux dont l'objet est de rendre compte des mouvements de ces deux constituants de la phase fluide.

Le problème transitoire couplé se présente comme un ensemble d'équations comportant les lois de conservation de la masse de l'eau, du sel et du squelette, les lois de transport de l'eau et du sel et la loi de comportement du squelette. On va montrer que l'on aboutit à deux équations de diffusion couplées (type "équation de la chaleur") contrôlant respectivement l'évolution des pressions partielles du solvant (l'eau) et du soluté (le sel). Dans le cadre d'hypothèses simplificatrices, on propose une solution semi-analytique sous forme de séries, donnant accès aux profils de déformation, pressions partielles et totale en phase transitoire dans l'échantillon.

10.2 Approche phénoménologique du transport

La problématique du transport dans les géomatériaux a été largement évoquée dans la littérature scientifique de la deuxième moitié du vingtième siècle.

¹le coefficient de Biot du sel est noté ici b^s pour simplifier. Il correspond au coefficient b_α^s dans (9.66)

L'usage veut que la question soit traitée dans le cadre théorique de la *thermodynamique des processus irréversibles* ([35], [92], [82]). Cette théorie est basée sur le formalisme de non-équilibre thermodynamique. Elle offre un cadre d'analyse théorique de la physique mise en jeu dans des processus de transport complexes. Au delà des situations d'équilibre (états initial et final d'une évolution), traitées de façon rigoureuse par la *Thermodynamique usuelle*, ce sont les situations hors-équilibre que l'on cherche à identifier.

10.2.1 l'approche (usuelle) thermodynamique

Si l'on admet classiquement la validité des premier et second principes de la thermodynamique, il convient toutefois de rappeler les principales hypothèses (sous la forme de postulats) sur lesquelles repose la théorie des processus irréversibles :

1. *l'équilibre local*

Exceptées les situations de régimes turbulents et de phénomènes d'ondes de chocs, cette hypothèse est validée expérimentalement pour de faibles variations autour d'une situation d'équilibre.

2. *les relations de comportement linéaires*

Dans la problématique du transport d'un soluté (le sel) dans un solvant (l'eau), les comportements advectif et diffusif expriment des relations linéaires entre les flux $\underline{J}^\alpha$ ($\alpha=e,s$) et les gradients $\underline{X}^\alpha$: loi de Darcy et loi de Fick. Lorsque le mouvement de l'eau (resp. du sel) est induit par le gradient $\underline{X}^s$ (resp. $\underline{X}^e$) attaché au transport du sel (resp. de l'eau), on met en évidence un couplage entre les transports de ces deux entités en solution :

$$\underline{J}^\alpha = L_{\alpha\beta} \underline{X}^\beta \quad (\alpha, \beta = e, s) \quad (10.2)$$

où $L_{\alpha\alpha}$ est le coefficient "direct" et $L_{\alpha\beta}$ le coefficient de couplage² entre le flux de l'espèce α et le gradient de l'espèce β .

3. *la validité des relations de symétrie d'Onsager*

Onsager ([100], [101]), sur la base d'un choix judicieux des grandeurs vectorielles (flux $\underline{J}^\alpha$ et gradients $\underline{X}^\beta$) mises en jeu dans la formulation des lois de transport, a

²ces coefficients sont indépendants des gradients $\underline{X}^\beta$

montré que la matrice des coefficients phénoménologiques $(L_{\alpha\beta})$ est symétrique, *i.e.* :

$$L_{\alpha\beta} = L_{\beta\alpha} \quad (10.3)$$

Ces relations portent, à ce titre, le nom de *symétries d'Onsager*.

Elles présentent très clairement l'avantage de réduire le nombre de coefficients à déterminer de N^2 à $N(N+1)/2$; on pourra en conséquence limiter le nombre d'essais de laboratoire nécessaires à l'identification de ces inconnues.

La validité des symétries d'Onsager est néanmoins subordonnée à la bonne définition des flux et des forces motrices ("driving forces"). Dans la problématique du transport d'espèces en solution, une approche physico-chimique conduit à interpréter le mouvement de ces espèces par l'existence d'une variation de leur potentiel chimique, noté μ^α .

Le formalisme de la thermodynamique des processus irréversibles repose sur l'écriture de la fonction de dissipation (positive) sous la forme :

$$\Phi = \sum_{\alpha=1}^N \underline{J}^\alpha \cdot \underline{X}^\alpha \quad (10.4)$$

En tout état de cause, il n'y a pas unicité de la fonction de dissipation. Elle est directement conditionnée par le choix des forces motrices ou par celui des flux associés. Si tel est le cas, quid des relations de symétrie d'Onsager ?

Pour répondre à cette question, on suppose qu'il existe un couple $(\underline{J}, \underline{X})$ satisfaisant (10.4) et pour lequel les relations de symétrie d'Onsager sont vérifiées :

$$\begin{cases} \Phi = \underline{J} \cdot \underline{X} \\ \underline{J} = \underline{\underline{L}} \cdot \underline{X} \quad (\underline{\underline{L}}, \text{symétrique}) \end{cases} \quad (10.5)$$

On s'intéresse alors à un autre couple $(\underline{J}', \underline{X}')$ satisfaisant lui aussi (10.4) et où $\underline{X}$ est une combinaison linéaire de $\underline{X}'$:

$$\begin{cases} \Phi = \underline{J}' \cdot \underline{X}' \\ \underline{X} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{X}' \end{cases} \quad (10.6)$$

Etant donné que les deux couples $(\underline{J}, \underline{X})$ et $(\underline{J}', \underline{X}')$ vérifient (10.4), on a :

$$\underline{J}' \cdot \underline{X}' = \underline{J} \cdot \underline{X} = \underline{J} \cdot (\underline{A} \cdot \underline{X}') \quad (10.7)$$

si bien que la cohérence entre (10.5) et (10.6) impose d'écrire le flux $\underline{J}'$ sous la forme d'une combinaison linéaire de $\underline{J}$:

$$\underline{J}' = \underline{A}^t \cdot \underline{J} \quad (10.8)$$

Finalement, en combinant (10.5), (10.6) et (10.8), on obtient la loi de transport associée au couple $(\underline{J}', \underline{X}')$:

$$\underline{J}' = \underline{L}' \cdot \underline{X}' \quad \text{avec} \quad \underline{L}' = \underline{A}^t \cdot \underline{L} \cdot \underline{A} \quad (10.9)$$

De toute évidence, la symétrie du tenseur $\underline{L}$ entraîne celle de $\underline{L}'$, quelle que soit la combinaison linéaire introduite en (10.6) entre les forces motrices $\underline{X}$ et $\underline{X}'$.

Si l'on suppose connu un couple $(\underline{J}, \underline{X})$ vérifiant l'écriture de la fonction de dissipation et les relations de symétrie d'Onsager, ce petit raisonnement suffit à nous convaincre qu'il en est de même pour tout couple obtenu par combinaison linéaire.

Ce résultat va s'avérer très utile pour établir la cohérence entre les expressions des lois de transport obtenues dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles et celles obtenues par un raisonnement purement mécanique.

Dans la vision macroscopique du poreux (cf. section 9.1), le volume élémentaire est constitué de trois particules, respectivement d'eau (e), de sel (s) et de squelette (sq). Ces particules sont animées de cinématiques indépendantes décrites par leur vitesse macroscopique. On distinguera désormais la vitesse macroscopique :

- de l'eau $\underline{V}_e$,
- du sel $\underline{V}_s$,
- et du squelette $\underline{V}_{sq}$.

S'agissant du transport d'un soluté dans un solvant, il est d'usage de considérer les couples $(\underline{J}^e, -\overline{V}_e \underline{\text{grad}} p)$ et $(\underline{J}_d^s, -\underline{\text{grad}} \mu^s)$ dans l'écriture de la fonction de dissipation ([64], [94], [123]) :

$$\Phi = -\overline{V}_e \underline{\text{grad}} p \cdot \underline{J}^e - \underline{\text{grad}} \mu^s \cdot \underline{J}_d^s \quad (10.10)$$

où l'on identifie les grandeurs suivantes :

- le flux d'eau $\underline{J}^e = \frac{\phi}{\bar{V}_e} (\underline{V}_e - \underline{V}_{sq})$,
- le flux relatif de sel par rapport à l'eau $\underline{J}_d^s = \phi c^s (\underline{V}_s - \underline{V}_e)$,
- le potentiel chimique du sel μ^s ,
- le volume molaire partiel de l'eau $\bar{V}_e$,
- et la concentration molaire de sel c^s .

Pour les couples (flux, force motrice) considérés, les lois de transport s'écrivent alors de la façon suivante :

$$\begin{cases} \underline{J}^e = -L_{11} \bar{V}_e \underline{\text{grad}} p - L_{12} \underline{\text{grad}} \mu^s \\ \underline{J}_d^s = -L_{21} \bar{V}_e \underline{\text{grad}} p - L_{22} \underline{\text{grad}} \mu^s \end{cases} \quad (10.11)$$

où l'on invoque pour les coefficients de couplage L_{12} et L_{21} les symétries d'Onsager, *i.e.* $L_{12} = L_{21}$.

A la faveur du raisonnement présenté plus haut et en tenant compte de (8.9), il est possible d'exprimer les forces motrices de (10.11) comme des combinaisons linéaires des pressions partielles de l'eau et du sel :

$$\begin{pmatrix} -\bar{V}_e \underline{\text{grad}} p \\ -\underline{\text{grad}} \mu^s \end{pmatrix} = \underline{\underline{A}} \begin{pmatrix} -\underline{\text{grad}} p^e \\ -\underline{\text{grad}} p^s \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} \bar{V}_e & \bar{V}_e \\ 0 & 1/c^s \end{pmatrix} \quad (10.12)$$

Elles sont associées à des flux dont l'expression peut être obtenue en utilisant (10.8) pour la matrice $\underline{\underline{A}}$ définie en (10.12) :

$$\underline{\underline{A}}^t \cdot \begin{pmatrix} -\underline{J}^e \\ -\underline{J}_d^s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\phi (\underline{V}_e - \underline{V}_{sq}) \\ -\phi (\underline{V}_s - \underline{V}_{sq}) \end{pmatrix} \quad (10.13)$$

Finalement, on relie les flux (10.13) aux gradients des pressions partielles d'eau et de sel par l'intermédiaire de coefficients $M_{\alpha\beta}$ dont on a montré en (10.9) qu'ils vérifiaient les symétries d'Onsager :

$$\begin{cases} \phi (\underline{V}_e - \underline{V}_{sq}) = -M_{ee} \underline{\text{grad}} p^e - M_{es} \underline{\text{grad}} p^s \\ \phi (\underline{V}_s - \underline{V}_{sq}) = -M_{se} \underline{\text{grad}} p^e - M_{ss} \underline{\text{grad}} p^s \end{cases} \quad (10.14)$$

Habituellement, on relie les coefficients de couplage $M_{es}=M_{se}$ au coefficient "direct" M_{ee} de la loi de transport de l'eau en introduisant le concept d'efficacité osmotique (ou coefficient de réflexion), notée ω . Elle a vocation à rendre compte du comportement sélectif

d'un géomatériau.

Cette efficacité osmotique est classiquement³ définie comme le rapport des gradients de la pression totale et de la pression partielle de sel dans le cas où le flux de solvant est nul :

$$\omega = \frac{\underline{\underline{grad}} p}{\underline{\underline{grad}} p^s} \Big|_{\underline{\underline{J}}^e = \underline{0}} \quad (10.15)$$

En introduisant (10.15) dans (10.14), on aboutit finalement à :

$$\begin{cases} \phi (\underline{V}_e - \underline{V}_{sq}) = -M_{ee} \underline{\underline{grad}} p^e - M_{ee} (1 - \omega) \underline{\underline{grad}} p^s \\ \phi (\underline{V}_s - \underline{V}_{sq}) = -M_{ee} (1 - \omega) \underline{\underline{grad}} p^e - M_{ss} \underline{\underline{grad}} p^s \end{cases} \quad (10.16)$$

ω varie entre 0 et 1. Le cas où $\omega = 0$ définit une efficacité osmotique nulle. Dans ce cas, on dit que l'argile n'effectue aucune sélection dans le processus de diffusion des constituants de la phase fluide. Lorsque $\omega = 1$, on dit que la phase solide de l'argile joue le rôle d'une membrane semi-perméable parfaite, *i.e.* le sel ne diffuse pas à travers l'argile.

Si la linéarité des flux des constituants de la phase fluide en fonction des gradients de pression totale et de potentiel chimique du sel (10.11), ou mieux encore des gradients de pression partielle de l'eau et du sel (10.14) est difficilement contestable, il en est tout autrement des relations de symétrie d'Onsager invoquées en (10.11). Elles reposent sur un arbitraire dont on perçoit mal la légitimité.

On présente dans la suite une alternative fondée sur des considérations purement mécaniques. En particulier, ω est interprété comme le paramètre contrôlant le couplage entre l'eau et le sel dans les processus de transport de ces constituants de la phase fluide.

10.2.2 l'approche mécanique

A l'échelle macroscopique, on observe classiquement que la loi de Darcy peut s'interpréter comme l'équation d'équilibre du fluide interstitiel en présence d'une force visqueuse représentant l'interaction avec le squelette. Plus précisément, dans le formalisme de la Mécanique des Milieux Continus, l'équilibre statique d'un fluide saturant l'espace poreux d'un géomatériau s'écrit :

$$\underline{\underline{\text{div}}} \underline{\underline{\Sigma}}^f + \underline{f} = \underline{0} \quad (10.17)$$

³l'annexe 11.7 présente une autre alternative

où $\underline{\underline{\Sigma}}^f = -\phi p \underline{\underline{\delta}}$ représente les efforts intérieurs au fluide soumis à des forces volumiques $\underline{f}$. Si l'on identifie $\underline{f}$ à la force visqueuse exercée par le squelette sur le fluide, on a :

$$\underline{f} = \frac{\phi}{k} (\underline{V}_{sq} - \underline{V}_f) \quad (10.18)$$

où $\underline{V}_{sq}$ et $\underline{V}_f$ représentent respectivement la vitesse macroscopique du squelette et du fluide saturant, et k rend compte de l'interaction fluide/squelette.

L'introduction de (10.18) dans (10.17) conduit alors à l'expression habituelle de la loi de Darcy :

$$(\underline{V}_f - \underline{V}_{sq}) = -k \underline{\text{grad}} p \quad (10.19)$$

On se propose de généraliser ce point de vue au cas d'un fluide à deux constituants -l'eau et le sel- afin d'obtenir un cadre général pour l'écriture des lois de transport de ces derniers.

On modélise les interactions entre les phases par des forces volumiques. Plus précisément, l'action de la phase β sur la phase α est représentée par une force visqueuse $f_{\beta\alpha}$ de la forme :

$$f_{\beta\alpha} = \phi(\underline{V}_\beta - \underline{V}_\alpha)/k_\alpha^\beta \quad (10.20)$$

Dans cette définition, les coefficients k_α^β regroupent l'information sur l'interaction "mécanique" entre les phases α et β . Dans cet esprit, le principe de l'action et de la réaction impose la symétrie $k_\beta^\alpha = k_\alpha^\beta$.

Pour transposer la relation (10.17) à la situation qui nous intéresse ici, à savoir celle d'un fluide constitué d'un solvant (l'eau) et d'un soluté (le sel), il convient de définir une représentation des efforts intérieurs à l'échelle macroscopique pour chaque constituant. Soient donc $\underline{\underline{\Sigma}}^e$ et $\underline{\underline{\Sigma}}^s$ les contraintes de Cauchy relatives respectivement à l'eau et au sel. La somme $\underline{\underline{\Sigma}}^e + \underline{\underline{\Sigma}}^s$ est égale au tenseur des contraintes $\underline{\underline{Q}}$ de (8.26) représentant les efforts intérieurs dans le mélange solvant+soluté :

$$\underline{\underline{\Sigma}}^e + \underline{\underline{\Sigma}}^s = -\phi(p \underline{\underline{\delta}} + \underline{\underline{\Pi}}^g) \quad (10.21)$$

Conformément à (8.9), on représente les efforts intérieurs dans le solvant (l'eau) par le

tenseur :

$$\underline{\underline{\Sigma}}^e = -\phi p^e \underline{\underline{\delta}} \quad (10.22)$$

Les efforts intérieurs relatifs au sel en solution sont donc représentés par le tenseur :

$$\underline{\underline{\Sigma}}^s = -\phi (p^s \underline{\underline{\delta}} + \underline{\underline{\Pi}}^g) \quad (10.23)$$

Pour simplifier, on limite notre propos au cas d'un gonflement isotrope si bien que le tenseur des efforts intérieurs au sel se met sous la forme sphérique :

$$\underline{\underline{\Sigma}}^s = -\phi (p^s + \pi^g) \underline{\underline{\delta}} \quad (10.24)$$

En combinant (10.17) avec (10.22) et (10.24) et en tenant compte de (10.20), on obtient respectivement l'équation d'équilibre du sel et de l'eau dans la solution :

$$-\underline{\underline{grad}}_x (p^s + \pi^g) + \frac{(V_e - V_s)}{k_s^e} + \frac{(V_{sq} - V_s)}{k_s^{sq}} = \underline{0} \quad (10.25)$$

$$-\underline{\underline{grad}}_x p^e + \frac{(V_s - V_e)}{k_s^e} + \frac{V_{sq} - V_e}{k_e^{sq}} = \underline{0} \quad (10.26)$$

où l'on a négligé une éventuelle hétérogénéité de porosité.

On suppose comme en 9.2.1 que π^g est une fonction de p^s et $\bar{h}$. De plus, de façon cohérente avec l'hypothèse $\underline{\underline{grad}}_x \phi = \underline{0}$, on néglige les variations spatiales de $\bar{h}$ ((8.19) et (9.3)). En utilisant (9.46.(b)), il est alors possible de réécrire (10.25), c'est-à-dire l'équilibre du sel, sous la forme :

$$-b^s \underline{\underline{grad}}_x p^s + \frac{(V_e - V_s)}{k_s^e} + \frac{(V_{sq} - V_s)}{k_s^{sq}} = \underline{0} \quad (10.27)$$

En éliminant $V_e - V_s$ entre (10.26) et (10.27), on obtient les vecteurs filtrations des constituants sel et eau du fluide par rapport au squelette :

$$\phi (V_s - V_{sq}) = -K_{ss} b^s \underline{\underline{grad}}_x p^s - K_{se} \underline{\underline{grad}}_x p^e \quad (10.28)$$

$$\phi (V_e - V_{sq}) = -K_{es} b^s \underline{\underline{grad}}_x p^s - K_{ee} \underline{\underline{grad}}_x p^e \quad (10.29)$$

où l'on a posé $\Delta = 1 + (k_s^{sq} + k_e^{sq})/k_s^e$, et :

$$K_{ss} = \phi k_s^{sq} \frac{1 + k_e^{sq}/k_s^e}{\Delta} ; K_{se} = \phi k_e^{sq} \frac{k_s^{sq}/k_s^e}{\Delta} = K_{es} ; K_{ee} = \phi k_e^{sq} \frac{1 + k_s^{sq}/k_s^e}{\Delta} \quad (10.30)$$

(10.30) montre que la matrice $\mathbf{K}$ est symétrique si bien que les relations d'Onsager sont satisfaites. Elles apparaissent ici comme la conséquence du principe de l'action et de la réaction appliqué à l'interaction eau-sel.

Lorsque l'interaction entre le squelette et le sel est négligeable, π^g disparaît et b^s est égal à 1. On retrouve alors une écriture plus classique de la loi de transport du sel, dans laquelle les forces motrices sont alors les gradients de p^s et p^e (termes de couplage). En particulier, cette écriture est cohérente avec (10.14).

En revanche, lorsque b^s n'est pas égal à 1, le transport du sel est contrôlé par le déséquilibre de $p^s + \pi^g$ et non celui de p^s seul. Les relations de symétrie d'Onsager sont alors vérifiées pour une écriture des forces motrices en $\underline{grad}_x p^e$ et $\underline{grad}_x (p^s + \pi^g)$ [= $b^s \underline{grad}_x p^s$]. Elles ne le seraient pas si les forces motrices retenues étaient $\underline{grad}_x p^e$ et $\underline{grad}_x p^s$.

Ainsi, l'effet de l'interaction électrique entre phase solide et sel à l'échelle microscopique intervient à l'échelle macroscopique par l'intermédiaire du même coefficient b^s à la fois dans l'écriture de la loi de comportement du squelette (cf. Chapitre 9) et dans les lois de transport.

L'écriture des lois de transport est assujettie à la positivité de la dissipation liée au transport de masse qui s'écrit ici :

$$-\phi(\underline{V}_e - \underline{V}_{sq}) \cdot \underline{grad}_x p^e - \phi(\underline{V}_s - \underline{V}_{sq}) \cdot b^s \underline{grad}_x p^s \geq 0 \quad (10.31)$$

On note que (10.28) et (10.29) expriment l'existence de relations linéaires entre les flux des constituants mesurés par les vecteurs filtrations et les forces motrices qui résultent du déséquilibre thermodynamique. (10.31) se traduit pour la matrice $\mathbf{K}^4$ par la condition :

$$K_{se}^2 \leq K_{ss} K_{ee} \quad (10.32)$$

soit, compte tenu de (10.30)

$$1 \leq \left(1 + \frac{k_s^e}{k_s^{sq}}\right) \left(1 + \frac{k_s^e}{k_e^{sq}}\right) \quad (10.33)$$

⁴ $\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{ss} & K_{se} \\ K_{es} & K_{ee} \end{bmatrix}$

le couplage eau/sel En plus de b^s , qui rend compte du couplage sel/squelette non seulement sur le comportement mécanique d'une argilite mais aussi sur les lois de transport des constituants de la phase fluide, on introduit le paramètre ω (cf. 10.2.1) dont la vocation est de rendre compte du couplage eau/sel. Le lien entre ces deux paramètres, s'il existe, mériterait sans doute une étude complémentaire.

D'après l'expression du vecteur filtration de l'eau, donnée par (10.29), on obtient, en exploitant les relations (8.9) et (10.15) :

$$-K_{ee} \underline{grad}_x (p - p^s) - K_{es} b^s \underline{grad}_x (p^s) = \underline{0} \rightarrow K_{es} b^s = (1 - \omega) K_{ee} \quad (10.34)$$

si bien que (10.28) et (10.29) se mettent désormais sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} (a) \quad \phi (\underline{V}_e - \underline{V}_{sq}) = -K_{ee} \underline{grad}_x p^e - K_{ee} (1 - \omega) \underline{grad}_x p^s \\ (b) \quad \phi (\underline{V}_s - \underline{V}_{sq}) = -\frac{1 - \omega}{b^s} K_{ee} \underline{grad}_x p^e - K_{ss} b^s \underline{grad}_x p^s \end{array} \right. \quad (10.35)$$

(10.35.(a)) suggère naturellement quelques remarques :

- Pour un couplage eau/sel maximal ($\omega = 0$), l'égalité $K_{es} b^s = K_{ee}$ dans l'équation (10.35.(a)), aboutit à une formulation classique du transport de solvant de type *Darcy* où le vecteur filtration du constituant eau est relié au gradient de pression totale :

$$\phi (\underline{V}_e - \underline{V}_{sq}) = -K_{ee} \underline{grad}_x p \quad (10.36)$$

- En absence de couplage eau/sel ($\omega = 1$), le vecteur filtration du constituant eau est relié au gradient de la pression partielle de l'eau :

$$\phi (\underline{V}_e - \underline{V}_{sq}) = -K_{ee} \underline{grad}_x p^e \quad (10.37)$$

(10.37) s'apparente à une loi de conduction hydraulique de *Darcy* dont le moteur est le gradient de pression partielle de l'eau.

linéarisation On rappelle que le coefficient de biot du sel b^s est une fonction des deux variables h et n_{th}^s . Le concept d'espacement moyen, défini par $\bar{h}$ en (8.19), a permis de

ramener la dépendance de b^s à un seul paramètre, n_{th}^s . On va désormais se placer dans le cadre d'une approximation linéaire de la courbe d'évolution de la pression de gonflement en fonction de la pression partielle du sel p^s (Fig. 10.1). Par conséquent, d'après (9.46), b^s sera supposé constant dans la suite.

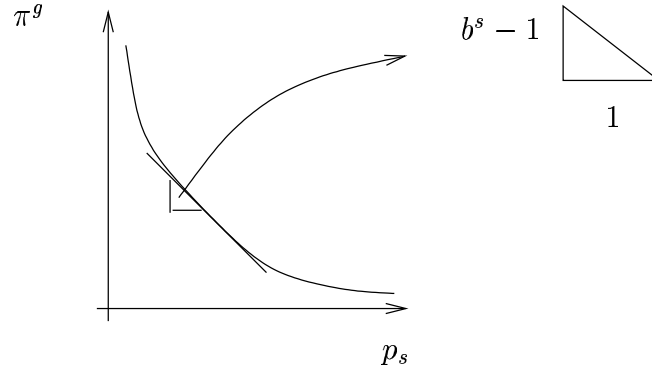


FIG. 10.1: approximation linéaire de $\pi^g = \pi^g(p^s)$

D'autre part, d'après (9.21), l'indépendance de b^s vis-à-vis de la pression partielle du sel entraîne celle du coefficient d'activité macroscopique $A = n_{th}^s/n^s$ défini en (8.20).

10.3 Simulation de l'essai

On propose ici une simulation de l'essai œdométrique décrit dans l'introduction du présent chapitre dans un cadre d'hypothèses simplificatrices permettant un calcul semi-analytique de la réponse de l'argilite en phase transitoire. Pour simuler l'effet d'une saumure sur la roche d'un puits de forage pétrolier, on effectue ici une *augmentation* de n_{th}^s entraînant a priori une *contraction* de l'échantillon. La cinématique macroscopique est supposée colinéaire à l'axe de l'œdomètre (porté par le vecteur $\underline{e}_1$). $\Sigma = \Sigma_{11}$ et $E = E_{11}$ désignent les contrainte et déformation selon cet axe.

10.3.1 le dispositif expérimental

Les essais expérimentaux présentés ici ont été développés au sein du *Département Forage* du Centre Scientifique et Technique de Saint-Rémy-lès-Chevreuse de la société **TOTAL** dans le cadre d'une campagne d'essais sur l'étude des interactions physico-chimiques entre les boues de forage et les argilites, et leurs conséquences sur la stabilité de puits de forage [23].

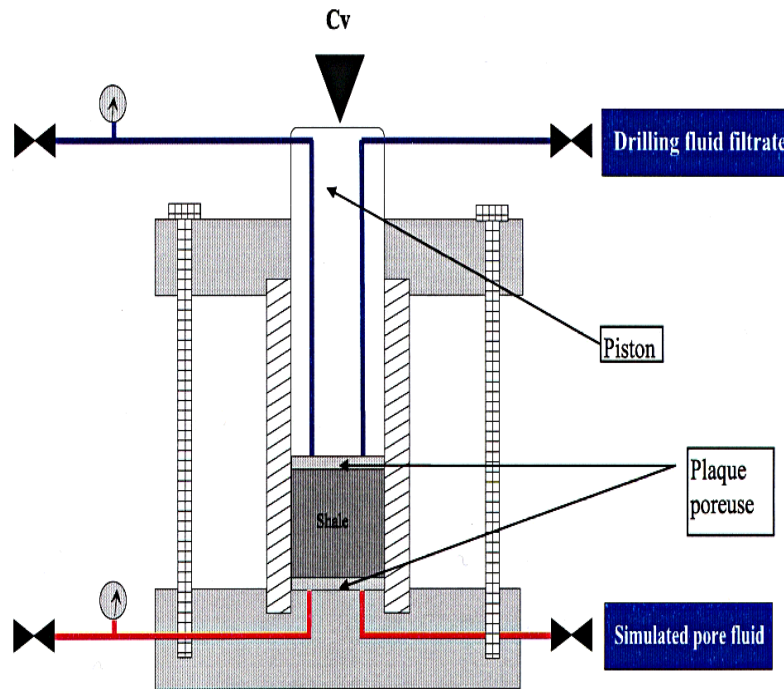


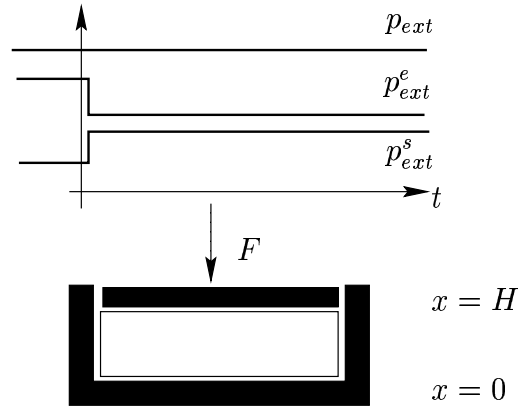
FIG. 10.2: cellule œdométrique (d'après Mody et Hale [96])

Le principe du dispositif expérimental, présenté ci-dessus (Fig.10.2), est une adaptation de l'essai décrit par Mody et Hale [96]. Celui-ci se présente comme un essai œdométrique classique, un échantillon d'argilite étant placé entre deux plaques poreuses indéformables sur lesquelles vient se greffer un système de drainage permettant de simuler la circulation de la boue de forage. Le circuit supérieur modélise le fluide de forage dont on vient modifier la concentration en sels. On mesure la pression de pore sur la base inférieure de l'échantillon. Notons que la pression de pore en question est la somme de la pression du sel et de l'eau existant à la base de l'échantillon⁵.

Le procédé est simple : on applique un effort constant sur la surface supérieure de l'échantillon par l'intermédiaire d'un piston et l'on suit l'évolution de la pression de pore mesurée à la base de l'éprouvette et de la déformation verticale de l'argilite en fonction de la concentration en sel de la boue de forage et du temps. La configuration avant chargement en concentration est prise comme référence.

- l'état initial dans l'échantillon argileux est défini par la concentration saline de la solution saturant l'espace poreux du matériau argileux, notée n_0^s :

⁵de part et d'autre de l'échantillon ($x=0$ et $x=H$), la concentration vraie s'identifie à la concentration thermodynamique équivalente



$$n^s(x, t = 0) = n_0^s \quad (10.38)$$

- la première condition aux limites concerne la concentration de sel sur la surface supérieure de l'échantillon. Elle s'exprime de la façon suivante :

$$n^s(x = H, t) = n_1^s \quad (10.39)$$

- Les flux de sel et d'eau sont nuls sur la surface inférieure de l'échantillon. Quelle que soit la valeur de ω , une combinaison linéaire des conditions $(\underline{V}_e - \underline{V}_{sq}) \cdot \underline{e}_x = 0$ et $(\underline{V}_s - \underline{V}_{sq}) \cdot \underline{e}_x = 0$ conduit, d'après (10.35), à :

$$\frac{\partial p^s}{\partial x}(x = 0, t) = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial p^e}{\partial x}(x = 0, t) = 0 \quad (10.40)$$

Dans l'état asymptotique où l'équilibre de l'échantillon avec la solution extérieure est restauré, les pressions partielles p_∞^s et p_∞^e dans l'échantillon coïncident avec celles de la solution extérieure. Nous avons donc :

$$\begin{cases} p_\infty^s = p_0^s + 2kT \Delta n^s \\ p_\infty^e = p_0^e - 2kT \Delta n^s \end{cases} \quad (10.41)$$

où $\Delta n^s = n_1^s - n_0^s$.

L'ensemble des résultats obtenus au cours de ces essais constituera la base expérimentale de notre modélisation théorique. Ils permettront, en outre, une identification des différents paramètres du modèle. Nous verrons que :

- le comportement asymptotique permettra la détermination du paramètre b^s , qui mesure l'intensité de l'interaction entre le sel en solution et la phase solide du matériau

argileux.

- l'étude du comportement transitoire conduira à l'identification des paramètres contrôlant la diffusion de l'eau et du sel dans l'échantillon.

10.3.2 analyse des résultats expérimentaux

On présente maintenant les résultats expérimentaux obtenus par la société TOTAL. La hauteur de l'éprouvette d'argilite est $H = 20$ mm. Deux sels sont utilisés pour simuler la boue de forage :

- du CaCl_2 à la concentration $n_1^s = 2.38 \text{ mol.l}^{-1}$,
- du KCl à la concentration $n_1^s = 3.49 \text{ mol.l}^{-1}$.

Pour chacune de ces solutions salines, on dispose des évolutions du déplacement de l'échantillon (Figs. 10.3 et 10.4) et de la pression de pore (mesurée à la base de l'échantillon) (Figs. 10.5 et 10.6).

évolution du déplacement

Les résultats expérimentaux (Fig. 10.3) et (Fig. 10.4) montrent un tassement progressif de l'argilite provoqué par l'introduction de sels dans la boue de forage. Ces résultats mettent en évidence l'existence d'un état asymptotique déformé. Ce comportement est conforme à (10.1) qui prévoit une contraction de l'échantillon pour une augmentation de la concentration du milieu extérieur, pourvu que le coefficient de Biot du sel vérifie $b^s < 1$.

Pour des caractéristiques élastiques identiques des échantillons d'argilite utilisés, la différence des tassements asymptotiques, notés s_∞ , obtenus pour les deux sels testés ($s_\infty(\text{KCl}) > s_\infty(\text{CaCl}_2)$) est contrôlée, d'après (10.1), par l'intensité du chargement en concentration et le paramètre b^s .

L'ordre de grandeur entre les deux tassements obtenus $s_\infty(\text{KCl})/s_\infty(\text{CaCl}_2) \approx 4$ illustre l'effet de la valence des ions en solutions sur l'intensité du gonflement osmotique discuté au Chapitre 8⁶. La donnée des concentrations et la valeur du déplacement asymptotique nous fournira par la suite une estimation quantitative de b^s pour chacun des deux sels

⁶on observera en effet que le rapport des concentrations ($n_1^s(\text{KCl})/n_1^s(\text{CaCl}_2) \approx 1.45$) ne permet pas d'expliquer la différence des tassements observés

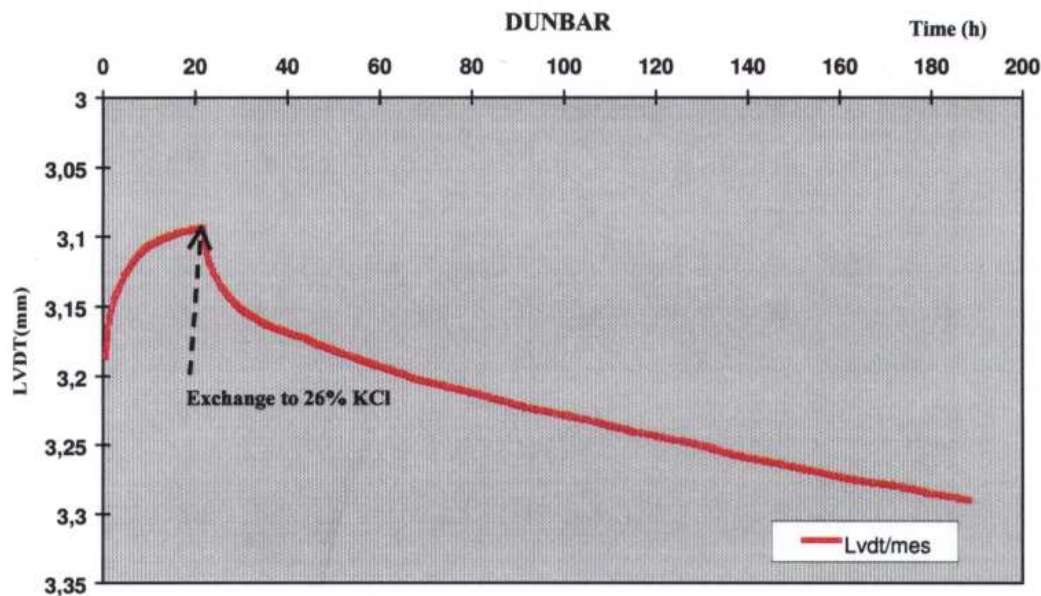


FIG. 10.3: déplacement vertical expérimental (KCl) : $s_{\infty} \approx 0.25$ mm

testés.

évolution de la pression de pore

On distingue deux phases dans les profils d'évolution de la pression de pore. La première correspond à la mise en pression du fluide, constitué d'eau pure, saturant l'argilite. Lorsque l'équilibre avec la pression de boue, maintenue ici à 15 MPa, est atteint, on injecte les sels dans la boue de forage. On observe alors une chute brutale de la pression de pore puis une remontée progressive vers la pression de boue.

- Pour le KCl, on observe une chute de pression de l'ordre du Mpa sur une quinzaine d'heures. Le retour à la situation d'équilibre est quasiment achevé au bout de 170 heures (≈ 1 semaine).
- Pour le CaCl_2 , la chute de pression est approximativement de 3.5 Mpa sur 24 heures. Le retour à la situation d'équilibre est beaucoup plus lent. Il faut près de 320 heures (≈ 2 semaines) pour remonter la pression de pore de 1 MPa.

La variation de la concentration saline dans la solution extérieure instaure un double déséquilibre : pression de sel plus forte à l'extérieur que dans l'échantillon, pression d'eau plus basse à l'extérieur que dans l'échantillon. La prévision des conséquences en termes de

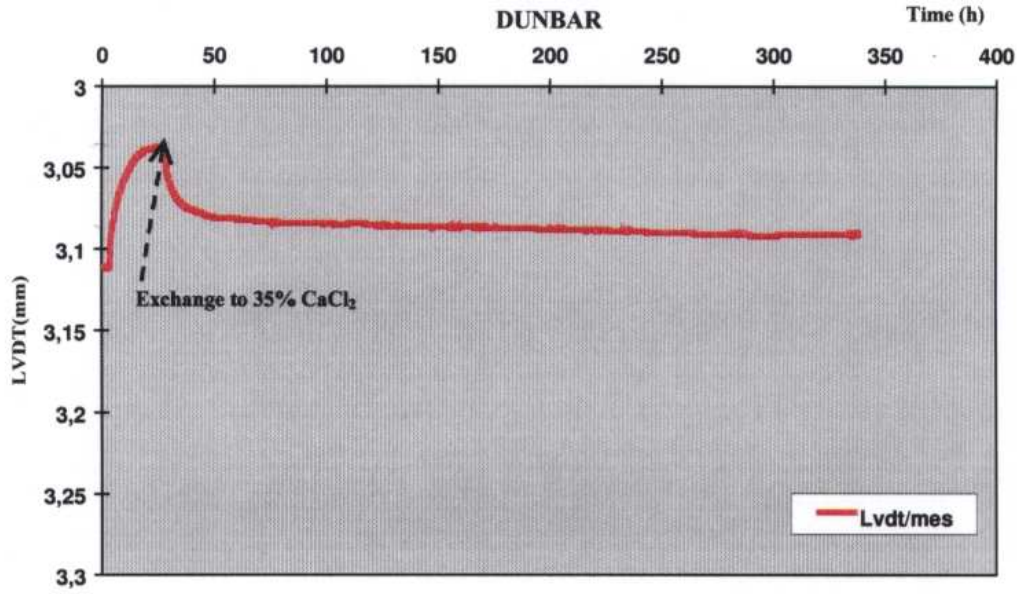


FIG. 10.4: déplacement vertical expérimental (CaCl_2) : $s_\infty \approx 0.06$ mm

flux de matière de ces déséquilibres est en fait conditionnée par un a priori sur l'existence d'un couplage dans les lois de transport de l'eau et du sel. Examinons pour commencer l'hypothèse de couplage maximal, qui correspond à $\omega = 0$ dans (10.35). Le moteur du flux d'eau est dans ce cas le gradient de pression totale. Or, la pression totale dans la solution extérieure n'est pas affectée par la variation de concentration saline. De fait, il est possible de construire une solution du problème d'évolution dans laquelle la pression totale reste en tout point inchangée. La pression de sel p^s augmente progressivement, tandis que la pression d'eau p^e diminue, avec $\dot{p}^s = -\dot{p}^e$. Dans ces conditions, (10.1) prévoit une contraction progressive de l'échantillon compatible avec les mesures présentées aux figures 10.3 et 10.4. En revanche, l'absence de variation de la pression totale est en contradiction avec les données expérimentales sur l'évolution de cette grandeur (Figs. 10.5 et 10.6). L'hypothèse $\omega = 0$ passe donc à côté de la physique de cet essai. A l'inverse, examinons à présent un découplage total en faisant $\omega = 1$ dans (10.35), quitte à affiner ce modèle par la suite.

En raison des déséquilibres de pression d'eau et de sel entre la solution extérieure et l'échantillon, on s'attend en l'absence de couplage, à un flux d'eau vers l'extérieur et à un flux de sel vers l'intérieur. Les variations dans le temps de la pression totale vont alors dépendre de la chronologie de ces deux phénomènes, le premier (flux d'eau) étant de nature à faire chuter la pression, le second (flux de sel) à la faire croître.

Dans notre cas, la chute de pression de pore observée indique que l'eau diffuse plus vite vers le puits que le sel ne diffuse vers l'argilite. Elle s'interprète en fait comme un phénomène d'osmose. Plus précisément, le fluide saturant la porosité du matériau argileux est

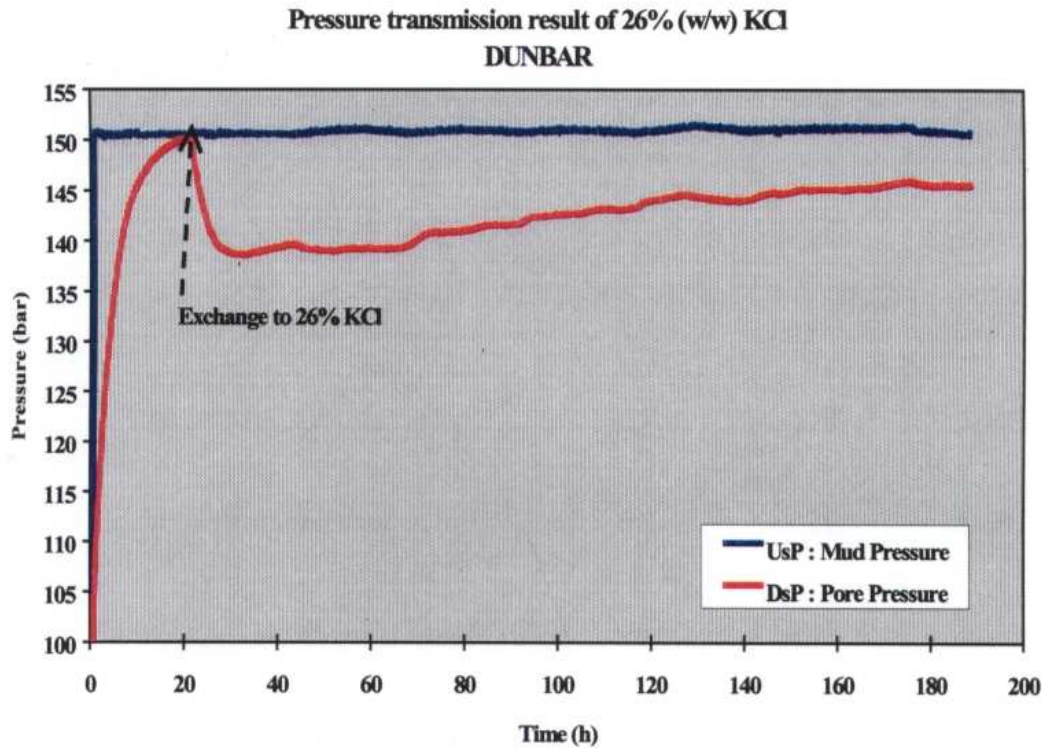


FIG. 10.5: évolution expérimentale de la pression de pore (KCl)

initialement en équilibre avec l'eau pure du puits, de potentiel chimique μ_o^e . En injectant des sels dans le puits, on abaisse le potentiel chimique de l'eau de la boue de forage μ_{mud}^e (cf. 8.9). On crée ainsi un déséquilibre des potentiels chimiques de l'eau entre le matériau argileux (μ_o^e) et l'extérieur ($\mu_{mud}^e < \mu_o^e$) qui provoque un mouvement de l'eau vers le puits. C'est le principe même de l'osmose. En d'autres termes, un déséquilibre de concentration provoque une mise en mouvement de l'eau de la zone faiblement concentrée (l'argilite) vers la zone fortement concentrée (le puits).

Notons que cette chute de pression est le phénomène recherché par le foreur. Elle permet d'obtenir une contraction de la roche et une augmentation de la contrainte effective de compression, propices à la tenue du puits en phase provisoire. L'efficacité de cette technique est évidemment liée à la durée de la phase transitoire de dépression. C'est la raison pour laquelle cette phase transitoire mérite une attention toute particulière.

La seconde phase de l'évolution de la pression de pore est un retour progressif vers la situation d'équilibre, *i.e.* celle où la pression de pore est égale à la pression de boue maintenue constante. Cette seconde phase est essentiellement contrôlée par la venue du sel dans l'échantillon.

Nous voyons que l'hypothèse $\omega = 1$ permet d'interpréter, au moins qualitativement, aussi

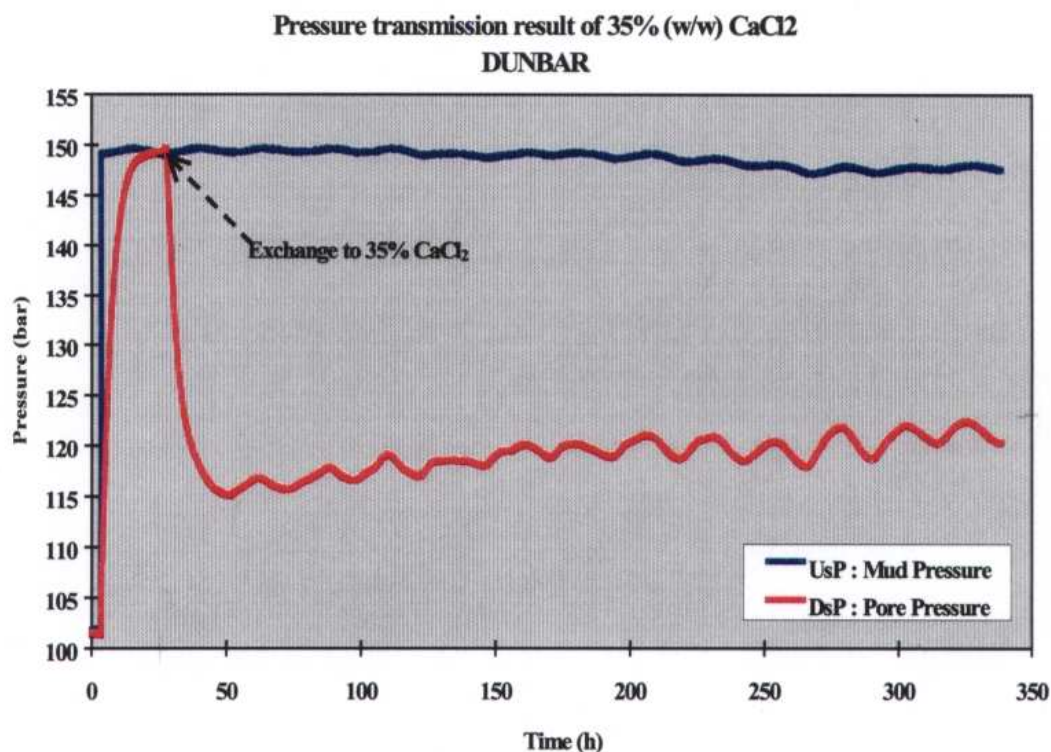


FIG. 10.6: évolution expérimentale de la pression de pore (CaCl_2)

bien l'évolution de la déformation de l'échantillon que celle de la pression de pore, pourvu que la diffusion de l'eau précède (au moins partiellement) celle du sel. Cependant, la suite montrera que les simulations numériques basées sur l'hypothèse $\omega = 1$ sont parfaites d'un point de vue quantitatif. Ceci nous amènera à étudier le cas général $0 < \omega < 1$.

10.3.3 les équations du problème

On met en place ici les équations à la base de la résolution théorique de l'essai de laboratoire présenté au paragraphe précédent. On exploite dans un premier temps la loi de comportement d'une argilite soumise à un gonflement d'origine osmotique établie à la section 9.2.4. On précise ensuite les équations de diffusion du sel et de l'eau. Elles sont obtenues en combinant les lois de conservation de la masse de chacune des particules macroscopiques (l'eau, le sel et le squelette) avec les lois de transport des constituants sel et eau de la phase fluide. Ces dernières sont données en (10.35).

loi de comportement

Dans les conditions de l'essai ($\dot{\Sigma} = 0$), la loi de comportement macroscopique de l'argilite, donnée par (10.1), se met sous la forme :

$$M_o \dot{E} = \dot{p}_e + b^s \dot{p}_s \quad (10.42)$$

où $M_o = 2\mu_o + \lambda_o$ est le module œdométrique, μ_o et λ_o étant les coefficients de Lamé attachés à l'élasticité tangente du matériau argileux.

lois de conservation de la masse

Sous l'hypothèse d'incompressibilité de la phase solide du matériau considéré, la loi de conservation de la masse de squelette à l'échelle macroscopique s'écrit :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \text{div}_x(\phi \underline{V}_{sq}) = \text{div}_x \underline{V}_{sq} = \dot{E} \quad (10.43)$$

Si l'on admet maintenant que le solvant est incompressible, la loi de conservation de la masse d'eau s'écrit, à l'échelle macroscopique, de la façon suivante :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \text{div}_x(\phi \underline{V}_e) = 0 \quad (10.44)$$

En soustrayant (10.43) de (10.44), on fait apparaitre la liaison entre le flux d'eau et le taux de déformation macroscopique verticale :

$$\text{div}_x(\phi(\underline{V}_e - \underline{V}_{sq})) + \dot{E} = 0 \quad (10.45)$$

La loi de conservation de la masse de sel à l'échelle macroscopique s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi n^s) + \text{div}_x(\phi n^s \underline{V}_s) = 0 \quad (10.46)$$

ou encore :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi n^s) + n^s \text{div}_x(\phi \underline{V}_s) + \phi \underline{V}_s \cdot \underline{\text{grad}}_x n^s = 0 \quad (10.47)$$

On fera, dans la suite, l'hypothèse que le terme "convectif" en $\underline{\text{grad}}_x n^s$ est négligeable devant les autres si bien qu'en soustrayant (10.43) de (10.47), on établit le lien entre le

flux du sel et le taux de déformation macroscopique verticale :

$$\frac{\partial n^s}{\partial t} + \frac{n^s \dot{E}}{\phi} + \frac{n^s}{\phi} \operatorname{div}_x (\phi (\underline{V}_s - \underline{V}_{sq})) = 0 \quad (10.48)$$

D'autre part, on a vu que dans l'hypothèse d'une dépendance linéaire de π^g en fonction de p^s , l'activité macroscopique $A (= n_{th}^s/n^s)$ est constante. On peut donc remplacer n^s par n_{th}^s ou p^s ($p^s = 2kT n_{th}^s$) dans (10.48) :

$$\frac{\partial p^s}{\partial t} + \frac{p^s \dot{E}}{\phi} + \frac{p^s}{\phi} \operatorname{div}_x (\phi (\underline{V}_s - \underline{V}_{sq})) = 0 \quad (10.49)$$

équations de diffusion

Pour établir les équations de diffusion des constituants eau et sel de la phase fluide, il suffit de combiner, pour chaque constituant, les lois de transport avec les lois de conservation de la masse.

- Pour l'eau, il s'agit de combiner (10.35.(a)) et (10.45). On obtient alors l'équation de diffusion de l'eau :

$$M_o \dot{E} = D_e \Delta p^e + (1 - \omega) D_e \Delta p^s \quad (10.50)$$

où $D_e = M_o K_{ee} (\geq 0)$ est appelé *coefficient de diffusion de l'eau*. Il sera supposé constant dans la suite.

- L'équation de diffusion du sel est obtenue en combinant (10.35.(b)) et (10.49) :

$$\frac{\partial p^s}{\partial t} + \frac{p^s \dot{E}}{\phi} = \alpha \left(D_s b^s \Delta p^s + \frac{(1 - \omega)}{b^s} D_e \Delta p^e \right) \quad (10.51)$$

où $\alpha = \frac{p^s}{\phi M_o} (\geq 0)$. $D_s = M_o K_{ss} (\geq 0)$ est supposé constant.

La non-linéarité introduite par α sera négligée dans la modélisation proposée ici. On fera par conséquent l'hypothèse que α est constant et qu'il vaut $\alpha = \frac{p_1^s}{\phi M_o} (p_1^s = 2kT n_1^s)$.

10.3.4 tassement de l'échantillon

Soit $u(x=H,t)$ le déplacement de la surface supérieure de l'échantillon argileux. Son évolution est obtenue à partir de celle de la déformation de l'échantillon, donnée par l'équation de diffusion de l'eau (10.50).

On doit, dans un premier temps, intégrer par rapport au temps l'équation (10.50) entre les instants initial t_o et actuel t :

$$\int_{t_o}^t \frac{\partial E}{\partial t} dt = \frac{D_e}{M_o} \int_{t_o}^t \Delta_x p^e dt + \frac{D_e}{M_o} (1 - \omega) \int_{t_o}^t \Delta_x p^s dt \quad (10.52)$$

L'évolution de la déformation est donc donnée par :

$$E(x, t) = \frac{D_e}{M_o} \int_{t_o}^t \Delta_x p^e dt + \frac{D_e}{M_o} (1 - \omega) \int_{t_o}^t \Delta_x p^s dt \quad (10.53)$$

pour l'état de référence choisi.

On obtient finalement le déplacement $u(x=H,t)$, et donc le tassement $s(t)=-u(H,t)$, par simple intégration de (10.53) sur l'ensemble de l'éprouvette :

$$s(t) = -u(H, t) = - \int_0^H E(x, t) dx \quad (10.54)$$

Le tassement asymptotique est noté s_∞ .

10.4 Résolution

L'objectif est désormais la formulation d'un schéma de résolution apte à rendre compte le plus fidèlement possible des résultats expérimentaux. Il repose sur l'ensemble des équations gouvernant le comportement de l'argilite et la diffusion de l'eau et du sel présentées en 10.3.3.

L'existence d'un tassement asymptotique est assurée sur le plan théorique pour un choix de b^s différent de 1. Plus précisément, en intégrant (10.1) par rapport au temps entre $t = 0$ et $t = \infty$ compte tenu de $d\Sigma_{xx}=d\Sigma=0$ et de (10.41), on voit que la connaissance expérimentale du tassement de l'échantillon permet d'identifier le paramètre b^s du modèle de la façon suivante :

$$b^s = 1 - \frac{M_o}{2 kT \Delta n^s H} s_\infty \quad (10.55)$$

Nous savions déjà que l'écart à l'unité de b^s rend compte à l'échelle microscopique de

l'existence d'une interaction électrique. Elle se traduit d'après (10.55) par une déformation macroscopique permanente. Plus précisément, compte tenu de l'inégalité $b^s \leq 1$ (cf. (9.26)), (10.55) permet de tirer les conclusions suivantes, conformes aux observations expérimentales :

$$\begin{cases} \Delta n^s < 0 \rightarrow s_\infty < 0 \\ \Delta n^s > 0 \rightarrow s_\infty > 0 \end{cases} \quad (10.56)$$

Pour une écriture des lois de transport des constituants eau et sel de la phase fluide contrôlée par les gradients de pression partielle de l'eau et du sel (cf. section 10.2.2), l'existence d'un couplage entre le sel et l'eau est quantifiée par ω ($0 \leq \omega \leq 1$).

Le cas $\omega = 0$ n'est pas capable de rendre compte de l'évolution de la pression de pore obtenue expérimentalement (cf. section 10.3.2).

L'autre situation extrême, définie par $\omega = 1$, correspond à une absence de couplage entre le sel et l'eau. On verra que cette configuration permet de rendre compte de la chute de pression de pore mais au prix d'une cinétique de retour à l'équilibre initial bien plus rapide que celle obtenue expérimentalement. Le recours à une modélisation tenant compte d'un couplage eau/sel permettra alors d'obtenir des évolutions de la pression de pore en très bon accord avec les résultats expérimentaux.

10.4.1 problème sans couplage

Dans ce cadre d'étude ($\omega=1$), la formulation du problème à résoudre est largement simplifiée. En effet, lorsque les termes rendant compte du couplage eau/sel peuvent être négligés, le système d'équations (10.42)-(10.50)-(10.51) simulant l'essai œdométrique se réduit à :

$$\begin{cases} M_o \dot{E} = \dot{p}_e + b^s \dot{p}_s \\ M_o \dot{E} = D_e \Delta p^e \\ \dot{p}_s + \frac{p^s \dot{E}}{\phi} = D_s' \Delta p^s \end{cases} \quad (10.57)$$

où $D_s' = \alpha b^s D_s$, appelé *coefficient de diffusion du sel* dans la suite, est constant.

On montre alors que la déformabilité du squelette intervenant dans la dernière équation devient rapidement négligeable devant les autres termes si bien que l'équation gouvernant le transport du constituant sel de la phase fluide permet de résoudre séparément le problème de la diffusion du sel. Le résultat obtenu est alors introduit dans l'équation

gouvernant l'évolution de la pression partielle de l'eau. Le système à résoudre s'écrit finalement :

$$\begin{cases} a. & \dot{p}_s = D'_s \Delta p^s \\ b. & \dot{p}_e = D_e \Delta p^e - b^s \dot{p}_s \end{cases} \quad (10.58)$$

L'équation (10.58.a.), analogue à la *seconde équation de Fick*, possède la structure classique de l'équation de la chaleur. Dans le cadre de notre modélisation, la pression partielle du sel doit respecter de plus la condition initiale et les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{cases} p^s(x, 0) &= 2kT n_0^s & , & 0 \leq x \leq H \\ p^s(H, t) &= 2kT n_1^s & , & t \geq 0 \\ \frac{\partial p^s}{\partial x}(0, t) &= 0 & , & t \geq 0 \end{cases} \quad (10.59)$$

D'après l'annexe 11.8, la solution bien connue du système d'équations (10.58.a.)-(10.59) s'écrit :

$$p^s(x, t) = 2kT n_1^s - \frac{8kT \Delta n^s}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)} \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2} \frac{x}{H}\right) e^{-\mu_k D'_s t} \quad (10.60)$$

où $\Delta n^s = n_1^s - n_0^s$ et μ^k est donné en (11.65)

D'autre part, on remarque que l'équation (10.58.b.) possède la structure de l'équation de la chaleur avec un terme de source $\Omega(x, t) = b^s \dot{p}^s$ que l'on calcule à partir de (10.60). La résolution est détaillée à la section 11.8.1 de l'annexe 11.8.

En résumé, elle nécessite la décomposition de $\Omega(x, t)$ sur une base $(\omega_k(x))$ bien choisie :

$$\Omega(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \beta_k(t) \omega_k(x) \quad (10.61)$$

définie, en utilisant (10.60), de la façon suivante :

$$\omega_k(x) = \frac{4}{\pi} \frac{(-1)^k}{(2k+1)} \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2H} x\right) \quad (10.62)$$

$$\beta_k(t) = 2kT b^s D'_s \Delta n^s \mu_k e^{-\mu_k D'_s t}$$

En tenant compte de (8.9), la condition initiale et les conditions aux limites vérifiées par

la pression partielle de l'eau s'écrivent :

$$\begin{cases} p^e(x, 0) = p_0 - 2kT n_0^s & , \quad 0 \leq x \leq H \\ p^e(H, t) = p_0 - 2kT n_1^s & , \quad t \geq 0 \\ \frac{\partial p^e}{\partial x}(0, t) = 0 & , \quad t \geq 0 \end{cases} \quad (10.63)$$

où p_0 est la pression exercée par le fluide de forage.

L'ensemble des équations (10.58.b.)-(10.63), en utilisant les notations (10.61) et (10.62), constitue un problème bien posé. La résolution de ce système d'équations est décrite en annexe 11.8. Elle aboutit à l'expression suivante de l'évolution de la pression partielle de l'eau dans l'échantillon argileux :

$$p^e(x, t) = 2kT \Delta n^s \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ (1 - \gamma) e^{-\mu_k D_e t} + \gamma e^{-\mu_k D'_s t} \right\} \omega_k(x) + p_0 - 2kT n_1^s \quad (10.64)$$

$$\text{où } \gamma = \frac{b^s D'_s}{D'_s - D_e}$$

pression totale du fluide Finalement, en combinant les résultats obtenus en (10.60) et (10.64) et en appliquant la relation (8.9), on obtient l'évolution de la pression totale du fluide dans l'échantillon :

$$p(x, t) = p_0 + 2kT \Delta n^s (1 - \gamma) \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ e^{-\mu_k D_e t} - e^{-\mu_k D'_s t} \right\} \omega_k(x) \quad (10.65)$$

où $\omega_k(x)$ est donné par (10.62).

tassement observé D'après (10.53) et (10.54), l'évolution du déplacement observé se réduit, dans le cas $\omega = 1$, à :

$$u(H, t) = \frac{D_e}{M_o} \int_0^H \left(\int_{t_o}^t \Delta_x p^e dt \right) dx \quad (10.66)$$

D'après (10.64), (10.66) conduit à :

$$u(H, t) = \frac{4 kT \Delta n^s}{H M_o} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\mu_k} U_k(t) \quad (10.67)$$

$$\text{avec } U_k(t) = (1 - \gamma) \left(e^{-\mu_k D_e t} - 1 \right) + \gamma \frac{D_e}{D'_s} \left(e^{-\mu_k D'_s t} - 1 \right)$$

où μ_k est donné par (11.65) et γ défini en (10.64).

D'après (10.67), le tassement asymptotique s'écrit :

$$s_{\infty} = s_{t \rightarrow \infty} = \frac{4 kT \Delta n^s}{H M_o} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\mu_k} \left\{ 1 - \gamma + \gamma \frac{D_e}{D'_s} \right\} \quad (10.68)$$

Si l'on tient compte de la définition de γ , introduite en (10.64), on aboutit à :

$$s_{\infty} = \frac{4 kT \Delta n^s}{H M_o} (1 - b^s) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\mu_k} \quad (10.69)$$

D'après la définition des μ_k , obtenue en (11.65), on a :

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\mu_k} = \frac{4 H^2}{\pi^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)^2} = \frac{H^2}{2} \quad (10.70)$$

Finalement, on obtient une relation linéaire entre le tassement asymptotique de l'échantillon et le paramètre b^s :

$$s_{\infty} = \frac{2 kT \Delta n^s H}{M_o} (1 - b^s) \quad (10.71)$$

On retrouve bien le résultat annoncé en (10.55).

Si l'on envisage la mise en œuvre de cet essai au delà de la classe des argilites, deux situations vont se présenter selon que $b^s = 1$ ou $b^s \neq 1$ (Fig. 10.7). Dans tous les cas, le modèle prévoit l'existence de déformations en régime transitoire. Elles sont dues au départ de l'eau dans le cadre du processus osmotique introduit dans la modélisation par le choix $\omega = 1$.

En revanche, l'existence d'une déformation permanente est la signature d'un écart de b^s à 1, c'est-à-dire d'une interaction physico-chimique entre le sel et le solide.

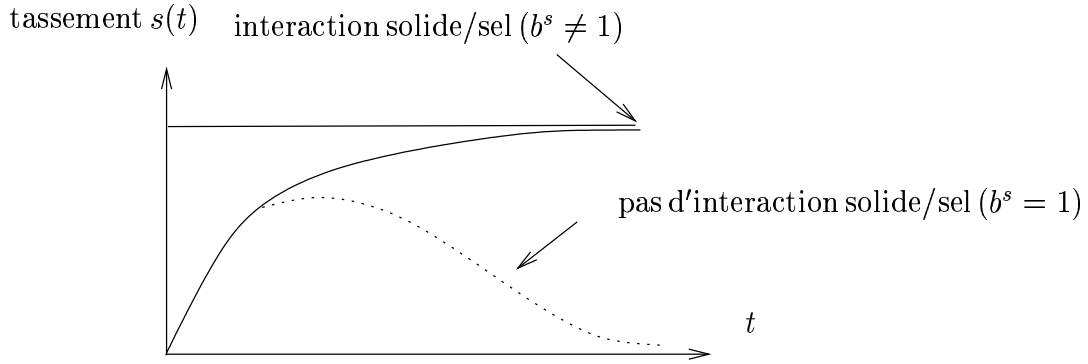


FIG. 10.7: schématisation de l'évolution de la déformation de l'échantillon ($\Delta n^s > 0$)

10.4.2 présentation des simulations théoriques

On présente ci-après les simulations théoriques obtenues dans le cadre d'une modélisation où le couplage eau/sel est négligé. Le module œdométrique de l'argilite est estimé à : $M_o \approx 1 \text{ GPa}$ et l'on considère une porosité de l'ordre de 30%.

Pour optimiser la qualité des simulations, on peut jouer sur 3 paramètres, à savoir b^s , D_e et D'_s . Nous avons vu que le paramètre b^s contrôlant l'interaction sel/solide est déterminé à l'aide de (10.55), à partir de la valeur expérimentale du tassement.

Pour le KCL, on obtient $b^s \approx 0.12$.

Pour le CaCl_2 , on obtient $b^s \approx 0.70$.

N.B. : l'écart à l'unité de b^s est plus marqué pour le KCl (sel monovalent) que pour le CaCl_2 (sel divalent).

Par conséquent, les 2 autres paramètres (D_e , D'_s) du modèle sont amenés à rendre compte de la chronologie et de l'intensité de la cinétique initiale de l'évolution de la pression de pore, et du retour progressif à la situation d'équilibre. De toute évidence, l'identification de ces paramètres nécessite de se focaliser sur deux des trois spécificités du comportement transitoire. Les résultats présentés ici s'attachent à rendre compte de la chronologie et de l'intensité de la phase initiale au prix d'un retour brutal à la situation d'équilibre. On aurait très bien pu envisager de se concentrer sur la chronologie de la phase initiale et sur la cinétique de la phase de retour. On aurait alors obtenu une chute de pression d'intensité incompatible avec les données expérimentales.

- Les courbes (Fig.10.8)-(Fig.10.9) présentent l'évolution de la pression de pore. La valeur du coefficient de diffusion de l'eau contrôle en particulier la durée de la chute de pression initiale. Sous l'hypothèse d'un couplage eau/sel négligé, l'intensité de la chute de pression est essentiellement contrôlée par le rapport entre les coefficients de diffusion de l'eau (D_e) et du sel (D'_s), que l'on trouve ici proche de 1.
- Pour le KCl, on obtient $D'_s/D_e = 0.99$ avec $D_e \approx 4.5 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$.
- Pour le CaCl_2 , on obtient $D'_s/D_e = 1.1$ avec $D_e \approx 2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$.

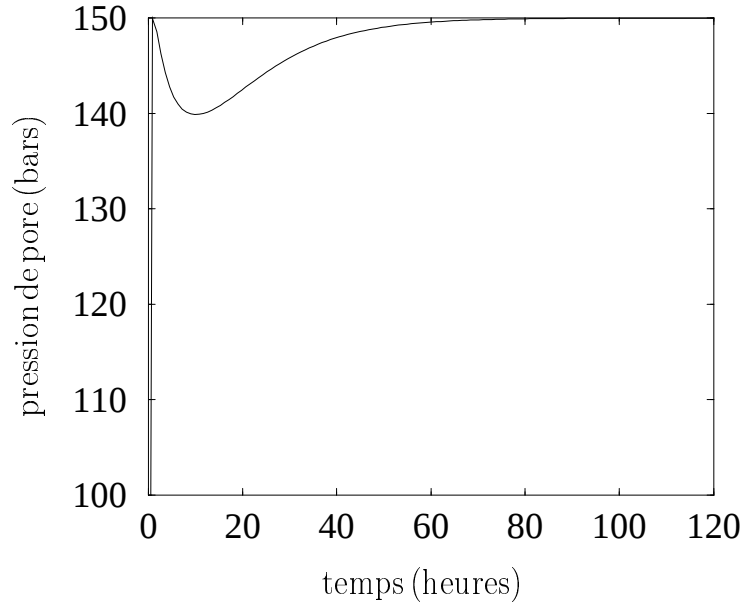


FIG. 10.8: évolution théorique de la pression de pore (KCl) [$\omega = 1$]

- Les courbes (Fig.10.10)-(Fig.10.11) présentent l'évolution du déplacement vertical de l'échantillon. On constate que le temps caractéristique pour atteindre l'état asymptotique est plus court que celui des courbes expérimentales (Fig.10.3)-(Fig.10.4). Dans le cas du CaCl_2 , on remarque en outre que le tassement passe par un maximum incompatible avec les résultats expérimentaux.

Il est important de noter que cette modélisation simplifiée est qualitativement tout à fait conforme avec les résultats expérimentaux. Elle permet en effet de rendre compte de la phase initiale de chute de pression pore pour les deux sels testés. L'absence d'un couplage eau/sel entraîne une quasi-égalité des coefficients de diffusion de l'eau et du sel. Plus clairement, cela signifie que les temps caractéristiques de diffusion de l'eau ($t_c^e = H^2/D_e$) et du sel ($t_c^s = H^2/D'_s$) sont du même ordre. C'est pour cette raison que la phase de

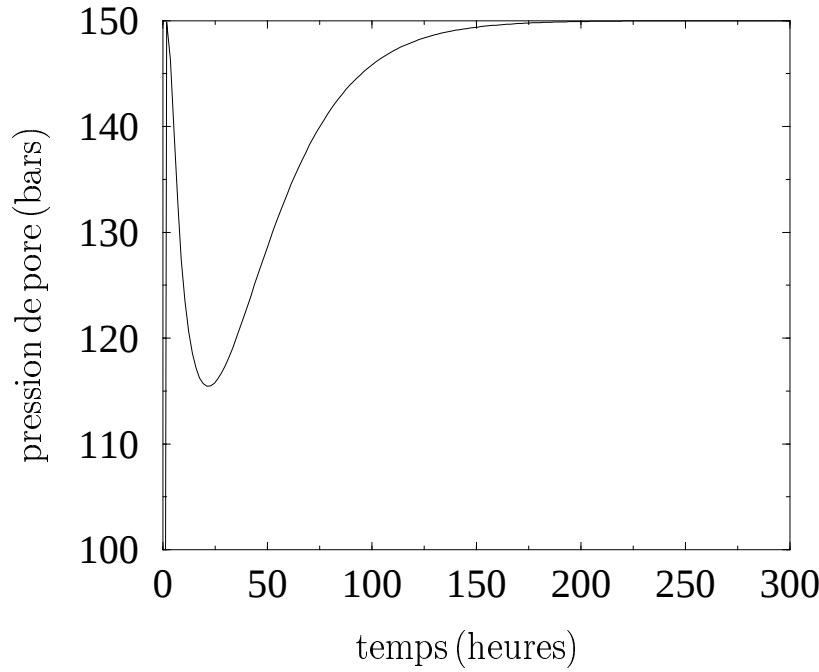


FIG. 10.9: évolution théorique de la pression de pore (CaCl_2) [$\omega = 1$]

retour est plus rapide sur les courbes théoriques (Fig.10.8)-(Fig.10.9) que sur les courbes expérimentales (Fig.10.5)-(Fig.10.6).

Dans l'optique d'améliorer ces résultats vis-vis des données expérimentales, on se propose d'intégrer à présent le couplage eau/sel dans les équations gouvernant le transport des constituants et le comportement de l'argilite. On introduit pour cela un paramètre supplémentaire ω , capable de gérer la troisième information sur le comportement transitoire, que le schéma de résolution non couplé ($\omega = 1$) n'était pas capable d'intégrer.

10.4.3 problème avec couplage

La section précédente a montré qu'une formulation non couplée ($\omega = 1$) des lois de transport pouvait qualitativement reproduire les essais de laboratoire. En fixant la valeur de ω , elle supprime un degré de liberté sur l'identification des différentes phases du comportement transitoire.

On aborde à présent une modélisation intégrant le couplage entre l'eau et le sel ($\omega \neq 1$) dans la perspective d'identifier plus précisément le comportement hydro-mécanique de notre matériau argileux.

Si l'on tient compte du couplage eau/sel dans les équations de transport du sel et de l'eau, l'essai œdométrique est simulé par le système d'équations formé par (10.42)-(10.50)-(10.51), à savoir :

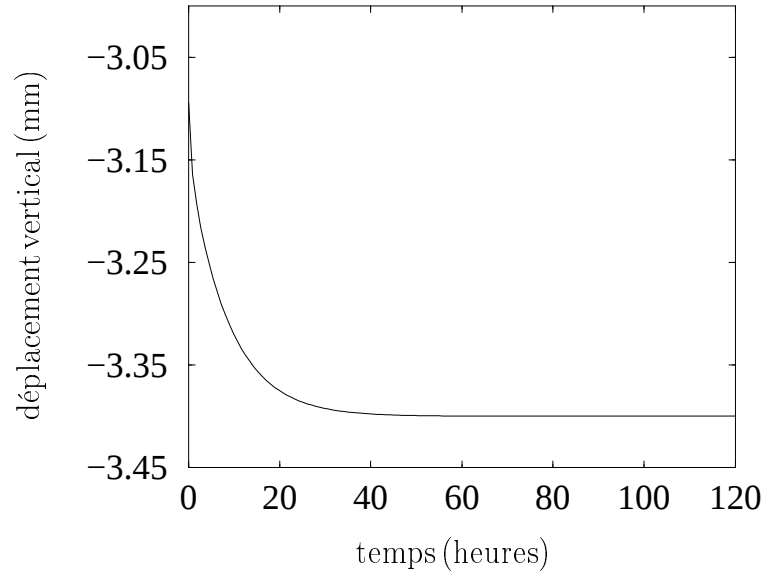


FIG. 10.10: évolution théorique du déplacement vertical (KCl) [$\omega = 1$]

$$\left\{ \begin{array}{l} M_o \dot{E} = \dot{p}_e + b^s \dot{p}_s \\ M_o \dot{E} = D_e \Delta p^e + D_e (1 - \omega) \Delta p^s \\ \dot{p}_s + \frac{p^s \dot{E}}{\phi} = D'_s \Delta p^s + \frac{(1 - \omega)}{b^s} \alpha D_e \Delta p^e \end{array} \right. \quad (10.72)$$

En éliminant le terme en déformation entre les deux dernières équations de (10.72), on obtient un nouveau système de deux équations gouvernant l'évolution des pressions partielles du sel et de l'eau :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{p}_s = A \Delta p^s + B \Delta p^e \\ \dot{p}_e = C \Delta p^s + D \Delta p^e \end{array} \right. \quad (10.73)$$

où l'on a posé :

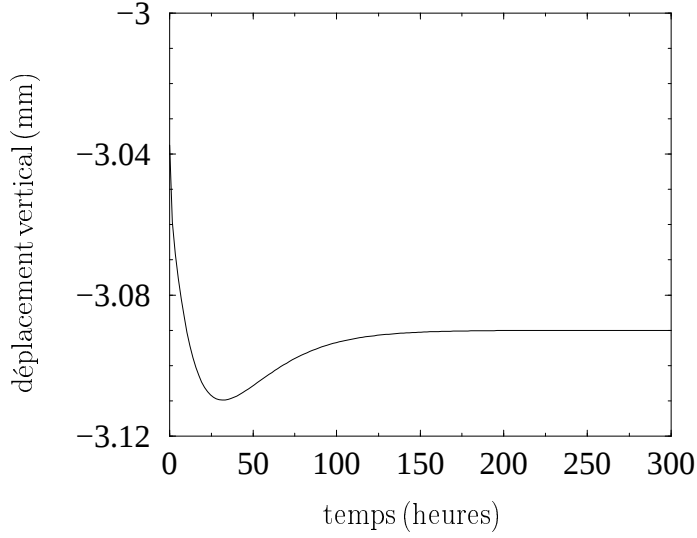


FIG. 10.11: évolution théorique du déplacement vertical (CaCl_2) [$\omega = 1$]

$$\begin{cases} A = D'_s - \alpha (1 - \omega) D_e \\ B = \alpha (1 - \omega - b^s) D_e / b^s \\ C = (1 - \omega) (1 + b^s \alpha) D_e - b^s D'_s \\ D = (1 + \alpha (\omega + b^s - 1)) D_e \end{cases} \quad (10.74)$$

L'idée consiste ici à mettre le système d'équations (10.73) sous la forme matricielle :

$$\underline{\dot{P}} = \underline{\underline{A}} \Delta \underline{P} \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \quad \underline{P} = \begin{pmatrix} p^s \\ p^e \end{pmatrix} \quad (10.75)$$

La diagonalisation de la matrice $\underline{\underline{A}}$ (voir annexe 11.3) conduit finalement à la résolution de deux équations de diffusion du type :

$$\frac{\partial \mu_i}{\partial t} = \tau_i \Delta \mu_i \quad (i = 1, 2) \quad \text{avec} : \quad \begin{cases} \mu_1 = p^s + \xi_{21} p^e \\ \mu_2 = \xi_{12} p^s + p^e \end{cases} \quad (10.76)$$

où les τ_i sont les valeurs propres de la matrice $\underline{\underline{B}} = \underline{\underline{A}}^T$ et les ξ_{ij} sont les composantes des vecteurs propres associés, déterminés en annexe 11.8.2.

On présente ci-après la résolution de ces deux équations afin de déterminer les pressions partielles de sel et d'eau et, par suite, la pression totale du fluide.

$$\frac{\partial \mu_1}{\partial t} = \tau_1 \Delta \mu_1 \quad (\mu_1 = p^s + \xi_{21} p^e)$$

La résolution de cette équation de type “équation de la chaleur” est donnée en annexe 11.8 pour une condition initiale et des conditions aux limites, obtenues en combinant (8.9) et (10.59), telles que :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mu_1(x, 0) = \xi_{21} p_o + 2kT(1 - \xi_{21}) n_o^s & , \quad 0 \leq x \leq H \\ \mu_1(H, t) = \xi_{21} p_o + 2kT(1 - \xi_{21}) n_1^s & , \quad t \geq 0 \\ \frac{\partial \mu_1}{\partial x}(0, t) = 0 & , \quad t \geq 0 \end{array} \right. \quad (10.77)$$

Le résultat s’écrit alors :

$$\mu_1(x, t) = \xi_{21} p_o + 2kT(1 - \xi_{21}) n_1^s - 2kT \Delta n^s (1 - \xi_{21}) \sum_{k=0}^{\infty} \omega_k(x) e^{-\mu_k \tau_1 t} \quad (10.78)$$

où $\omega_k(x)$ est défini en (10.62), μ_k en (11.65), τ_1 est donné en (11.85) et ξ_{21} en (11.87).

$$\frac{\partial \mu_2}{\partial t} = \tau_2 \Delta \mu_2 \quad (\mu_2 = \xi_{12} p^s + p^e)$$

De la même façon, en considérant la condition initiale et les conditions aux limites :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mu_2(x, 0) = p_o + 2kT(\xi_{12} - 1) n_o^s & , \quad 0 \leq x \leq H \\ \mu_2(H, t) = p_o + 2kT(\xi_{12} - 1) n_1^s & , \quad t \geq 0 \\ \frac{\partial \mu_2}{\partial x}(0, t) = 0 & , \quad t \geq 0 \end{array} \right. \quad (10.79)$$

on aboutit au résultat suivant :

$$\mu_2(x, t) = p_o + 2kT(\xi_{12} - 1) n_1^s - 2kT \Delta n^s (\xi_{12} - 1) \sum_{k=0}^{\infty} \omega_k(x) e^{-\mu_k \tau_2 t} \quad (10.80)$$

où τ_2 est donné en (11.85) et ξ_{12} en (11.87).

Finalement, à partir de (10.76), il est possible de déterminer les pressions partielles du sel

et de l'eau telles que :

$$p^e(x, t) = \frac{\mu_2(x, t) - \xi_{12} \mu_1(x, t)}{1 - \xi_{12} \xi_{21}} \quad (10.81)$$

$$p^s(x, t) = \frac{\mu_1(x, t) - \xi_{21} \mu_2(x, t)}{1 - \xi_{12} \xi_{21}} \quad (10.82)$$

pression totale du fluide En combinant (10.81) et (10.82), on obtient l'expression de la pression totale du fluide dans le cas des lois de transport couplées :

$$p(x, t) = \frac{\mu_1(x, t) (1 - \xi_{12}) + \mu_2(x, t) (1 - \xi_{21})}{1 - \xi_{12} \xi_{21}} \quad (10.83)$$

tassement observé De façon analogue à la section précédente, l'expression de l'évolution du déplacement vertical, ou encore du tassement, de l'échantillon d'argilite est donnée par la combinaison de (10.53) et (10.54). En utilisant les résultats (10.76), (10.78), (10.80), (10.81) et (10.82), on a :

$$s(t) = -u(H, t) = \frac{4 kT \Delta n^s}{H M_o} \frac{D_e}{(\xi_{12} \xi_{21} - 1)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\mu_k} V_k(t) \quad (10.84)$$

$$\text{avec } V_k(t) = \frac{(1 - \omega - \xi_{12})(1 - \xi_{21})}{\tau_1} \left(e^{-\mu_k \tau_1 t} - 1 \right) + \frac{(1 - (1 - \omega) \xi_{21})(\xi_{12} - 1)}{\tau_2} \left(e^{-\mu_k \tau_2 t} - 1 \right)$$

où μ_k est donné par (11.65) et γ défini en (10.64).

10.4.4 présentation des résultats théoriques

On présente ici les résultats théoriques obtenus dans le cadre d'une modélisation où le couplage eau/sel est pris en compte. On considère pour cela les mêmes données sur l'argilite ($M_o \approx 1 GPa$, $\phi = 30\%$). Les valeurs théoriques du paramètre b^s sont naturellement inchangées. On identifie la valeur du coefficient de diffusion de l'eau $D_e \approx 1.5 e^{-8} m^2.s^{-1}$ pour laquelle la durée de la phase de chute de pression de pore est identique à celle proposée par les essais de laboratoire.

La comparaison du modèle proposé avec les essais expérimentaux repose donc sur la détermination des deux paramètres indéterminés ω et D'_s/D_e . Une fois ces valeurs déterminées,

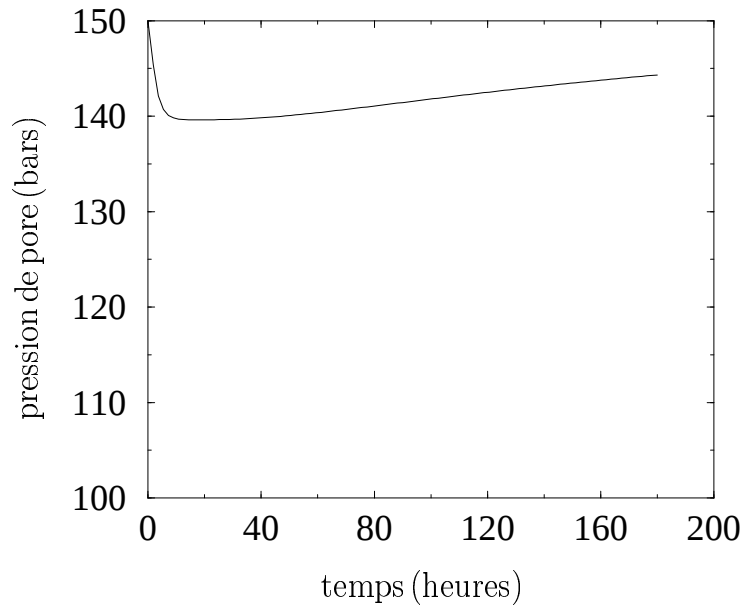


FIG. 10.12: évolution théorique de la pression de pore (KCl)

on exploite les courbes de tassement pour évaluer la cohérence de ces estimations.

- Les courbes d'évolution de la pression de pore (10.12)-(10.13) sont, par construction, analogues aux courbes expérimentales. Comme dans le cas non couplé, elles rendent compte de la chute brutale initiale. La nouveauté se situe au niveau de la qualité de la représentation de la phase de retour, nettement plus progressive ici.

On identifie, en particulier, les valeurs suivantes des paramètres du modèle :

$$\begin{array}{ll}
 \text{(KCl)} & \left\{ \begin{array}{l} \omega = 0.07 \\ D'_s/D_e = 0.41 \end{array} \right. \\
 \text{(CaCl}_2\text{)} & \left\{ \begin{array}{l} \omega = 0.3 \\ D'_s/D_e = 0.26 \end{array} \right.
 \end{array} \quad (10.85)$$

- Les courbes de tassement théoriques (10.14)-(10.15) sont obtenues à partir des paramètres définis en (10.85). Elles sont en très bon accord avec les courbes expérimentales. En particulier, la cinétique de déformation est reproduite de façon très satisfaisante dans les deux cas d'étude.

L'intégration d'un paramètre supplémentaire ω , définissant le couplage eau/sel dans les lois de transport considérées ici, permet donc de rendre compte des spécificités du comportement transitoire. Considérant que les coefficients de diffusion de l'eau (D_e) et du sel (D'_s) permettent de rendre compte de la chronologie et de l'intensité de l'évolution initiale de la pression de pore, ω permet de gérer le retour progressif vers l'état d'équilibre. On

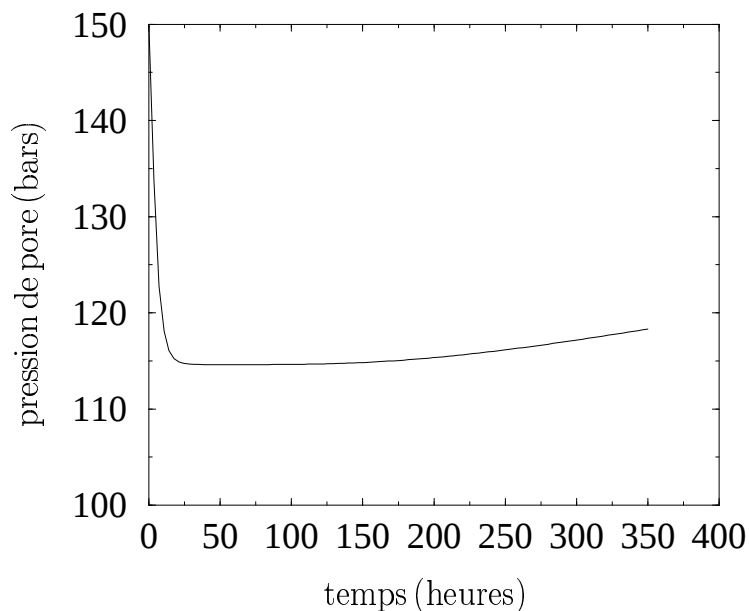


FIG. 10.13: évolution théorique de la pression de pore (CaCl_2)

note que, dans le cas du KCl , ω est très proche de 0. Or, on a justement précisé que la situation $\omega = 0$ ne pouvait pas rendre compte d'une phase transitoire. L'hypothèse de linéarisation sur le coefficient α , pour lequel on a choisi de prendre une valeur asymptotique, permet d'expliquer en partie ce résultat. Le recours à une résolution numérique devrait conduire à des valeurs plus élevées de ω .

Enfin, la bonne tenue de la modélisation proposée ici permet d'envisager la résolution du problème sur une géométrie axisymétrique ([34], [26], [114]) simulant un puits de forage.

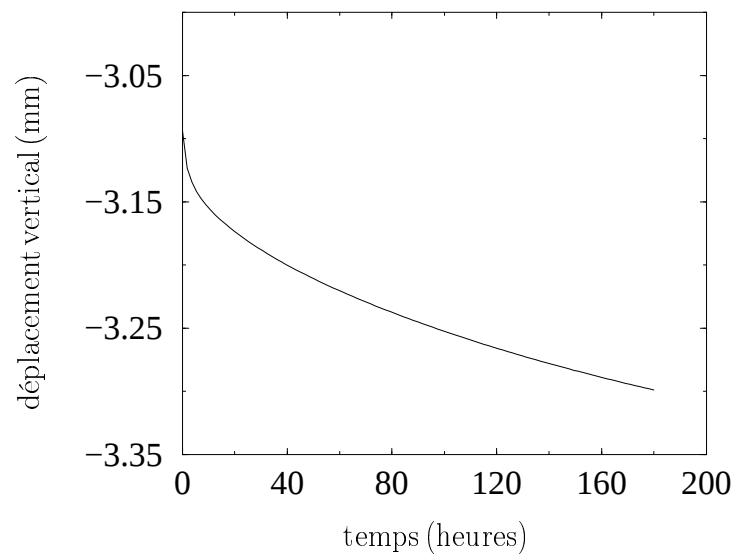


FIG. 10.14: évolution théorique du déplacement vertical (KCl)

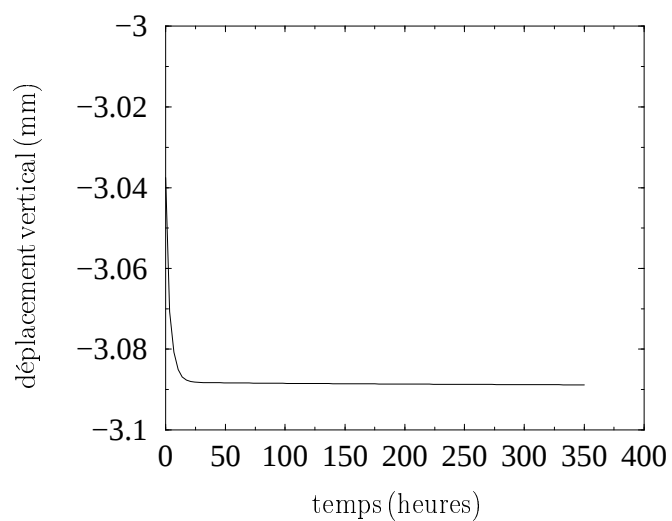


FIG. 10.15: évolution théorique du déplacement vertical (CaCl_2)

Chapitre 11

Annexes de la partie IV

Sommaire

11.1 A1 : Caractérisation des principaux groupes d'argiles	255
11.2 A2 : Définition du potentiel chimique	257
11.3 A3 : Résolution numérique de l'équation de Poisson-Boltzmann	259
11.3.1 le cas linéaire	260
11.3.2 le cas non linéaire	263
11.4 A4 : Solutions approchées du problème de la double couche .	271
11.5 A5 : Positivité de π^g et $\pi^{g'}$	275
11.6 A6 : Extension aux transformations finies	277
11.7 A7 : Quelle définition de l'efficacité osmotique ?	281
11.8 A8 : Résolution de l'équation de la chaleur	283
11.8.1 résolution de l'équation de la chaleur avec terme de source . . .	284
11.8.2 processus de diagonalisation	286

11.1 A1 : Caractérisation des principaux groupes d'argiles

On présente ci-dessous les caractéristiques physico-chimiques des 3 principales familles d'argile rencontrées dans la pratique [95].

On se limite volontairement aux grandeurs intervenant dans la problématique du gonflement d'origine osmotique. Pour chacune des classes d'argile présentées, on donne l'intervalle de définition de ces grandeurs physico-chimiques et l'on précise la valeur utilisée dans le code de calcul numérique traitant le problème de la double couche diffuse.

groupe d'argiles	<i>Montmorillonite</i>		<i>Illite</i>		<i>Kaolinite</i>	
	inf-sup	val. util.	inf-sup	val. util.	inf-sup	val. util.
Substitutions isomorphes	Al ³⁺ par Mg ²⁺		Si ⁴⁺ par Al ³⁺		très peu	
énergie de liaison inter-couches	O-O , très faible		K ions, forte		O-OH , très forte	
Capacité d'échange cationique [meq/g]	0.8-1.5	1.15	0.1-0.4	0.25	0.03-0.15	0.09
Poids spécifique	2.35-2.7	2.74	2.6-3	2.84	2.6-2.68	2.61
Surface spécifique [m ² /g]	700-840 ¹	800	65-100	85	10-20	15
Densité de charge [C/m ²]	-0.12	-0.2	-0.24	-0.25	-0.19	-0.2

(1) après hydratation. (50-120) avant hydratation.

Le même auteur fournit une estimation de la densité de charge portée par une particule d'argile d'une famille donnée de la forme :

$$\sigma \approx -\varsigma \frac{C_{ec}}{S_m} \quad (\varsigma = 96.5 \text{ C/meq}) \quad (11.1)$$

où C_{ec} et S_m désignent respectivement la capacité d'échange cationique et la surface spécifique.

11.2 A2 : Définition du potentiel chimique

Cette annexe s'attache à fournir une interprétation mécanique de la définition usuelle du potentiel chimique des ions en solution. L'idée consiste à effectuer un bilan des efforts s'exerçant sur un volume élémentaire de solution saline saturant l'espace poreux situé entre deux plaquettes d'argile.

Dans le cas des argiles gonflantes, outre les pressions partielles des ions en solution, l'existence d'un champ électrique local introduit des forces d'origine électrique $\underline{F}^e$ dont l'intensité est contrôlée par le gradient du potentiel électrique $\varphi(\underline{x})$:

$$\underline{F}^e(\underline{x}) = e v^\alpha n^\alpha(\underline{x}) \underline{E} = -e v^\alpha n^\alpha(\underline{x}) \underline{\text{grad}} \varphi \quad (11.2)$$

où le signe (resp. l'intensité) de α est fixé(e) par le type (resp. la valence) des ions (anions/cations) en solution.

Pour simplifier l'écriture, on se place dans la situation de deux plaquettes parallèles et l'on écrit l'équilibre de l'élément de solution compris entre x et $x + dx$ (cf. Fig. 11.2) :

$$kT n^\alpha(x) - kT n^\alpha(x + dx) - e v^\alpha n^\alpha(x) \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx = 0 \quad (11.3)$$

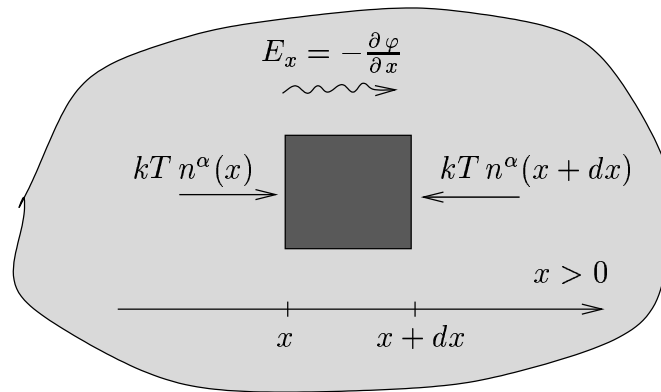


FIG. 11.1: interprétation mécanique du potentiel chimique

L'équation (11.3) s'écrit encore :

$$kT n^\alpha(x) - kT \left(n^\alpha(x) + \frac{\partial n^\alpha(x)}{\partial x} dx \right) - e v^\alpha n^\alpha(x) \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx = 0 \quad (11.4)$$

ce qui nous conduit au résultat suivant :

$$\left(kT \frac{1}{n^\alpha(x)} \frac{\partial n^\alpha(x)}{\partial x} + e v^\alpha \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dx = 0 \quad (11.5)$$

En regroupant les deux termes du membre de gauche de l'équation précédente sous une même dérivation par rapport à la variable d'espace x , on trouve :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\underbrace{kT \operatorname{Log} n^\alpha(x) + e v^\alpha \varphi(x)}_{\mu^\alpha} \right) = 0 \quad (11.6)$$

On identifie alors la relation habituelle² définissant le *potentiel chimique* μ^α de l'espèce ionique de valence v^α et de concentration $n^\alpha(x)$ dans une solution soumise localement à un champ électrique, matérialisé ici par le potentiel électrique $\varphi(x)$. Elle se présente ici comme une interprétation mécanique de l'équilibre local.

Dans le cas des ions monovalents ($v^\alpha = \pm 1$), on retrouve le correspondant unidimensionnel du résultat annoncé en (8.2) :

$$\mu^\pm(x) = kT \operatorname{Log} n^\pm(x) \pm e \varphi(x) \quad (11.7)$$

Naturellement, dans la situation où le champ électrique local disparaît, le terme d'origine électrique est nul si bien que le potentiel chimique d'une espèce en solution électriquement neutre localement s'écrit, comme en (8.1) :

$$\mu^\pm(x) = kT \operatorname{Log} n^\pm(x) \quad (11.8)$$

²obtenue par des raisonnements physico-chimiques

11.3 A3 : Résolution numérique de l'équation de Poisson-Boltzmann

Cette annexe a pour objet la présentation du schéma de résolution numérique de l'équation de Poisson-Boltzmann à la base du problème de la double couche diffuse. D'une façon plus générale, c'est le problème de l'équation de Laplace avec un terme de source, encore appelée "équation de Poisson" par extension, que l'on présente ci-après. On s'intéresse tout d'abord à la situation où le terme de source est constant. Dans ce cas, la nature elliptique de la-dite équation justifie l'utilisation d'un schéma numérique basé sur la méthode des Éléments Finis. On envisage ensuite la situation où le terme de source dépend directement de l'inconnue du problème. La résolution de cette "équation de Poisson *non linéaire*" repose alors sur un schéma numérique itératif utilisant la méthodologie ("Éléments Finis") développée dans le cas linéaire.

La géométrie simplifiée de deux plaquettes d'argile parallèles permet de se ramener à un problème unidimensionnel. Les grandeurs du problème sont des fonctions de la variable d'espace x . Le domaine d'étude est défini par les deux plaquettes d'argile et l'espace qui les sépare, saturé par une solution saline. On exploite alors la symétrie du problème pour ne s'intéresser qu'à la moitié du système comme le suggère la figure 11.2.

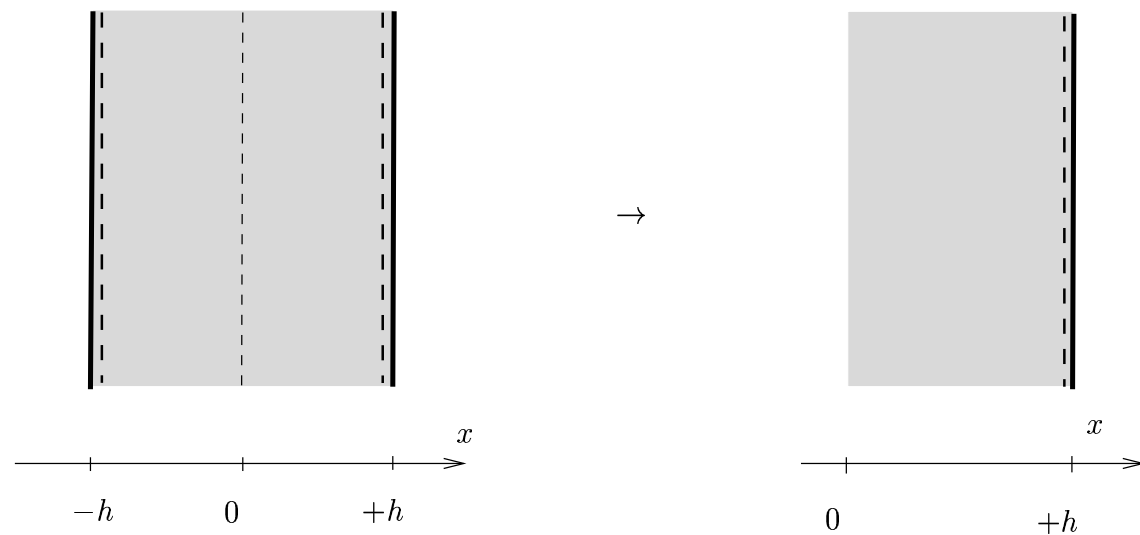


FIG. 11.2: réduction du domaine d'étude

En exploitant le caractère unidimensionnel du problème à résoudre, le domaine d'étude se limite finalement à un segment de $\mathbb{R}$, noté $\mathcal{L}$, délimitant les points d'abscisse $x = 0$ et $x = h$.

11.3.1 le cas linéaire

On commence tout d'abord par présenter la mise en œuvre de la résolution numérique de l'équation de Laplace avec un terme de source constant. :

$$\Delta\varphi = g \quad (g = \text{constant}) \quad (11.9)$$

vérifiant des conditions aux limites de type *Neumann* :

$$\left\{ \begin{array}{ll} a. \quad \frac{\partial\varphi}{\partial x} = 0 & x = 0 \\ b. \quad \frac{\partial\varphi}{\partial x} = \alpha \left(= \frac{\sigma}{\epsilon\epsilon_0} \right) & x = h \end{array} \right. \quad (11.10)$$

N.B. : g est une fonction réelle définie et continue sur $\mathfrak{L}$ et α est une fonction définie en $x = h$.

On rappelle que la condition aux limites (11.10 a.) exprime la condition de symétrie au plan moyen alors que (11.10 b.) est une conséquence de la condition d'électroneutralité dans le domaine étudié.

La méthode des Éléments Finis est basée sur le principe de minimum de l'énergie potentielle du système étudié. Une autre façon d'aborder cette méthode consiste à dualiser l'équation d'équilibre (11.9). Cette dualisation repose sur l'introduction d'un espace vectoriel, appelé *l'espace $\mathcal{W}$ des fonctions-test $\hat{\varphi}$* , dans lequel on cherche la solution φ :

$$\mathcal{W} = \{ \hat{\varphi} : \mathfrak{L} \rightarrow \mathbb{R} \quad / \quad \hat{\varphi} \in \mathcal{C}^2(\mathfrak{L}) \} \quad (11.11)$$

L'opération de dualisation de l'équation (11.9), encore appelée *formulation variationnelle forte*³ du problème, s'écrit alors :

$$\int_0^h (\Delta\varphi - g) \hat{\varphi} dx = 0 \quad , \quad \forall \hat{\varphi} \in \mathcal{W} \quad (11.12)$$

A priori, dans l'équation (11.12), une régularité $\mathcal{C}^0(\mathfrak{L})$ suffit aux fonctions-test $\hat{\varphi}$. Néanmoins, puisque l'on cherche la solution φ parmi toutes les fonctions-test $\hat{\varphi} \in \mathcal{W}$, la même régularité est demandée pour φ et $\hat{\varphi}$. Dans l'espace vectoriel $\mathcal{W}$, la régularité demandée aux fonctions-test $\hat{\varphi}$ se justifie par l'opérateur laplacien (Δ) agissant sur φ , et donc sur

³en raison de la "forte" régularité demandée aux fonctions-test

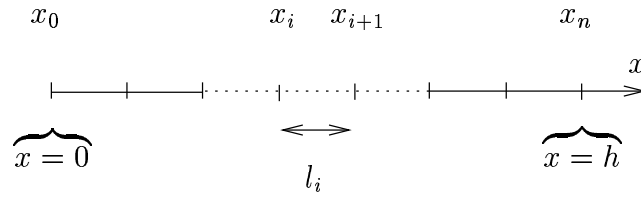


FIG. 11.3: maillage du domaine d'étude

$\hat{\varphi}$, dans l'équation (11.9).

L'utilisation de la relation de Green-Ostrogradsky, ou *1^{ère} identité de Green*, permet de réduire la régularité imposée aux $\hat{\varphi}$. En effet, l'intégration par parties de (11.12) combinée avec les conditions aux limites (11.10), aboutit à la *formulation variationnelle faible* du problème :

$$\int_0^h \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial x} dx = - \int_0^h g \hat{\varphi} dx + \hat{\varphi}(h) \alpha \quad (11.13)$$

où φ et $\hat{\varphi}$ peuvent être désormais recherchées dans un espace vectoriel $\mathcal{V}$ dont les conditions de régularité ont été affaiblies :

$$\mathcal{V} = \{ \hat{\varphi} : \mathfrak{L} \rightarrow \mathbb{R} \quad / \quad \hat{\varphi} \in \mathcal{C}^1(\mathfrak{L}) \} \quad (11.14)$$

N.B. : En raison des conditions aux limites de type *Neumann pur*, les fonctions-test $\hat{\varphi}$ définies sur les espaces vectoriels $\mathcal{W}$ et $\mathcal{V}$ respectivement en (11.11) et (11.14) ne vérifient aucune condition aux limites particulière.

La démarche “Éléments Finis” consiste alors à approcher la solution exacte du problème en considérant que la contribution globale peut s'exprimer sous la forme de contributions discrètes. Pour cela, on recouvre le domaine d'étude par un nombre fini d'éléments et l'on cherche une approximation polynomiale par morceaux de la solution du problème (11.13). Dans $\mathbb{R}^2$, les éléments les plus usités sont des triangles et des quadrilatères. La précision du calcul est alors liée au nombre de noeuds qu'ils contiennent.

Dans le cas présent, *i.e.* dans $\mathbb{R}$, les éléments sont naturellement des segments (voir Fig. 11.3). Par conséquent, nul n'est besoin d'introduire plus de deux noeuds par élément ; pour améliorer la précision du calcul, il suffit simplement d'augmenter le nombre de ces éléments.

On cherche finalement l'ensemble des inconnues du problème sous la forme d'approximations linéaires par élément de la forme :

$$\forall i \in [0, n-1] \quad : \quad f(x) = f_i \frac{x_{i+1} - x}{l_i} + f_{i+1} \frac{x - x_i}{l_i} \quad \text{avec :} \quad \begin{cases} x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ l_i = x_{i+1} - x_i \end{cases} \quad (11.15)$$

où l'on vérifie : $f(x_i) = f_i$ et $f(x_{i+1}) = f_{i+1}$.

Pour les grandeurs qui nous intéressent, on a donc :

$$\begin{cases} \varphi(x) = \varphi_i \frac{x_{i+1} - x}{l_i} + \varphi_{i+1} \frac{x - x_i}{l_i} \\ \hat{\varphi}(x) = \varphi_i \frac{x_{i+1} - x}{l_i} + \hat{\varphi}_{i+1} \frac{x - x_i}{l_i} \\ g(x) = g_i \frac{x_{i+1} - x}{l_i} + g_{i+1} \frac{x - x_i}{l_i} \end{cases} \quad (11.16)$$

Le terme du membre de gauche dans l'équation (11.13), se met , d'après (11.16), sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \int_0^h \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial x} dx &= \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(\frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{l_i} \right) \left(\frac{\hat{\varphi}_{i+1} - \hat{\varphi}_i}{l_i} \right) dx \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} \frac{(\varphi_{i+1} - \varphi_i)(\hat{\varphi}_{i+1} - \hat{\varphi}_i)}{l_i} \end{aligned} \quad (11.17)$$

avec la convention $x_0 = 0$ et $x_n = h$.

Dans le même esprit, le premier terme du membre de droite se ramène à :

$$\begin{aligned} \int_0^h g \hat{\varphi} dx &= \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left\{ \frac{(x_{i+1} - x)(x - x_i)}{l_i^2} (g_i \hat{\varphi}_{i+1} + g_{i+1} \hat{\varphi}_i) + \left(\frac{x_{i+1} - x}{l_i} \right)^2 g_i \hat{\varphi}_i \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{x - x_i}{l_i} \right)^2 g_{i+1} \hat{\varphi}_{i+1} \right\} dx \end{aligned} \quad (11.18)$$

(11.18) fait intervenir des intégrales dont on donne ici les résultats :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x_{i+1} - x)^2 dx = \frac{l_i^3}{3} \\ \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - x_i)^2 dx = \frac{l_i^3}{3} \\ \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x_{i+1} - x)(x - x_i) dx = \frac{l_i^3}{6} \end{array} \right. \quad (11.19)$$

On obtient ainsi la formulation discrète de (11.9) :

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{(\varphi_{i+1} - \varphi_i)(\hat{\varphi}_{i+1} - \hat{\varphi}_i)}{l_i} = & \alpha \hat{\varphi}_n - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{l_i}{3} (g_i \hat{\varphi}_i + g_{i+1} \hat{\varphi}_{i+1}) \\ & - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{l_i}{6} (g_i \hat{\varphi}_{i+1} + g_{i+1} \hat{\varphi}_i) \quad , \quad \forall \hat{\varphi}_j \in \mathcal{V} \end{aligned} \quad (11.20)$$

Finalement, la résolution du problème repose sur la résolution du système d'équations suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} i = 0 : \quad \varphi_1 = \varphi_0 + \frac{l_0^2}{6} (2g_0 + g_1) \\ i \in]0, n-1[: \quad -\frac{\varphi_{i+1}}{l_i} + \varphi_i \left(\frac{1}{l_i} + \frac{1}{l_{i-1}} \right) - \frac{\varphi_{i-1}}{l_{i-1}} = -\frac{1}{6} [l_i g_{i+1} + 2(l_i + l_{i-1}) g_i + l_{i-1} g_{i-1}] \\ i = n-1 : \quad \frac{(\varphi_n - \varphi_{n-1})}{l_{n-1}} = \alpha - \frac{l_{n-1}}{6} (g_{n-1} + 2g_n) \end{array} \right. \quad (11.21)$$

On identifie alors aisément la structure matricielle suivante :

$$[K] [\Phi] = [F] \quad (11.22)$$

où les matrices $[K]$ et $[F]$ sont fonctions des données du problème. L'inconnue $[\Phi]$ peut être déterminée en utilisant la méthode du double balayage de Choleski.

11.3.2 le cas non linéaire

On revient maintenant à la structure du problème précisément défini par la théorie de la double-couche diffuse. On rappelle que la "loi de comportement" du système formé par deux plaquettes d'argile parallèles est donnée par l'équation de Poisson-Boltzmann (8.7).

Pour simplifier les calculs, il est fructueux à ce stade d'effectuer un changement de variable sur le potentiel électrique φ . On introduit ainsi la variable ψ vérifiant :

$$\psi = \frac{v e}{kT} \varphi \quad (11.23)$$

(8.7) s'écrit alors sous la forme :

$$\Delta\psi = \frac{1}{L^2} \sinh(\psi) \quad (11.24)$$

où L est la longueur de Debye définie en (8.8).

Cette équation a la structure d'une équation de Poisson dont le terme de source est fonction de la solution recherchée. De toute évidence, la démarche "Éléments Finis" adoptée au paragraphe précédent n'est pas adaptée pour la résolution de ce type d'équation non linéaire.

De fait, on opte pour un algorithme itératif dans lequel la non-linéarité due au sinus hyperbolique est gérée de façon explicite. Pour déterminer la k -ième itération ψ^k de la solution du problème, l'idée consiste à adopter un développement limité à l'ordre 1 de $\sinh(\psi^k)$ au voisinage de ψ^{k-1} de la forme :

$$\sinh(\psi^k) = \sinh(\psi^{k-1}) + \cosh(\psi^{k-1}) \delta\psi^k \quad (11.25)$$

où $\delta\psi^k = \psi^k - \psi^{k-1}$.

Il est alors possible de déterminer ψ^k comme la solution du problème suivant :

$$\Delta\psi^k - \frac{1}{L^2} \cosh(\psi^{k-1}) \psi^k = \frac{1}{L^2} [\sinh(\psi^{k-1}) - \psi^{k-1} \cosh(\psi^{k-1})] \quad (11.26)$$

Par conséquent, à la k -ième itération, (11.26) peut se mettre sous la forme :

$$\Delta\psi^k - f\psi^k = g \quad \text{avec} \quad \begin{cases} f = \frac{1}{L^2} \cosh(\psi^{k-1}) \\ g = \frac{1}{L^2} [\sinh(\psi^{k-1}) - \psi^{k-1} \cosh(\psi^{k-1})] \end{cases} \quad (11.27)$$

A chaque itération, g et h sont donc des constantes déterminées à l'itération précédente.

Pour simplifier l'écriture, on met de côté le caractère itératif de la procédure de calcul et l'on s'intéresse à la résolution du problème dont l'équation s'écrit désormais :

$$\Delta\psi - f\psi = g \quad (11.28)$$

En fait, la structure de cette équation permet une résolution similaire à celle présentée au paragraphe précédent.

On précise tout de suite les espaces vectoriels des fonctions-test introduites par la formulation variationnelle. Il s'agit d'une simple transposition des espaces vectoriels introduits en (11.11) et (11.14) :

$$\begin{cases} \mathcal{W}' = \{\hat{\psi} : \mathfrak{L} \rightarrow \mathbb{R} \quad / \quad \hat{\psi} \in \mathcal{C}^2(\mathfrak{L})\} \\ \mathcal{V}' = \{\hat{\psi} : \mathfrak{L} \rightarrow \mathbb{R} \quad / \quad \hat{\psi} \in \mathcal{C}^1(\mathfrak{L})\} \end{cases} \quad (11.29)$$

La formulation variationnelle forte de (11.28) s'écrit :

$$\int_0^h [\Delta\psi \hat{\psi} - f\psi \hat{\psi}] dx = \int_0^h g \hat{\psi} dx \quad , \quad \forall \hat{\psi} \in \mathcal{W}' \quad (11.30)$$

En raison du changement de variable proposé en (11.23), il convient de modifier les conditions aux limites du problème. Elles s'écrivent désormais :

$$\begin{cases} \frac{\partial\psi}{\partial x} = 0 & x = 0 \\ \frac{\partial\psi}{\partial x} = \beta \left(= \frac{\sigma v e}{\epsilon\epsilon_0 kT} \right) & x = h \end{cases} \quad (11.31)$$

Dans ces conditions, la formulation variationnelle faible se met sous la forme :

$$\int_0^h \left[\frac{\partial\psi}{\partial x} \frac{\partial\hat{\psi}}{\partial x} + f\psi \hat{\psi} \right] dx = \beta \hat{\psi}(h) - \int_0^h g \hat{\psi} dx \quad , \quad \forall \hat{\psi} \in \mathcal{V}' \quad (11.32)$$

L'idée consiste ensuite à exploiter l'approximation linéaire (11.15) pour chacune des grandeurs du problème.

On ne s'attarde pas ici sur les détails du calcul mais on donne à titre indicatif le système d'équations permettant une détermination de la solution discrétisée du problème non linéaire :

$$\left\{ \begin{array}{l}
i = 0 : \quad \psi_0 \left(\frac{1}{l_0} + \frac{l_0}{12} (3f_0 + f_1) \right) + \psi_1 \left(-\frac{1}{l_0} + \frac{l_0}{12} (f_0 + f_1) \right) = -\frac{l_0}{6} (2g_0 + g_1) \\
\\
i \in]0, n-1[: \quad \psi_{i-1} \left(-\frac{1}{l_{i-1}} + \frac{l_{i-1}}{12} (f_{i-1} + f_i) \right) + \psi_{i+1} \left(-\frac{1}{l_i} + \frac{l_i}{12} (f_i + f_{i+1}) \right) \\
\quad + \psi_i \left(\frac{1}{l_i} + \frac{1}{12} [l_i (3f_i + f_{i+1}) + l_{i-1} (3f_i + f_{i-1})] + \frac{1}{l_{i-1}} \right) \\
\quad = -\frac{1}{6} [l_i (2g_i + g_{i+1}) + l_{i-1} (2g_i + g_{i-1})] \\
\\
i = n-1 : \quad \psi_{n-1} \left(-\frac{1}{l_{n-1}} + \frac{l_{n-1}}{12} (f_{n-1} + f_n) \right) + \psi_n \left(\frac{1}{l_{n-1}} + \frac{l_{n-1}}{12} (3f_n + f_{n-1}) \right) \\
\quad = \beta - \frac{l_{n-1}}{6} (2g_n + g_{n-1})
\end{array} \right. \quad (11.33)$$

N.B : Si l'on se place dans la situation $f_i = 0, \forall i \in [0, n-1]$, (11.28) est analogue à (11.9). Le système d'équations (11.33) dégénère alors en un système analogue à celui obtenu en (11.21).

application On présente ci-dessous les profils de concentration en anions et en cations dans l'espace interparticulaire pour les trois principales familles d'argile et pour deux valeurs de la concentration saline (en NaCl) de la solution extérieure.

Pour des argiles saturées, l'hypothèse d'arrangement parallèle des particules permet d'obtenir une estimation de la demi-distance interparticulaire en fonction de l'indice des vides e_0 caractérisant chaque type d'argile à l'échelle macroscopique :

$$h = \frac{e_0}{G_s S_m \gamma_w} \quad (11.34)$$

où G_s est le poids spécifique, S_m la surface spécifique et γ_w le poids volumique du fluide, supposé ici égal à celui de l'eau ($\gamma_w \approx 10^6 \text{ g/m}^3$). Les deux premières caractéristiques sont données dans le tableau de l'annexe 11.1.

Mitchell [95] propose des valeurs de l'indice des vides pour différents types d'argile et pour différentes concentrations salines de la solution extérieure. Les valeurs suivantes de l'indice des vides pour deux concentrations extérieures ($n_\infty^s = 1\text{ M}, 0.1\text{ M}$) sont retenues pour effectuer les simulations numériques présentées ci-après :

argile	<i>Montmorillonite</i>		<i>Illite</i>		<i>Kaolinite</i>	
n_∞^s (M)	1	0.1	1	0.1	1	0.1
e_0	3	5.40	1.77	2	0.95	1
$\approx h$ (Å)	14	25	73	82	240	255

où $1\text{ M} = 1\text{ mol.l}^{-1}$.

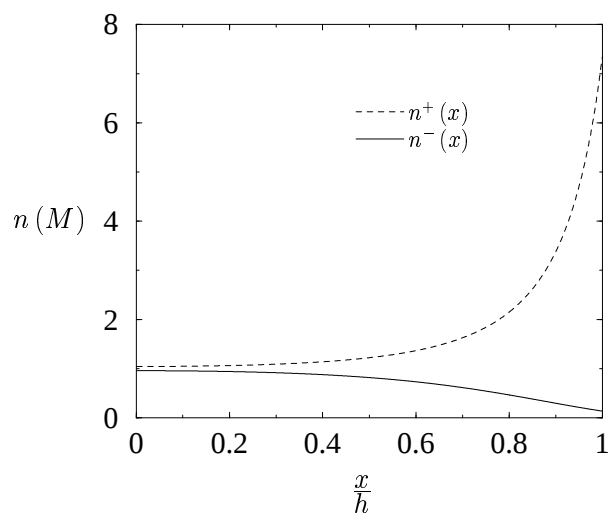
A partir de ces données, on obtient les distributions ioniques dans l'espace interparticulaire⁴. L'abscisse $x = 0$ correspond au plan moyen entre les particules. L'abscisse $x = h$ correspond à la surface d'une particule.

Ces résultats méritent quelques commentaires :

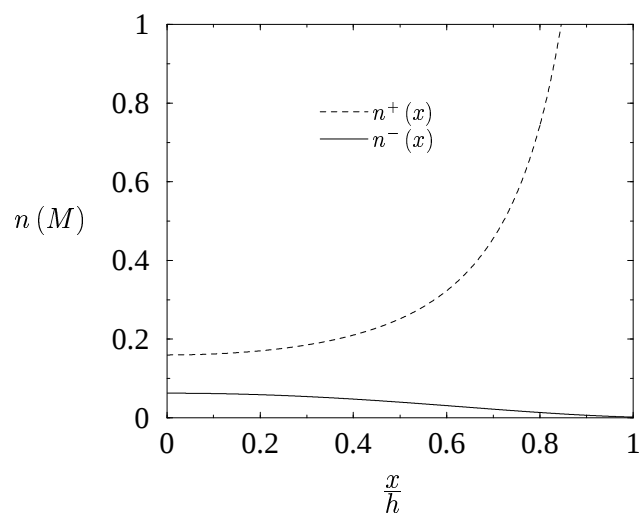
1. Tout d'abord, on vérifie des propriétés évidentes du comportement à l'échelle d'un pore :
 - la concentration en cations (resp. anions) dans l'espace interparticulaire est toujours supérieure (resp. inférieure) ou égale à la concentration de la solution extérieure. Cela provient essentiellement de la négativité du potentiel électrique en tout point du domaine, liée aux charges négatives portées par les particules d'argile.
 - la concentration des cations augmente très significativement à proximité de la surface d'une particule négativement chargée. Au contraire, la concentration en anions tend vers zéro dans le même cas. On retrouve le comportement d'attraction (resp. de répulsion) des cations (resp. anions) à la surface des particules.
2. Pour chacune des familles considérées ici, on constate que l'éventuel écart à l'électroneutralité au plan moyen est contrôlé par l'intensité de la diminution de la concentration saline de la solution extérieure. Dans les cas présentés, on relève deux situations différentes :
 - pour la Montmorillonite, une concentration extérieure de 0.1 mol.l^{-1} suffit à briser l'électroneutralité au plan moyen. Il existe par conséquent une pression de gonflement d'origine osmotique non-nulle à l'échelle du pore.
 - pour les deux autres familles (Illites et Kaolinites), la diminution de la concentration extérieure ne suffit pas à perturber le comportement au plan moyen. Manifes-

⁴on se restreint au demi-espace $x \in [0, h]$

tement, pour ces familles d'argile, une concentration bien en-deçà de 0.1 mol.l^{-1} est nécessaire pour mobiliser une pression de gonflement.



(a) $n_\infty^s = 1 \text{ M}$



(b) $n_\infty^s = 0.1 \text{ M}$

FIG. 11.4: distribution anionique et cationique (Montmorillonite)

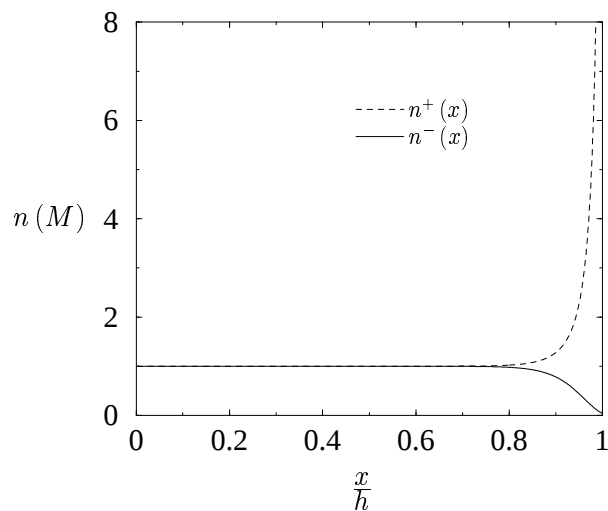
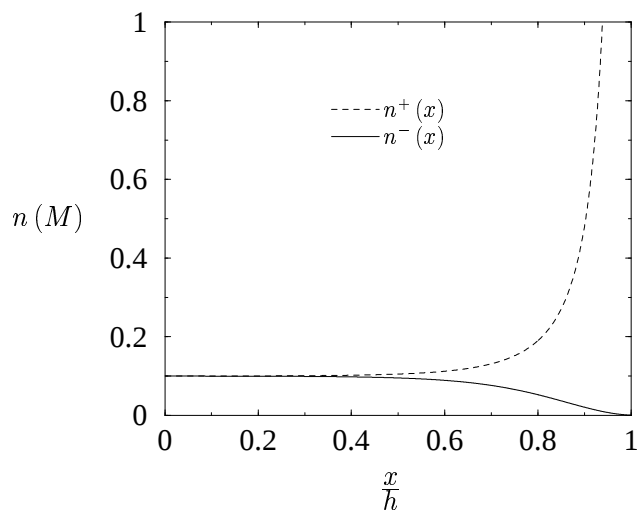
(a) $n_{\infty}^s = 1 \text{ M}$ (b) $n_{\infty}^s = 0.1 \text{ M}$

FIG. 11.5: distribution anionique et cationique (Illite)

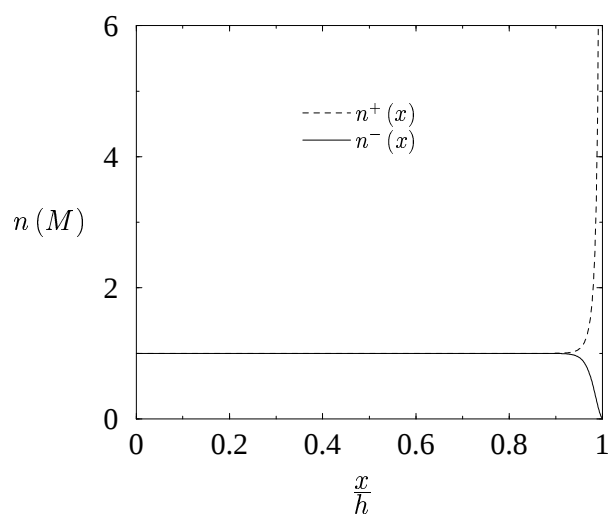
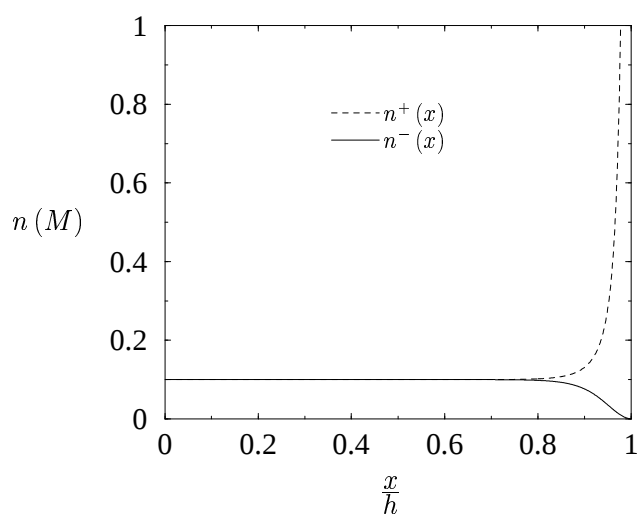
(a) $n_{\infty}^s = 1 \text{ M}$ (b) $n_{\infty}^s = 0.1 \text{ M}$

FIG. 11.6: distribution anionique et cationique (Kaolinite)

11.4 A4 : Solutions approchées du problème de la double couche

1. L'approximation de faible recouvrement (*weak overlap approximation*) est souvent utilisée comme expression analytique approchée de la pression de gonflement osmotique. Elle s'exprime de la façon suivante [77] :

$$\pi^g \approx 64 kT n_\infty \gamma^2 e^{-\frac{2h}{L}} \quad (11.35)$$

où γ est la racine positive de l'équation :

$$\alpha \gamma^2 + \gamma - \alpha = 0 \quad \alpha = \frac{|\sigma|}{\sqrt{32 \epsilon \epsilon_0 kT n_\infty}} \quad (11.36)$$

Pour une distance interparticulaire donnée, la comparaison de cette solution analytique avec la solution “exacte” numérique montre que cette approximation est d'autant plus efficace que la concentration de la solution saline extérieure est élevée. La bonne tenue de cette solution analytique s'étend toutefois jusqu'à une concentration $n_\infty = 0.01 \text{ mol.l}^{-1}$ (figure 1.a) pourvu que l'on ne considère pas de distances interparticulaires trop faibles ($h \geq 20 \text{ \AA}$) (figure 1.b). En toute rigueur, cette condition ($h \geq 20 \text{ \AA}$) doit être satisfaite pour envisager une analyse quantitative du gonflement osmotique par la théorie de la double couche.

2. Pour les situations de faible concentration en sel de la solution interstitielle, la structure de l'équation de Poisson-Boltzmann se simplifie si bien que la détermination du potentiel électrique peut se faire analytiquement. En effet, dans cette situation la concentration en anions devient négligeable devant celle des cations. En particulier, le potentiel électrique (négatif) vérifie $|\varphi| \gg \left(\frac{kT}{ve}\right) \approx 26mV$ pour des ions monovalents ($v = 1$).

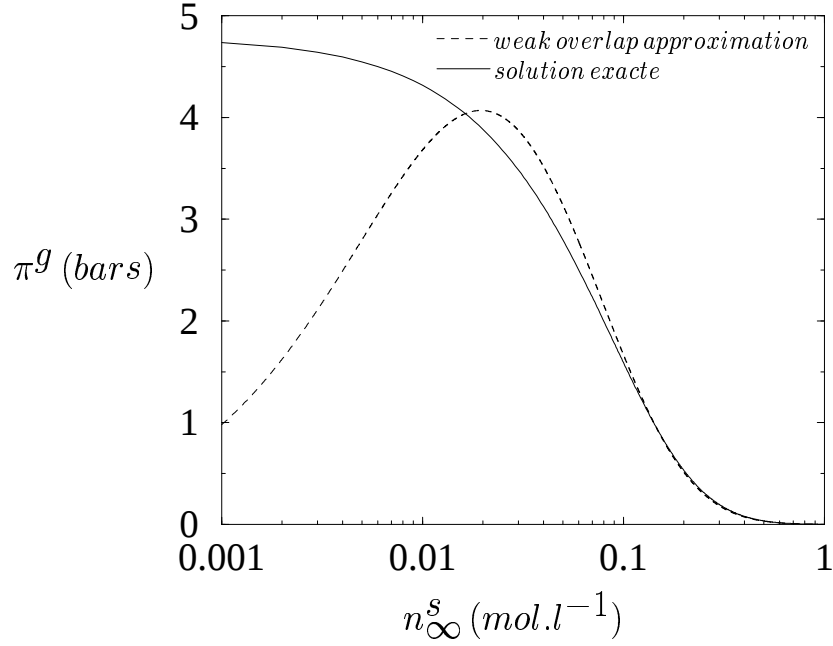
En considérant le changement de variable $\psi = \frac{ve\varphi}{kT}$, l'équation de Poisson-Boltzmann, donnée en (8.7), se réduit dans le cas unidirectionnel à :

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = -\frac{1}{2L^2} \exp(-\psi) \quad (11.37)$$

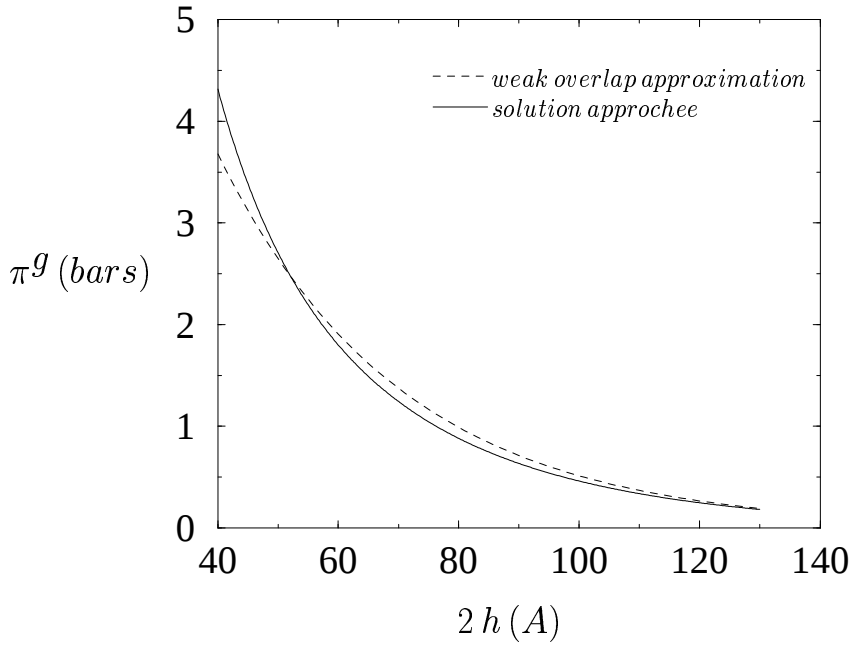
où L correspond à la longueur de Debye définie en (8.8).

La solution de cette équation s'écrit :

$$\psi(x) = Ln \left[\cos^2 \left(\frac{x}{2L} \right) \right] \quad (11.38)$$



a) influence de la concentration extérieure n_{∞}^s ($\sigma = -0.2C/m^2, h=20 \text{ \AA}$)



b) influence de la distance interparticulaire h ($\sigma = -0.2C/m^2, n_{\infty}^s = 0.01 \text{ mol.l}^{-1}$)

FIG. 11.7: comparaison solution approchée/solution exacte

Le profil des distributions des cations est alors donné par :

$$n^+(x) = \frac{n_\infty^s}{\cos^2(x/2L)} \quad (11.39)$$

Manifestement, cette expression analytique de la distribution des cations ne permet pas d'obtenir une expression analytique de la pression de gonflement dans la mesure où, d'après (11.39), la concentration en cations au plan moyen est toujours égale à la concentration de la solution extérieure n_∞^s . Ce constat est directement lié aux hypothèses de travail. Cette solution convient en fait parfaitement aux colloïdes pour lesquels on ne s'intéresse qu'à une unique double couche⁵. Dans ces conditions, le potentiel ψ est assujéti à vérifier la condition aux limites $\psi(x=0) = 0$ (cf. (11.38)). De fait, cette condition (électroneutralité au plan moyen) interdit l'existence d'une pression de gonflement d'origine osmotique.

⁵les particules sont suffisamment isolées pour annuler l'interaction entre les couches diffuses

11.5 A5 : Positivité de π^g et $\pi^{g'}$

A partir de (8.4), il est possible d'écrire les pressions de gonflement π^g et $\pi^{g'}$, données en (8.15) et (8.24) respectivement, sous la forme⁶ :

$$\begin{cases} \pi^g = 2 kT n_{th}^s (\cosh [\psi(0)] - 1) \\ \pi^{g'} = 2 kT n_{th}^s (< \cosh [\psi(x)] > -1) \end{cases} \quad (11.40)$$

où l'on rappelle que :

$$\cosh(y) = \frac{e^y + e^{-y}}{2} \quad (11.41)$$

La fonction $\forall y, y \rightarrow \cosh(y)$ est supérieure ou égale à 1. Par conséquent, la positivité de π^g et $\pi^{g'}$ est immédiate.

⁶ $\langle . \rangle$ est l'opérateur moyenne

11.6 A6 : Extension aux transformations finies

En exploitant un résultat dû à Dormieux et al. [30] dans le cas d'une transformation infinitésimale, il est possible de relier, sous forme différentielle, les pressions partielles de chacun des constituants de la phase fluide et les variables d'état définissant le comportement du milieu poreux. Dans le cas d'une transformation finie, ce résultat se généralise sous la forme :

$$\begin{pmatrix} dp^s \\ dp^e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M^{ss} & M^{se} \\ M^{ee} & M^{es} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\underline{\underline{B}}^s : d\underline{\underline{\Delta}} + (dm^s/\rho_\infty^s) \\ -\underline{\underline{B}}^e : d\underline{\underline{\Delta}} + (dm^e/\rho_\infty^e) \end{pmatrix} \quad (11.42)$$

où M^{ij} (resp. $\underline{\underline{B}}^i$) sont des coefficients scalaires (resp. tensoriels) fonction des variables d'état $\underline{\underline{\Delta}}$, m^s et m^e . On montre également que la loi de comportement se met sous la forme :

$$d\underline{\underline{\pi}} = \mathbb{C} : d\underline{\underline{\Delta}} - M^{ij} \underline{\underline{B}}^j \left(\frac{dm}{\rho_{th}} \right)^i \quad (11.43)$$

En combinant (11.42) et (11.43), on aboutit au résultat annoncé en (9.30) :

$$d\underline{\underline{\pi}} = \mathbb{C}_0 : d\underline{\underline{\Delta}} - \underline{\underline{B}}^e dp^e - \underline{\underline{B}}^s dp^s \quad (11.44)$$

Reste maintenant à exprimer les inconnues du problème, à savoir les coefficients M^{ij} et $\underline{\underline{B}}^i$. Pour cela, on exprime la compatibilité des expressions (11.42) avec les équations d'état de chacun des constituants de la phase fluide.

1. L'eau n'interagissant pas de façon électrique avec la matrice solide ($\rho_\infty^e = \rho^e$), son équation d'état reste inchangée que l'on soit dans le milieu argileux ou à l'extérieur. Celle-ci s'exprime à partir du module de compression K^e :

$$dp^e = K^e(p^e) (d\rho^e/\rho^e) \quad (11.45)$$

La conservation de la masse d'eau dans la transformation du squelette s'écrit :

$$(dm^e/\rho^e) = dJ + J \phi (d\rho^e/\rho^e) \quad (11.46)$$

où $J = J(\underline{\underline{\Delta}}) = \det \underline{\underline{F}}$ est le Jacobien de la transformation, de gradient $\underline{\underline{F}}$. La combinaison de (11.45) et (11.46) fournit une relation analogue à (11.42) permettant d'identifier les coefficients $\underline{\underline{B}}^e$, M^{ee} et M^{es} :

$$dp^e = \frac{K^e(p^e)}{J\phi} ((dm^e/\rho^e) - dJ) \Rightarrow \begin{cases} M^{es} = 0 \\ M^{ee} = \frac{K^e(p^e)}{J\phi} \\ \underline{\underline{B}}^e = \frac{\partial J}{\partial \underline{\underline{\Delta}}}(\underline{\underline{\Delta}}) \end{cases} \quad (11.47)$$

2. Pour le sel, l'existence d'une interaction complique légèrement la procédure d'identification. On exploite tout d'abord la conservation de la masse de sel et l'hypothèse d'incompressibilité de la matrice solide :

$$\begin{cases} a. & (dm^s/\rho^s) = dJ + J\phi (d\rho^s/\rho^s) \\ b. & J(1-\phi) = 1-\phi_o \Leftrightarrow d(J\phi) = dJ \end{cases} \quad (11.48)$$

On rappelle que les densités vraie ρ^s et équivalente ρ_{th}^s du sel sont liées par l'intermédiaire du coefficient d'activité macroscopique : $\rho_{th}^s = A\rho^s$. En utilisant cette relation dans (11.48.a.), on montre que :

$$\frac{dp^s}{p^s} = \frac{A}{J\phi} [(dm^s/\rho_\infty^s) - d(J\phi/A)] \quad (11.49)$$

En comparant (11.42) et (11.49), on identifie deux des trois inconnues :

$$\begin{cases} M^{se} = 0 \\ M^{ss} = \frac{p^s/\phi}{J/A} \end{cases} \quad (11.50)$$

Cette même comparaison permet l'identification de $\underline{\underline{B}}^s$ à travers la relation :

$$\underline{\underline{B}}^s : d\underline{\underline{\Delta}} = d(J\phi/A) \Rightarrow \underline{\underline{B}}^s = \frac{\partial(J\phi/A)}{\partial \underline{\underline{\Delta}}} \quad (11.51)$$

où l'on a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(J\phi/A)}{\partial \underline{\underline{\Delta}}} &= \frac{\phi}{A} \frac{\partial J}{\partial \underline{\underline{\Delta}}} + J \frac{\partial(\phi/A)}{\partial \underline{\underline{\Delta}}} = \frac{\phi}{A} \frac{\partial J}{\partial \underline{\underline{\Delta}}} + J \frac{\partial(\phi/A)}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial \underline{\underline{\Delta}}} \\ &= \frac{\phi}{A} \frac{\partial J}{\partial \underline{\underline{\Delta}}} + \frac{\partial(\phi/A)}{\partial \phi} \left(\frac{\partial(J\phi)}{\partial \underline{\underline{\Delta}}} - \phi \frac{\partial J}{\partial \underline{\underline{\Delta}}} \right) \\ &= \frac{\partial(\phi/A)}{\partial \phi} \frac{\partial(J\phi)}{\partial \underline{\underline{\Delta}}} \end{aligned} \quad (11.52)$$

La condition d'incompressibilité (11.48.b.) permet alors d'exprimer le résultat annoncé en (9.32) :

$$\underline{\underline{B}}^s = \frac{\partial(\phi/A)}{\partial\phi} \frac{\partial J}{\partial \underline{\underline{\Delta}}} = \frac{\partial(\phi/A)}{\partial\phi} \underline{\underline{B}}^e \quad (11.53)$$

11.7 A7 : Quelle définition de l'efficacité osmotique ?

L'efficacité osmotique ω s'exprime communément comme le rapport entre les gradients de pression totale et partielle de sel assurant la nullité du flux de solvant (cf. section 10.2.2) :

$$\omega = \frac{\underline{\text{grad}} p}{\underline{\text{grad}} p^s} \Big|_{\phi(\underline{V}_e - \underline{V}_{sq})=0} \quad (11.54)$$

En clair, pour annuler le mouvement du solvant induit par un gradient de pression totale, il faut assurer un gradient de pression partielle de sel $\underline{\text{grad}} p^s = \frac{1}{\omega} \underline{\text{grad}} p$.

Sur la base du raisonnement qui a permis d'exhiber comme force motrice la quantité $\underline{\text{grad}}(p^s + \pi^g) = b^s \underline{\text{grad}} p^s$, on pourrait définir l'efficacité osmotique, dans les mêmes conditions que précédemment, comme le rapport ([9], [10]) :

$$\omega = \frac{\underline{\text{grad}} p}{b^s \underline{\text{grad}} p^s} \Big|_{\phi(\underline{V}_e - \underline{V}_{sq})=0} \quad (11.55)$$

On aboutirait alors aux expressions suivantes des vecteurs filtration du sel et de l'eau :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{sel : } \phi(\underline{V}_s - \underline{V}_{sq}) = -K_{ss} b^s \underline{\text{grad}}_z p^s - K_{ee} \left(\frac{1 - \omega b^s}{b^s} \right) \underline{\text{grad}}_z p^e \\ \text{eau : } \phi(\underline{V}_e - \underline{V}_{sq}) = -K_{ee} (1 - \omega b^s) \underline{\text{grad}}_z p^s - K_{ee} \underline{\text{grad}}_z p^e \end{array} \right. \quad (11.56)$$

Dans le cadre de notre travail, on n'est pas en mesure de statuer sur la plus grande pertinence de l'une ou l'autre de ces définitions pour l'efficacité osmotique. Il convient toutefois de bien adapter la technique expérimentale et la démarche théorique conduisant à une évaluation quantitative de l'efficacité osmotique.

11.8 A8 : Résolution de l'équation de la chaleur

L'objectif de cette section est la détermination de la solution d'un problème de diffusion classique du type :

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \Lambda \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} \quad (11.57)$$

où l'on suit l'évolution, dans l'espace et dans le temps, de la quantité $Q(x, t)$, de conductivité Λ , soumise à la condition initiale et aux conditions mixtes de *Dirichlet* et *Neumann* :

$$\begin{cases} Q(x, 0) = Q_0 & , \quad 0 \leq x \leq H \\ Q(H, t) = Q_1 & , \quad t \geq 0 \\ \frac{\partial Q}{\partial x}(0, t) = 0 & , \quad t \geq 0 \end{cases} \quad (11.58)$$

Pour résoudre ce type d'équation, on effectue, dans un premier temps, le changement de variable $U(x, t) = Q(x, t) - Q_1$ et l'on obtient le nouveau système à résoudre :

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \Lambda \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \quad (11.59)$$

vérifiant les conditions suivantes :

$$\begin{cases} U(x, 0) = Q_0 - Q_1 & , \quad 0 \leq x \leq H \\ U(H, t) = 0 & , \quad t \geq 0 \\ \frac{\partial U}{\partial x}(0, t) = 0 & , \quad t \geq 0 \end{cases} \quad (11.60)$$

On écrit $U(x, t)$ sous la forme $U(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k(t) u_k(x)$. L'équation (11.59) donne alors :

$$\frac{d\alpha_k}{dt} u_k = \Lambda \alpha_k \frac{d^2 u_k}{dx^2} \quad (11.61)$$

La résolution de cette équation nécessite tout d'abord la détermination des μ_k vérifiant :

$$-\mu_k u_k = \frac{d^2 u_k}{dx^2} \quad (11.62)$$

La solution de l'équation (11.62) est donnée par :

$$u_k(x) = A_k \cos(\sqrt{\mu_k} x) + B_k \sin(\sqrt{\mu_k} x) \quad (11.63)$$

Les constantes A_k et B_k sont déterminées à partir des conditions aux limites (11.60) appliquées aux u_k :

$$\frac{du_k}{dx}(0, t) = 0 \Rightarrow B_k = 0 \quad (11.64)$$

$$u_k(H, t) = 0 \Rightarrow \mu_k = \frac{(2k+1)^2 \pi^2}{4 H^2} \quad (11.65)$$

En comparant les équations (11.61) et (11.62), on obtient l'équation régissant l'évolution des α_k :

$$\frac{d\alpha_k}{\alpha_k} = -\Lambda \mu_k dt \quad (11.66)$$

où les μ_k sont définis en (11.65).

La solution est immédiate :

$$\alpha_k(t) = C_k e^{-\mu_k \Lambda t} \quad (11.67)$$

Finalement, la solution de l'équation (11.59) se met sous la forme :

$$U(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k(t) u_k(x) = \sum_{k=0}^{\infty} D_k \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2} \frac{x}{H}\right) e^{-\mu_k \Lambda t} \quad (11.68)$$

La constante D_k est déterminée par la condition initiale dans (11.60) :

$$D_k = \frac{2}{H} \int_0^H (Q_0 - Q_1) \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2} \frac{x}{H}\right) dx \quad (11.69)$$

$$D_k = \frac{4}{\pi} \frac{(-1)^k}{(2k+1)} (Q_0 - Q_1)$$

L'évolution de la quantité $Q(x, t)$, gouvernée par l'équation (11.57), est donc reliée aux données du problème de la façon suivante :

$$Q(x, t) = Q_1 + \frac{4(Q_0 - Q_1)}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)} \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2} \frac{x}{H}\right) e^{-\mu_k \Lambda t} \quad (11.70)$$

11.8.1 résolution de l'équation de la chaleur avec terme de source

On s'intéresse dans cette section à la détermination de la solution de l'équation de la chaleur avec un terme de source de forme supposée connue. Ce type de problème est gouverné par une équation de la forme :

$$\frac{\partial J}{\partial t} = \Gamma \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} - \Omega(x, t) \quad (11.71)$$

où $\Omega(x, t)$ représente le terme de source.

On se place dans le cadre d'un problème d'évolution avec condition initiale et conditions mixtes de *Dirichlet* et *Neumann* :

$$\left\{ \begin{array}{ll} J(x, 0) = J_0 & ; \quad 0 \leq x \leq H \\ J(H, t) = J_1 & ; \quad t \geq 0 \\ \frac{\partial J}{\partial x}(0, t) = 0 & ; \quad t \geq 0 \end{array} \right. \quad (11.72)$$

D'autre part, comme en (11.58), on applique aux équations (11.71) et (11.72) le changement de variable :

$$V(x, t) = J(x, t) - J_1 \quad (11.73)$$

et l'on obtient le nouveau système à résoudre :

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \Gamma \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} - \Omega(x, t) \quad (11.74)$$

vérifiant les conditions suivantes :

$$\begin{cases} V(x, 0) = J_0 - J_1 & ; \quad 0 \leq x \leq H \\ V(H, t) = 0 & ; \quad t \geq 0 \\ \frac{\partial V}{\partial x}(0, t) = 0 & ; \quad t \geq 0 \end{cases} \quad (11.75)$$

Pour aboutir à la solution du problème posé, on décompose les champs $V(x, t)$ et $\Omega(x, t)$ sur une même base $\omega_k(x)$:

$$\begin{aligned} V(x, t) &= \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k(t) \omega_k(x) \\ \Omega(x, t) &= \sum_{k=0}^{\infty} \beta_k(t) \omega_k(x) \end{aligned} \quad (11.76)$$

En introduisant (11.76) dans (11.74), on aboutit à l'équation suivante :

$$\frac{d\alpha_k}{dt} \omega_k = \Gamma \alpha_k \frac{d^2 \omega_k}{dx^2} - \beta_k \omega_k \quad (11.77)$$

La résolution d'une telle équation nécessite, en premier lieu, la détermination de l'ensemble des μ_k vérifiant :

$$-\frac{d^2 \omega_k}{dx^2} = \mu_k \omega_k \quad (11.78)$$

et les conditions aux limites (11.75). D'après (11.62)-(11.65), on a :

$$\mu_k = \frac{(2k+1)^2 \pi^2}{4 H^2} \quad (11.79)$$

Ensuite, en considérant le résultat (11.79), on introduit (11.78) dans (11.77) et on obtient :

$$\frac{d\alpha_k}{dt} + \mu'_k \alpha_k = \beta_k \quad (11.80)$$

avec $\mu'_k = \Gamma \mu_k$.

La solution de cette équation est déterminée de façon semi-analytique [81].

On aboutit finalement à la solution de l'équation (11.74) sous la forme :

$$V(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k(0) e^{-\mu'_k t} \omega_k(x) + \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \int_0^t \beta_k(s) e^{-\mu'_k (t-s)} ds \right\} \omega_k(x) \quad (11.81)$$

11.8.2 processus de diagonalisation

Soit $\underline{\underline{B}} = [b_{ij}]$, la matrice carrée définie comme suit :

$$\underline{\underline{B}} = \begin{pmatrix} A & C \\ B & D \end{pmatrix} \quad (11.82)$$

Les vecteurs propres $\underline{\xi} = (\xi_1, \xi_2)^T$ de $\underline{\underline{B}}$ sont solutions (non-nulles) de l'équation matricielle :

$$\begin{pmatrix} A & C \\ B & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \tau \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} \quad \text{ou encore} \quad (\underline{\underline{B}} - \tau \underline{\underline{\delta}}) \underline{\xi} = \underline{0} \quad (11.83)$$

où τ est appelée valeur propre de la matrice $\underline{\underline{B}}$ et $\underline{\underline{\delta}}$ la matrice identité.

L'équation (11.83) est un système linéaire homogène qui a des solutions non-nulles si et seulement si le déterminant du système est nul, c'est-à-dire si la condition suivante est vérifiée :

$$(A - \tau)(D - \tau) - BC = 0 \quad (11.84)$$

On en déduit les valeurs propres τ_1 et τ_2 :

$$\tau_{1,2} = \frac{1}{2} \left((A + D) \pm \sqrt{\Delta} \right) \quad (11.85)$$

où $\Delta = (A - D)^2 + 4BC$

Soit $\underline{\xi}_i = (\xi_{1i}, \xi_{2i})^T$, le vecteur propre associé à la valeur propre τ_i , on a :

$$\begin{pmatrix} A & C \\ B & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{1i} \\ \xi_{2i} \end{pmatrix} = \tau_i \begin{pmatrix} \xi_{1i} \\ \xi_{2i} \end{pmatrix} \quad (i = 1, 2) \quad (11.86)$$

On choisit, pour simplifier les calculs, de fixer $\xi_{ii} = 1$ ($i = 1, 2$). La deuxième composante de chaque vecteur propre associé à une valeur propre de la matrice $\underline{\underline{B}}$ s'obtient à partir de (11.86) :

$$\xi_{21} = \frac{\tau_1 - A}{C} \left(= \frac{B}{\tau_1 - D} \right) \quad (11.87)$$

$$\xi_{12} = \frac{\tau_2 - D}{B} \left(= \frac{C}{\tau_2 - A} \right)$$

On peut désormais exploiter le processus de diagonalisation, succinctement présenté ci-dessus, dans la perspective de simplifier le système matriciel (10.75).

Si l'on multiplie chaque membre de l'équation (10.75) par le vecteur transposé $\underline{\xi}_i^T = (\xi_{1i}, \xi_{2i})$, on obtient le nouveau système matriciel

$$\underline{\xi}_i^T \dot{\underline{P}} = \underline{\xi}_i^T \underline{\underline{A}} \Delta \underline{P} \quad (11.88)$$

En remarquant que $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{B}}^T$ et en utilisant la propriété de transposition d'un produit de deux matrices $(\underline{\underline{X}} \underline{\underline{Y}})^T = \underline{\underline{Y}}^T \underline{\underline{X}}^T$, on a :

$$\underline{\xi}_i^T \dot{\underline{P}} = \tau_i \underline{\xi}_i^T \Delta \underline{P} \quad (11.89)$$

Finalement, en effectuant le changement de variable $\mu_i = \underline{\xi}_i^T \underline{P}$, on se ramène à la résolution de deux équations de diffusion de la forme :

$$\frac{\partial \mu_i}{\partial t} = \tau_i \Delta \mu_i \quad (i = 1, 2) \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \mu_1 = p^s + \xi_{21} p^e \\ \mu_2 = \xi_{12} p^s + p^e \end{cases} \quad (11.90)$$

Cinquième partie

APPLICATION À
L'ALCALI-RÉACTION DANS LES
BÉTONS

Chapitre 12

ORIGINE MICROSCOPIQUE DE L'ALCALI-RÉACTION

Sommaire

12.1 Introduction	293
12.2 Mécanismes de formation du gel	295
12.2.1 le mécanisme trans-solution	296
12.2.2 le mécanisme topochimique	297

Dans la pratique, on observe que le béton est un matériau largement concerné par le problème du gonflement. En effet, depuis maintenant une soixantaine d'années, le problème des réactions alcalis-granulats dans le béton a alimenté les discussions de la communauté scientifique du génie civil. Stanton [116] est le premier à avoir soulevé la question lorsqu'il parla de "expansion of concrete through reaction between cement and aggregate".

Pour mieux comprendre ce comportement gonflant du béton, de nombreux chercheurs ([38], [39], [27], [43], [44], [79]) ont orienté leurs travaux sur l'observation du phénomène à l'échelle des pores.

Le présent chapitre propose un résumé non-exhaustif des principales conclusions de ces travaux. On pourra se reporter aux travaux de Larive [79] et Peterson [103] pour une analyse bibliographique plus complète.

12.1 Introduction

Les réactions alcalis-granulats sont des phénomènes physico-chimiques internes au béton. Elles tiennent leur origine dans la combinaison de trois réactifs : les granulats, la pâte de ciment et la phase aqueuse interstitielle.

L'ensemble des auteurs s'accorde aujourd'hui à attribuer le phénomène à la combinaison de deux facteurs essentiels : la réactivité de la silice contenue dans les granulats et la teneur en alcalins de la pâte de ciment [79], pourvu que l'eau soit présente en quantité suffisante. L'hyperbasicité du milieu est alors un facteur déterminant de la réaction.

Longtemps, l'alcali-réaction a épargné les constructions en béton. Pour des raisons liées à la protection de l'environnement, la formulation des bétons a évolué depuis quelques dizaines d'années. La diversification des granulats utilisés dans la composition du béton et l'augmentation de la teneur en alcalins de la pâte de ciment ont ainsi contribué à la multiplication des risques. Pour fixer les idées, le coût des réparations ou destructions du patrimoine français touché par le phénomène d'alcali-réaction est estimé à près de 2 milliards de francs [80]!

Les ouvrages construits en béton répondent désormais à un cahier des charges définissant de façon très précise leur composition (granulat-ciment-eau) suivant le niveau d'exposition au risque. Dans les conditions idéales (forte humidité) au développement de l'alcali-réaction (barrages, ponts), il est désormais interdit d'utiliser des granulats réactifs.

Au delà de l'identification des réactifs, le scénario de la réaction est, quant à lui, très controversé. S'agissant notamment du site de formation du gel gonflant, deux principaux courants de pensée divisent la communauté scientifique.

Le premier définit les réactions alcalis-granulat comme des réactions topochimiques, c'est-à-dire que le gel gonflant se forme à l'interface pâte de ciment/granulat puis migre dans l'espace accessible, i.e. la porosité connectée aux sites de réaction. La mise en pression du gel, par production continue à l'interface pâte/granulat, est alors le moteur de cette migration.

Le second fait appel à la notion de mécanisme réactionnel trans-solution. Dans ce cas, le raisonnement s'appuie sur un processus de migration des réactifs nécessaires à la formation du gel gonflant des sites réactionnels (granulats) vers les zones "éloignées" de tout granulat. Le moteur de cette diffusion étant la différence de concentration entre les zones à forte concentration en silicates (granulats) et les zones qui en sont dépourvues. Le gel gonflant se forme alors par combinaison des réactifs dans un "environnement favorable". Il s'alimente alors par absorption d'eau.

Ce second raisonnement est avancé pour expliquer l'existence de produits d'alcali-réaction loin de tout granulat. Cependant, il n'y a pas d'incompatibilité entre cette réalité et l'hypothèse de réaction topochimique. En effet, pourquoi ne pas imaginer que la mise en pression du gel à l'intérieur de l'espace poreux accessible puisse entraîner ce gel loin des sites de réaction ?

Il reste bien sûr à identifier le moteur de la mise en pression du gel. Dans le cas du gonflement libre, il ne peut s'agir que de la production continue de gel à partir de la frontière des granulats. On est donc amené à se demander si la formation de gel inhibe la réaction ou si celle-ci se poursuit sans effet d'écran du gel déjà formé. Larive [79] a montré que la présence du gel déjà formé n'affecte pas le processus de formation du gel.

On a longtemps cru que le gel formé gonflait par absorption d'eau interstitielle. En fait, le rôle de l'eau est plus complexe. Il constitue, là encore, une divergence dans l'explication du phénomène à l'échelle microscopique entre les deux mécanismes précités. L'eau, on l'a vu, est l'un des trois composants nécessaires à la formation du gel. Dans la logique du mécanisme topochimique, pour que le gel se mette à gonfler, il faut maintenir la production de gel. Ainsi, un apport continu d'eau entraîne, si l'on suppose que les alcalins et la silice sont présents en quantité suffisante, la continuité du processus de formation du gel. A contrario, le mécanisme trans-solution est conditionné par la capacité du gel à absorber

effectivement de l'eau pour se mettre à gonfler.

Les pressions générées localement par le gel sont telles qu'elles provoquent, dans une très large majorité des cas, une microfissuration de la pâte de ciment. De fait, le gel est amené à se répandre dans deux familles principales de pores : les pores de la porosité “naturelle” du béton et les fissures. On articulera donc notre modélisation autour de ces deux familles de pores.

Il est important de noter que des fissures “naturelles” liées au phénomène de retrait peuvent être présentes initialement dans le béton. Pour simplifier notre propos, on ne distinguera pas l'origine des fissures. On fera simplement l'hypothèse qu'elles se localisent à l'interface pâte/granulat si bien qu'elles constitueront potentiellement un site de réaction.

Le phénomène d'alcali-réaction met en jeu deux cinétiques principales. La première est la cinétique de la réaction elle-même, qui dépend des réactifs, par l'intermédiaire de leur potentiel chimique, et de la température. La deuxième cinétique est directement liée à l'existence d'un processus diffusif des ions alcalins dans la porosité connectée.

On explique cette diffusion des alcalins par leur consommation locale au niveau des sites de réaction. L'uniformité initiale de leur distribution n'est alors plus vérifiée, c'est pourquoi ils diffusent des zones fortement concentrées vers les zones faiblement concentrées, *i.e.* les sites de réaction.

On comprend alors l'importance de la diffusion des alcalins dans la porosité connectée. Si ces derniers ne diffusent pas “suffisamment vite”, les sites de réaction ne sont pas alimentés de façon continue et la formation du gel est retardée. Toutefois, il a été démontré que les ions Ca^{2+} , largement présents dans l'espace poreux, peuvent se substituer aux alcalins lorsque ceux-ci viennent à manquer dans le processus de formation du gel. Ils permettent ainsi d'entretenir la réaction le temps qu'un nouveau “stock” d'alcalins se forme.

Dans la pratique, on trouve une autre contribution des ions Ca^{2+} à la réaction alcali-silice. De nombreuses études ont montré l'importance de la formation de cristaux d'ettringite couplée à l'alcali-réaction. La formation d'ettringite consomme du calcium et favorise la dissolution de la portlandite, composante de la pâte de ciment, qui libère un nouveau stock d'ions hydroxyles capable d'attaquer la silice réactive.

12.2 Mécanismes de formation du gel

La micromécanique comme on l'a vu dans les chapitres précédents propose un cadre théorique bien défini capable de relier les informations disponibles à une échelle inférieure, dite

microscopique, aux grandeurs directement observables, appelées encore grandeurs macroscopiques. La première étape, et non la moindre, avant de se lancer dans une modélisation micromécanique du phénomène de l'alcali-réaction consiste donc à clarifier l'origine de ce comportement gonflant du béton dont on sait qu'elle se situe à l'échelle microscopique. Cette démarche est d'autant plus délicate que la communauté scientifique concernée par le problème de l'alcali-réaction est divisée en deux familles de pensée concernant le mécanisme de formation du gel. Deux mécanismes sont invoqués : un mécanisme trans-solution et un mécanisme topochimique. Ces deux interprétations, à la base d'une éventuelle modélisation, se rejoignent malgré tout sur l'initiation du phénomène.

Dans un premier temps, l'hydratation de la pâte de ciment libère uniformément des ions hydroxyles (OH^-), des ions alcalins (Na^+ , mais surtout K^+), et des ions calcium Ca^{2+} en faible quantité dans la porosité "naturelle" du béton.

La seconde étape correspond à l'attaque des granulats réactifs, et plus précisément de la silice contenue dans ces granulats, ou à leur périphérie, par les ions OH^- pour finalement réagir avec les ions alcalins en solution : on parle de site de la réaction. On observe alors la formation d'une substance hydrophyle, appelée gel, capable de gonfler. Dans certaines conditions, elle peut conduire à une mise en traction et une microfissuration de la pâte de ciment.

Les deux principaux courants de pensée se divisent lorsqu'il s'agit de préciser la localisation de la formation du gel. Ces deux approches sont confortées par de nombreux résultats expérimentaux, et il est difficile à l'heure actuelle de savoir laquelle des deux est la plus représentative du comportement réel d'un béton atteint d'alcali-réaction.

12.2.1 le mécanisme trans-solution

Le premier mécanisme avancé pour expliquer la formation d'un gel gonflant au sein d'un béton s'appuie sur la migration des réactifs et leur combinaison aléatoire dans la porosité connectée. Ce mécanisme, basé sur les principes de Le Châtelier, porte à ce titre le nom de mécanisme trans-solution. De nombreux auteurs adhèrent à cette interprétation de la formation du gel gonflant. On cite en particulier les travaux de Dron et Brivot ([43], [44], [19]) qui présentent de façon détaillée les différentes étapes de ce mécanisme.

Le mécanisme trans-solution est contrôlé par la dissolution des granulats et la migration des produits de cette dissolution dans la solution interstitielle saturant l'espace poreux.

Au début, les réactifs (alcalins, silicates, hydroxyles) se combinent pour former un gel "transitoire" constitué de monomères non-gonflants et imperméables aux ions calcium, Ca^{2+} . Or, on sait que les gels gonflants observés expérimentalement par des méthodes

dites de coupure [79] contiennent des ions Ca^{2+} . C'est pour cette raison que l'on parle de gel "transitoire". En effet, les monomères ainsi formés sont très solubles dans l'eau. Ils vont donc se dissoudre au contact de l'eau interstitielle et former des produits sous forme ionique. On obtient alors, à proximité des granulats, des zones fortement concentrées en ces produits. Le déséquilibre entre les zones proche et éloignée des granulats est à l'origine du comportement diffusif des réactifs.

Finalement, après migration, les réactifs se combinent pourvu qu'il y ait des ions Ca^{2+} en quantité suffisante, pour former un gel calco-silico-alcalin gonflant par absorption d'eau du fait de sa forte insolubilité. La formation du gel consomme localement les réactifs si bien que le déséquilibre en concentration est maintenu. Il assure ainsi le gradient des espèces nécessaires à la formation du gel gonflant.

Il convient d'insister sur le rôle essentiel joué par les ions Ca^{2+} dans le mécanisme proposé ici. En effet, c'est parce qu'il y a d'abord formation d'un gel imperméable au calcium et soluble dans l'eau que le gel gonflant se forme de façon aléatoire dans l'espace poreux. En ce sens, ce sont les ions Ca^{2+} qui déterminent la localisation du gel. Cette interprétation s'appuie, de fait, sur l'existence d'un milieu à faible concentration en calcium. En effet, pourquoi les ions calcium ne pourraient-ils pas se combiner avec les réactifs au niveau des sites de réaction si ceux-ci sont présents en grande quantité dans l'espace poreux.

12.2.2 le mécanisme topochimique

Le mécanisme topochimique est le deuxième mécanisme invoqué pour expliquer la formation du gel gonflant dans le matériau béton. Contrairement au mécanisme précédent, les ions Ca^{2+} n'y jouent aucun rôle majeur. On limite leur fonction à celle d'un éventuel constituant du gel formé. En particulier, on n'impose nullement au gel de contenir du calcium. A partir de là, le gel gonflant est libre de se former à l'interface pâte/granat en consommant les alcalins, et éventuellement les ions Ca^{2+} , présents en grande quantité dans la solution interstitielle.

L'espace poreux connecté aux sites de la réaction se remplit alors de gel pourvu que celui-ci puisse se former de façon continue, *i.e.* si tous les "ingrédients" sont présents en quantité suffisante. On introduit alors le concept de pression de seuil contrôlant les rayons d'accès aux hydrates de la pâte cimentaire.

On verra que le concept de pression de seuil est susceptible de rendre compte d'au moins deux types de phénomènes. Dans le premier cas, la pression de seuil est analogue à une

barrière capillaire. C'est le rayon d'accès d'une famille de pores à une autre et les tensions superficielles des matériaux qui contrôlent sa valeur. Dans le deuxième cas, la pression de seuil rend compte d'un phénomène de fissuration de la phase solide, créant un vase d'expansion additionnel pour le gel.

De prime abord, les deux mécanismes invoqués pour expliquer la formation du gel dans l'espace poreux d'un béton ne semblent guère se rejoindre sur les points essentiels tels que le rôle de l'eau et des ions calcium Ca^{2+} . Toutefois, si l'on s'intéresse à l'état de déformation asymptotique d'un béton correspondant à un état de saturation totale de l'espace poreux par le gel, les deux mécanismes se rejoignent.

Chapitre 13

MODÉLISATION MICROMECHANIQUE DE L'ALCALI-RÉACTION

Sommaire

13.1 Modélisation du gonflement libre	301
13.1.1 pression de gel uniforme	302
13.1.2 pression de gel non uniforme	308
13.2 Modélisation du remplissage de la porosité connectée	316
13.2.1 cas d'une même morphologie de pores	318
13.2.2 cas de deux morphologies de pores	324
13.2.3 généralisation à n familles de pores de même morphologie	327
13.3 Conclusions	330

Le présent chapitre vise à modéliser le gonflement libre (pas de contrainte macroscopique) du béton en examinant le rôle joué par la morphologie de l'espace poreux saturé par le gel. Dans un premier temps, on présente deux situations extrêmes. On commence, tout d'abord, par traiter le cas où le gel occupe tout l'espace poreux disponible et se comporte alors comme un fluide à pression uniforme. On s'intéresse ensuite au cas où le gel est localisé dans une fraction de la porosité qui n'a pas accès à la porosité connectée.

Dans un second temps, on s'attache à la modélisation du phénomène de remplissage de l'espace poreux connecté aux sites de réaction, c'est-à-dire le domaine qui va servir de vase d'expansion au gel formé. On obtient dans ce cas un comportement intermédiaire entre les deux situations extrêmes précédentes. Deux approches sont alors possibles. La première est basée sur une représentation sphérique des pores de la porosité connectée aux sites de réaction. La deuxième considère deux géométries de pores. L'une ellipsoïdale, modélisant les fissures et l'autre sphérique, modélisant les pores de la porosité "naturelle".

Finalement, on généralise la méthodologie micromécanique développée dans le cas de deux familles à une infinité de familles de pores.

13.1 Modélisation du gonflement libre

Dans la littérature, on ne trouve que très peu de modélisations visant à relier quantitativement les informations relatives à l'échelle des sites de réaction et les observations macroscopiques du comportement gonflant du béton [79]. C'est le principal objectif de ce travail.

Nous considérons un volume élémentaire représentatif (v.e.r.) constitué d'une matrice solide et d'un espace poreux saturé par un fluide. La configuration initiale (resp. actuelle) du v.e.r. est représentée par Ω_o (resp. Ω). La fraction volumique de l'espace poreux par rapport au volume *initial* $|\Omega_o|$ représente la porosité lagrangienne ; elle est notée ϕ (resp. ϕ_o) dans la configuration actuelle (resp. initiale).

Dans un premier temps, on se place à l'échelle microscopique, c'est-à-dire l'échelle des sites de réaction. A cette échelle, on formule des hypothèses sur l'origine physico-chimique du phénomène. On suppose ici que le gonflement macroscopique, c'est-à-dire le gonflement observé à l'échelle de la structure, peut être attribué à la formation d'un gel qui remplit progressivement l'espace poreux connecté au site de la réaction. Lorsque ce volume est saturé par ce gel, la poursuite du processus de formation du gel entraîne une mise en pression de la porosité. Il est éventuellement nécessaire de définir une pression de seuil à partir de laquelle on constate une déformation de la matrice solide, observable macroscopiquement.

piquement sous la forme d'un gonflement.

A l'échelle des pores, les contraintes intérieures au gel sont modélisées par un tenseur des contraintes isotrope $-p^g \underline{\underline{\delta}}$. La loi de comportement du gel est définie par la relation $p^g(\rho^g)$ entre la pression du gel et la densité volumique de gel. En ce qui concerne la matrice solide, nous nous plaçons dans le cas d'un comportement élastique linéaire. $\mathbb{C}^s$ désigne le tenseur des modules élastiques de la matrice solide.

Une hypothèse forte de modélisation de notre approche consiste à considérer la masse de gel formée dans un v.e.r. comme une donnée du problème, fonction du temps, caractérisée par sa densité volumique $m^g(t)$. En d'autres termes, $m^g(t) \mid \Omega_o \mid$ représente la masse de gel contenue, à l'instant t , dans Ω . Nous ne chercherons pas à préciser les facteurs influant sur m^g .

L'objectif principal de notre modélisation est de relier la déformation macroscopique du v.e.r. due au gonflement du gel, notée $\underline{\underline{E}}^g$, à la donnée du problème m^g .

Si l'on suppose que le gel est uniformément réparti dans l'ensemble de la porosité connectée du v.e.r., on va voir qu'il est possible de relier linéairement la déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}^g$ et la densité volumique de gel m^g à partir des équations d'état macroscopiques de la poroélasticité linéaire telle qu'elle a été introduite par Biot.

Lorsque la pression de gel n'est pas uniforme, le problème est légèrement plus compliqué. Dans ce cas, l'approche précédente n'est plus possible et l'on aborde le problème à l'aide des outils de la micromécanique.

13.1.1 pression de gel uniforme

Si l'on suppose que le gel est réparti de façon uniforme dans l'espace poreux du v.e.r. (porosité initiale ϕ_o), l'idée consiste à définir le matériau béton soumis au gonflement comme un milieu poroélastique saturé par un fluide dont la pression de pore correspond à la pression du gel. Cette approche est cohérente avec le mécanisme trans-solution. Celui-ci, on l'a vu, considère que les produits de la réaction diffusent depuis les sites de réaction localisés aux interfaces granulats/solution interstitielle à travers la porosité connectée.

Ainsi, considérant un comportement élastique de la matrice solide, les équations d'état de la poroélasticité relient l'état de contrainte macroscopique $\underline{\underline{\Sigma}}$ et la pression de pore (pression du gel) à la déformation macroscopique associée $\underline{\underline{E}}$ et à la variation de porosité (lagrangienne) :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}} - p^g \underline{\underline{B}} \quad (13.1)$$

$$p^g = M(-\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{E}} + \phi - \phi_o) \quad (13.2)$$

$\mathbb{C}^{hom}$ et $\underline{\underline{B}}$ sont le tenseur d'élasticité drainé homogénéisé et le tenseur des coefficients de Biot respectivement. M est le module de Biot. Ces paramètres caractérisent le comportement poroélastique du v.e.r.. Nous avons vu qu'ils sont reliés entre eux par l'intermédiaire des propriétés élastiques de la matrice solide par (III.6.7) et (III.6.13). Dans le cas particulier de comportements isotropes de la matrice solide et du v.e.r., on utilise les relations (III.6.8) et (III.6.15).

Si l'on s'intéresse à la modélisation du gonflement libre du béton ($\underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{0}}$), la déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}$ est la déformation de gonflement $\underline{\underline{E}}^g$. Elle est déterminée en fonction de p^g à partir de la première équation d'état (13.1) et simplifiée en utilisant (III.6.7) :

$$\underline{\underline{E}}^g = p^g \mathbb{C}^{hom -1} : \underline{\underline{B}} = p^g ((\mathbb{C}^{hom})^{-1} - (\mathbb{C}^s)^{-1}) : \underline{\underline{\delta}} \quad (13.3)$$

si bien que, dans le cas isotrope, on aboutit à :

$$\underline{\underline{E}}^g = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{K^{hom}} - \frac{1}{K^s} \right) p^g \underline{\underline{\delta}} = \frac{b}{3 K^{hom}} p^g \underline{\underline{\delta}} \quad (13.4)$$

Dans l'hypothèse où la totalité de l'espace poreux connecté est saturée par le gel formé, la porosité connectée et la densité de gel sont reliées entre elles selon l'équation :

$$\phi = \frac{m^g}{\rho^g} \quad (13.5)$$

En introduisant (13.3) et (13.5) dans (13.2), on obtient la pression de gel en fonction de m^g :

$$p_g \left(\frac{1}{M} + \underline{\underline{B}} : \mathbb{C}^{hom -1} : \underline{\underline{B}} \right) = \frac{m^g}{\rho^g} - \phi_o \quad (13.6)$$

qui se met, dans le cas isotrope, sous la forme :

$$\frac{p^g}{K^s} \left(\frac{b}{1-b} - \phi_o \right) = \frac{m^g}{\rho^g} - \phi_o \quad (13.7)$$

cas d'un gel incompressible Dans le cas où le gel est un fluide incompressible ($K^g \rightarrow \infty$, $\rho^g(t) = \rho_o^g$), (13.6) fournit l'expression de la pression du gel p^g qui se développe dans

l'espace poreux connecté emprisonné dans un squelette déformable. En utilisant ce résultat dans (13.3), la déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}^g$ est reliée de façon linéaire à l'augmentation de la masse de gel sous forme adimensionnelle μ^g :

$$\rho^g(t) = \rho_o^g \leftrightarrow \underline{\underline{E}}^g = \mu^g \underline{\underline{T}} \quad \left\{ \begin{array}{l} \mu^g = \langle \frac{m^g}{\rho_o^g} - \phi_o \rangle_+ \\ \underline{\underline{T}} = \left[\frac{1}{M} + \underline{\underline{B}} : (\mathbb{C}^{hom})^{-1} : \underline{\underline{B}} \right]^{-1} [(\mathbb{C}^{hom})^{-1} - (\mathbb{C}^s)^{-1}] : \underline{\underline{\delta}} \end{array} \right. \quad (13.8)$$

où $\langle \cdot \rangle_+$ désigne la partie positive.

Ce résultat apporte une justification à l'hypothèse d'une relation linéaire entre μ^g et $\underline{\underline{E}}^g$, formulée dans divers modèles chemo-élastiques macroscopiques ([31], [74], [75], [79], [84]).

La richesse de l'approche micromécanique présentée ici réside précisément dans sa capacité à créer un lien entre l'information à l'échelle de la microstructure et le comportement observé à l'échelle macroscopique. Elle se concrétise par l'estimation du tenseur $\underline{\underline{T}}$, donnée en (13.8), que l'on appellera *tenseur des coefficients de gonflement chemo-élastiques*.

Dans le cas particulier d'un comportement isotrope, (13.4) et (13.8) se simplifient de la façon suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{E}}^g = \mu^g T \underline{\underline{\delta}} \\ p^g = \frac{3 K^{hom}}{b} T \mu^g \end{array} \right. \quad \text{avec} \quad T = \frac{1}{3} \frac{b}{b - \phi_o(1 - b)} \quad (13.9)$$

On remarque que le couplage chemo-élastique ne dépend que de la porosité initiale ϕ_o et du coefficient de Biot b , *i.e.* le rapport des modules de compression K^{hom}/K^s . Par exemple, pour un béton, il est d'usage de considérer les valeurs suivantes $b = 0.2 - 0.25$ et $\phi_o = 0.1$, pour lesquelles on obtient $\underline{\underline{E}}^g(t) \approx \frac{1}{2} \mu^g(t) \underline{\underline{\delta}}$. Si l'on se place dans le cas d'une matrice solide incompressible (*i.e.* $K^s \rightarrow \infty$, $b = 1$), le gonflement du matériau, prévu par le présent cadre d'hypothèses, dépend uniquement de la masse de gel formée :

$$\underline{\underline{E}}^g(t) = \frac{1}{3} \mu^g(t) \underline{\underline{\delta}} \quad (13.10)$$

Plus généralement, à partir de l'estimation classique de Hashin-Sthrikman de K^{hom} , on obtient en effet :

$$b = \phi \frac{1 + X^s}{\phi + X^s} \quad \text{avec} \quad X^s = \frac{4 \mu^s}{3 k^s} = 2 \frac{1 - 2 \nu^s}{1 + \nu^s} \quad (13.11)$$

dont on tire :

$$T = \frac{1}{3} \frac{1 + X^s}{1 + \phi X^s} \quad (13.12)$$

Pour les valeurs asymptotiques usuelles de la déformation volumique d'un béton atteint d'alcali-réaction $\text{tr} \underline{\underline{E}}^g(\infty) \approx 0.4\%$ [79], la modélisation proposée prédit une valeur de μ^g de l'ordre de $\mu^g(\infty) = \phi_\infty - \phi_o \approx 0.25\%$, où ϕ_∞ est la valeur asymptotique de la porosité connectée. De plus, (13.9) offre une estimation de l'intensité de la pression asymptotique du gel confiné dans une matrice élastique :

$$p^g(\infty) = K^{hom} \frac{\mu^g(\infty)}{b - \phi_o(1 - b)} \approx 400 \text{MPa} \quad (13.13)$$

De façon évidente, cette estimation de la pression est intimement liée aux hypothèses de matrice solide élastique et de gel incompressibles. Cependant, on retiendra qu'une faible variation de la porosité ($\phi_\infty - \phi_o \approx 0.25\%$) peut fissurer la matrice solide dans la mesure où l'ordre de grandeur des pressions de gel susceptibles d'être mobilisées dépasse largement les caractéristiques de résistance d'un béton traditionnel.

cas d'un gel compressible Dans le cas d'un gel compressible ($\rho^g(t) \neq \rho_o^g$), l'équation d'état spécifiant le comportement du gel relie la pression du gel et sa masse volumique : $p^g = p^g(\rho^g)$. En combinant cette relation avec (13.6) (resp. (13.3)), on obtient une relation non linéaire entre p_g (resp. $\underline{\underline{E}}^g$) et μ^g .

Dans le cas particulier où la pression du gel est reliée linéairement à la densité de gel sous la forme $p^g = K^g(\rho^g/\rho_o^g - 1)$, (13.6) s'écrit :

$$p^g \left(\frac{p^g}{K^g} + 1 \right) k + \phi_o p^g = K^g \mu^g \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \mu^g &= < \frac{m^g}{\rho_o^g} - \phi_o >_+ \\ k &= K^g \left(\frac{1}{M} + \underline{\underline{B}} : (\mathbb{C}^{hom})^{-1} : \underline{\underline{B}} \right) \end{cases} \quad (13.14)$$

dont la solution se met sous la forme :

$$p^g = \frac{K^g}{2} \left(\sqrt{\left(1 + \frac{\phi_o}{k}\right)^2 + 4 \frac{\mu^g}{k}} - \left(1 + \frac{\phi_o}{k}\right) \right) \quad (13.15)$$

Dans le cas isotrope, on exprime la déformation macroscopique en fonction de μ^g en combinant les relations (13.4) et (13.15) :

$$\underline{\underline{E}}^g = \frac{b K^g}{6 K^{hom}} \left(\sqrt{\left(1 + \frac{\phi_o}{k}\right)^2 + 4 \frac{\mu^g}{k}} - \left(1 + \frac{\phi_o}{k}\right) \right) \underline{\underline{\delta}} \quad (13.16)$$

Le coefficient k , introduit en (13.14), a maintenant l'expression suivante :

$$k = \frac{K^g}{K^s} \left(\frac{b}{1-b} - \phi_o \right) = \frac{K^g}{K^{hom}} [b - \phi_o(1-b)] \quad (13.17)$$

La figure 13.1 illustre l'effet du paramètre k sur la pression de gel. Les pressions normalisées p^g/K^g et p^g/K^{hom} y sont représentées pour une valeur donnée de $\mu^g = 0.25\%$ et pour des propriétés usuelles du béton ($b = 0.25$, $\phi_o = 0.1$).

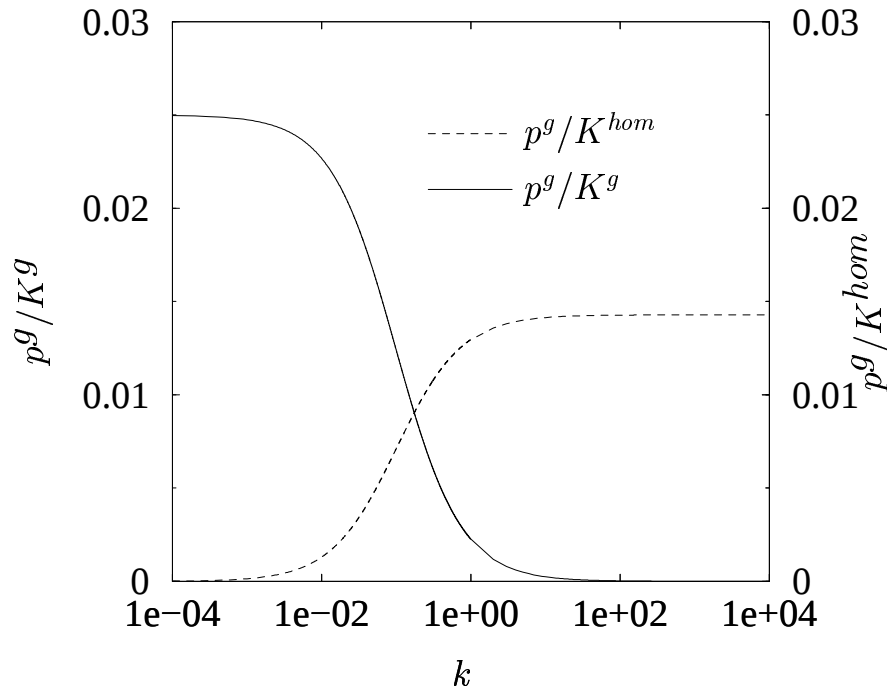


FIG. 13.1: influence de k ($\mu^g = 0.25\%$)

Dans le cas particulier d'un gel très compressible ($k \ll 1$), (13.15) s'écrit simplement :

$$p^g = K^g \frac{\mu^g}{\phi_o} \quad (13.18)$$

Comme dans le cas d'un gel incompressible, la déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}^g$ est alors une fonction linéaire de l'augmentation de masse de gel. Dans le cas isotrope, en combinant (13.4) et (13.18), on obtient :

$$\underline{\underline{E}}^g = \mu^g \underline{\underline{T}} \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{T}} = \frac{b}{3\phi_o} \frac{K^g}{K^{hom}} \underline{\underline{\delta}} \quad (13.19)$$

application

A titre d'illustration, on se donne une cinétique très simplifiée pour la formation du gel supposé ici incompressible (cf Fig.13.2). Pour $t < t_c$, le taux de formation est constant. Il est nul au-delà de t_c .

- Il existe une première phase (1) correspondant au remplissage de la porosité connectée aux sites de réaction, au cours de laquelle la pression de gel est nulle. Par conséquent, on n'observe aucune déformation à l'échelle macroscopique.
- Lorsque la porosité est saturée par le gel, la deuxième phase (2) commence. L'apport continu de gel met ce dernier en pression. Se limitant au comportement isotrope, (13.9) montre que la déformation macroscopique et la pression de gel sont toutes deux proportionnelles au volume de gel μ^g formé au delà de la phase de remplissage.
- Enfin, au delà de t_c (3), l'arrêt de la production de gel stoppe la mise en pression du gel et le processus de déformation macroscopique.

On constate que ce type d'approche est tout à fait compatible avec une courbe “en s” semblable à celles obtenues expérimentalement. S'agissant de la phase de remplissage, le démarrage progressif du processus de déformation peut s'expliquer par le fait qu'une fraction de la porosité connectée est susceptible d'être mise en pression avant saturation totale. La phase de développement est associée à la mise en pression du gel provoquée par la formation continue de gel. L'existence d'une asymptote pour la déformation macroscopique est ici directement liée à l'extinction de la formation du gel.

Manifestement, pour un scénario dans lequel le gel d'alcali-réaction se forme dans la totalité de l'espace poreux connecté du matériau “sain”, *i.e.* un gel de pression uniforme, le processus de gonflement est rigoureusement contrôlé par la cinétique de formation du gel.

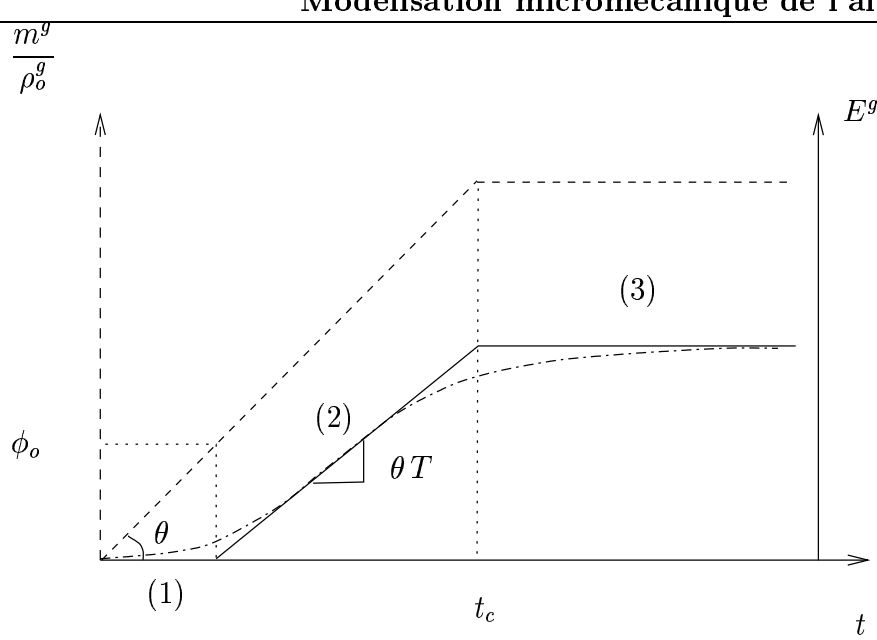


FIG. 13.2: évolution de la déformation macroscopique

13.1.2 pression de gel non uniforme

La section précédente est basée sur l'hypothèse que la totalité de l'espace poreux connecté est saturée par le gel formé et qu'il y règne une pression uniforme. Afin d'améliorer cette première approche, il peut être judicieux de distinguer deux domaines dans l'espace poreux connecté : le domaine "potentiellement remplissable" par le gel formé et son complémentaire dans l'espace poreux. On fait l'hypothèse qu'il n'existe pas, dans l'état initial, de connexion entre ces deux domaines.

On a montré dans la section précédente que la modélisation mécanique du gonflement dans le cas du mécanisme trans-solution pouvait être formulée dans le cadre de la poroélasticité linéaire classique. A l'inverse, l'introduction d'une distribution non uniforme de la pression de gel, est caractéristique du mécanisme topochimique, auquel est consacrée la présente section.

On se place dans la situation où les pores remplis de gel sont assimilés à des fissures¹ (ou microfissures) localisées principalement aux interfaces entre les granulats et la pâte de ciment. Contrairement à la section 13.1.1 dans laquelle la totalité de l'espace poreux du béton est saturée par le gel, nous supposons ici que le gel ne pénètre pas dans la porosité naturelle, *i.e.* remplit uniquement les fissures. Cette porosité de fissures peut donc être assimilée à une porosité occluse qui va être le siège d'une mise en pression.

¹modélisées comme des ellipsoïdes aplatis

Dans la perspective d'analyser l'effet de forme, on modélise les pores contenant le gel par des ellipsoïdes possédant une symétrie de révolution et dont le rapport d'aspect est un paramètre du modèle. On pourra ainsi discuter l'impact de l'aplatissement des pores, de la sphère à l'ellipsoïde infiniment aplati, sur le comportement d'un béton atteint par l'alcali-réaction. **L'ensemble de l'étude se place dans l'hypothèse de la validité du schéma dilué.**

Pour simplifier notre propos, nous négligeons la compressibilité du gel. Le cas d'une famille unique de fissures retiendra notre attention dans un premier temps. Nous étendrons ensuite notre propos à plusieurs familles de fissures d'orientation et de rapport d'aspect différents.

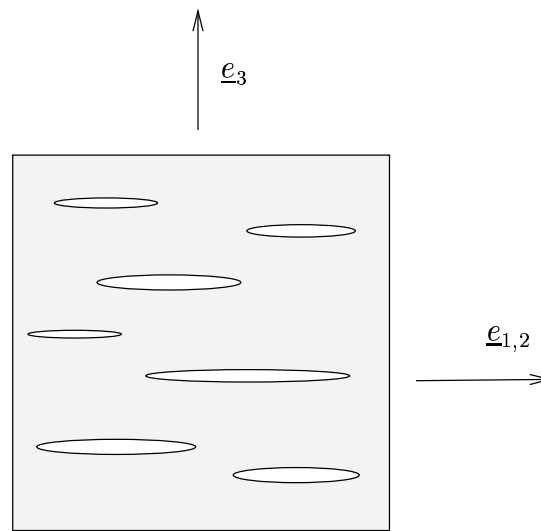


FIG. 13.3: orientation des fissures

cas d'une famille unique de fissures

Dans ce paragraphe, nous considérons que toutes les fissures ont le même rapport d'aspect $\omega_f = c/a$ où a est le rayon caractéristique d'une fissure dans le plan $\underline{e}_1/\underline{e}_2$ et $2c$ est l'ouverture de cette fissure dans la direction $\underline{e}_3$. Dans ce cas, le volume d'une fissure s'écrit $V_f = \frac{4}{3}\pi\omega_f a^3$. De plus, on suppose que ces fissures sont parallèles entre elles² (voir Figure 13.3).

²cette représentation de la fissuration idéalise une situation rencontrée dans certains essais de laboratoire [79]. En effet, au moment du coulage d'une éprouvette de béton dans le sens vertical ($\underline{e}_3$), l'eau peut se trouver piégée sous les granulats et privilégier ainsi la formation de produits d'alcali-réaction.

A la suite de Budiansky et O'Connell [21], on introduit le paramètre de densité de fissure $\epsilon = N a^3$ où N désigne la densité de fissures.

Dans le cas d'une famille composée d'une seule catégorie de fissures, la résolution du problème est très largement simplifiée dans la mesure où la pression de gel p^g est la même dans toutes les fissures. L'approche micromécanique du problème s'inspire directement des considérations de la section III.6.2.3. La famille de fissures joue le rôle du sous-domaine saturé Ω_{f_1} tandis que le reste de la porosité correspond au sous-domaine Ω_{f_2} . D'après (III.6.29) et (III.6.35), l'équation d'état en contrainte s'écrit :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}}^g - p^g \underline{\underline{B}}_f \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{B}}_f = \phi_f \underline{\underline{\delta}} : < \mathbb{A} >_f = \phi_f \underline{\underline{\delta}} : (\mathbb{I} - \mathbb{S}_f)^{-1} \quad (13.20)$$

On rappelle ici que l'on cherche à modéliser le gonflement libre du béton, *i.e.* le comportement gonflant d'un béton libre de contraintes ($\underline{\underline{\Sigma}} = \underline{\underline{0}}$). (13.20) s'écrit donc :

$$\mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}}^g = p^g \underline{\underline{B}}_f \quad (13.21)$$

On suppose à présent que la masse de gel est uniformément répartie dans toutes les fissures, ce qui conduit à une relation très simple entre la déformation volumique locale et la masse de gel formée, homologue de celle écrite en (13.5) :

$$\phi_f \text{tr} \underline{\underline{\varepsilon}}_f = \mu_f^g \quad \text{avec} \quad \mu_f^g = < \frac{m^g}{\rho_o^g} - \phi_{f,o} >_+ \quad (13.22)$$

Cette équation fixe la valeur de la déformation volumique dans les fissures. Pour fermer le problème, il reste à relier celle-ci à la pression de gel p^g et à la déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}^g$.

$\underline{\underline{\varepsilon}}_f$ représente, d'un point de vue physique, la déformation d'un ellipsoïde situé dans un v.e.r. soumis à une déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}^g$ à l'infini et saturé par un gel à la pression p^g . Elle peut donc être obtenue à partir du problème d'Eshelby :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_f = (\mathbb{I} - \mathbb{S}_f)^{-1} : (\underline{\underline{E}}^g + p^g \mathbb{P}_f : \underline{\underline{\delta}}) \quad \text{avec} \quad \mathbb{P}_f = \mathbb{S}_f : (\mathbb{C}^s)^{-1} \quad (13.23)$$

On observe que la déformation volumique de la fissure peut être obtenue en prenant la trace de (13.23) :

$$\phi_f \text{tr} \underline{\underline{\varepsilon}}_f = \underline{\underline{B}}_f : \underline{\underline{E}}^g + \frac{p^g}{M_f} \quad \text{avec} \quad \frac{1}{M_f} = (\underline{\underline{B}}_f - \phi_f \underline{\underline{\delta}}) : (\mathbb{C}^s)^{-1} : \underline{\underline{\delta}} \quad (13.24)$$

On obtient d'abord la valeur de p^g en éliminant $\underline{\underline{E}}^g$ entre (13.21) et (13.24), et en utilisant (13.22) :

$$p^g = \mu_f^g \left[\frac{1}{M_f} + \underline{\underline{B}}_f : (\mathbb{C}^{hom})^{-1} : \underline{\underline{B}}_f \right]^{-1} \quad (13.25)$$

Puis l'on reporte ce résultat dans (13.21) :

$$\underline{\underline{E}}^g = \mu_f^g \underline{\underline{T}}^f \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{T}}^f = \frac{(\mathbb{C}^{hom})^{-1} : \underline{\underline{B}}_f}{\frac{1}{M_f} + \underline{\underline{B}}_f : (\mathbb{C}^{hom})^{-1} : \underline{\underline{B}}_f} \quad (13.26)$$

Il est instructif de reformuler $\underline{\underline{T}}^f$ en valorisant davantage les hypothèses du schéma dilué. Plus précisément, en utilisant (III.6.38), il vient :

$$(\mathbb{C}^{hom})^{-1} : \underline{\underline{B}}_f = [(\mathbb{C}^{hom})^{-1} - (\mathbb{C}_o^{hom})^{-1}] : \underline{\underline{\delta}} \quad (13.27)$$

dont on tire :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{E}}^g = \mu_f^g \underline{\underline{T}}^f \\ \underline{\underline{T}}^f = \frac{[(\mathbb{C}^{hom})^{-1} - (\mathbb{C}_o^{hom})^{-1}] : \underline{\underline{\delta}}}{\frac{1}{M_f} + \underline{\underline{B}}_f : (\mathbb{C}^{hom})^{-1} : \underline{\underline{B}}_f} \end{array} \right. \quad \text{avec} \quad \mathbb{C}^{hom} = \mathbb{C}_o^{hom} : [\mathbb{I} - \phi_f (\mathbb{I} - \mathbb{S}_f)^{-1}] \quad (13.28)$$

On observe que l'on passe de $\underline{\underline{T}}$ dans (13.8) à $\underline{\underline{T}}^f$ dans (13.28) en remplaçant le tenseur $\mathbb{C}^s$ dans $\underline{\underline{T}}$ par $\mathbb{C}_o^{hom}$. Cette remarque indique que le gonflement dû aux fissures saturées de gel sous pression peut être abordé en les modélisant comme des inclusions dans le milieu homogène d'élasticité $\mathbb{C}_o^{hom}$ que nous avons baptisé antérieurement milieu poreux sain. Rappelons qu'il s'agit du milieu poreux constitué du même solide que le milieu réel, d'élasticité $\mathbb{C}^s$, dépourvu cependant de fissures, et de porosité ϕ_2 . En d'autres termes, nous sommes fondés à effectuer une homogénéisation préliminaire, destinée à remplacer le milieu poreux entourant les fissures par un milieu homogène équivalent jouant le rôle de matrice dans un milieu poreux fictif dont la porosité est constituée exclusivement des fissures.

En définitive, l'approche micromécanique (13.28) fournit une estimation du tenseur $\underline{\underline{T}}^f$ des couplages chemo-élastiques associé à un mécanisme topochimique se développant dans

une unique famille de fissures. Ce dernier dépend du tenseur des élasticités du milieu “sain” $\mathbb{C}_o^{hom}$ et à travers $\mathbb{S}_f$, du rapport d’aspect ω_f et de l’orientation des fissures.

commentaires

On examine, en premier lieu, l’effet des paramètres morphologiques sur le gonflement dans le cadre des hypothèses de la section 13.1.2. Soit $\underline{e}_3$, la direction normale aux fissures, le taux de déformation dans cette direction est obtenu à partir de (13.28) :

$$\dot{E}_{33}^g = T_{33}^f \dot{m}_g / \rho_o^g \quad (13.29)$$

La figure 13.4 représente le coefficient de gonflement T_{33}^f en fonction du rapport d’aspect ω_f et du paramètre de densité de fissure $\epsilon = N a^3$. On a considéré un comportement isotrope du matériau poreux “sain”. Dans ce cas, le tenseur $\mathbb{C}_o^{hom}$ n’affecte le coefficient T_{33}^f qu’à travers le coefficient de Poisson ν_o du milieu “sain”. Les résultats présentés à la figure 13.4 ont été obtenus pour $\nu_o = 0.3$.

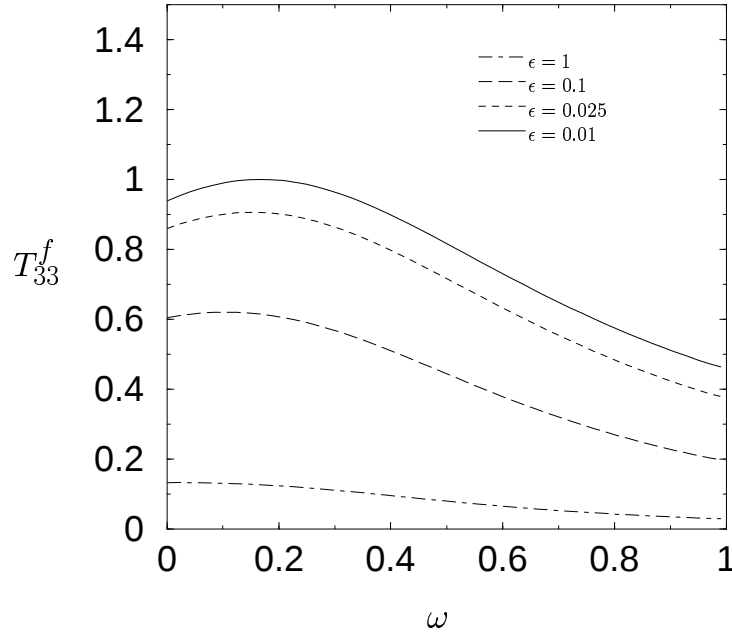


FIG. 13.4: $T_{33}^f = T_{33}^f(\omega_f, \epsilon)$ pour $\epsilon = 1, 0.1, 0.025, 0.01$

Dans la gamme des rapports d’aspect correspondants aux fissures ($\omega_f \ll 1$), on remarque que l’effet de forme est négligeable. Par conséquent, il est possible d’estimer le coefficient

de gonflement T_{33}^f par sa limite quand $\omega_f \rightarrow 0$. Celle-ci ne dépend que du coefficient de Poisson ν_o et du paramètre de densité de fissures ϵ :

$$\lim_{\omega_f \rightarrow 0} T_{33}^f = \frac{1}{1 + \epsilon \frac{16(1 - \nu_o)^2}{3(1 - 2\nu_o)}} \quad (13.30)$$

Ce résultat est le bienvenu car l'information sur les rapports d'aspect est difficile à obtenir !

La figure 13.4 montre également que le coefficient de gonflement est une fonction décroissante du paramètre de densité de fissure. Il n'en est pas nécessairement de même pour la déformation macroscopique puisque c'est le produit $T_{33}^f \dot{m}_g$ qui gouverne le taux de déformation de gonflement $\dot{E}_{33}^g$. Par exemple, en augmentant la densité N de fissures, on augmente ϵ , ce qui tend à diminuer la valeur de T_{33}^f . Mais le nombre de fissures étant associé aux sites de réaction, il est raisonnable de s'attendre à une augmentation de $\dot{m}_g$. Ainsi, l'effet du paramètre ϵ peut-il être contrebalancé par une augmentation de la production de gel. De façon symétrique, *pour une valeur donnée de $\dot{m}_g$* , le taux de déformation est une fonction décroissante de la densité de fissures N et du rayon de fissure a . On peut donc en conclure que la propagation d'une fissure, induite par la formation du gel et sa mise en pression, pour une densité de fissures donnée N constante réduit le taux de déformation de gonflement dans la mesure où le rayon de fissure a augmente.

Lorsque le rapport d'aspect augmente, on observe de la même façon une diminution du coefficient T_{33}^f . En fait, plus les fissures sont aplaties plus la surface, de normale suivant $\underline{e}_3$, sur laquelle la pression de gel s'exerce est grande, et plus l'anisotropie du gonflement est prononcée. Dans le cas contraire, plus les fissures sont circulaires³ plus le gonflement volumique macroscopique est "isotrope", l'isotropie correspondant au cas où $\omega_f = 1$, *i.e.* pour des pores sphériques de porosité $\phi_f = 4\pi\epsilon/3$.

On compare maintenant les résultats obtenus lorsque le gel sature la totalité de l'espace poreux connecté (section 13.1.1, mécanisme trans-solution) et ceux obtenus lorsque le gel ne remplit qu'une famille de fissures (section 13.1.2, mécanisme topo-chimique). Dans la suite, ces deux situations seront désignées par les lettres A et B respectivement.

Malgré la similitude entre les équations (13.8) et (13.28), deux différences importantes doivent être signalées.

Tout d'abord, il est instructif de comparer les taux de déformation dans la direction $\underline{e}_3$ pour le même taux de masse de gel. Les résultats (13.8) et (13.28) montrent que le rapport $\dot{E}_{33}^{gA} / \dot{E}_{33}^{gB}$ est égal à T_{33} / T_{33}^f . Il convient de rappeler que les grandeurs $\underline{T}$, M et $\underline{B}$

³on parle de fissures par extension dans la mesure où la forme circulaire est incompatible avec la dénomination de "fissure"

qui interviennent dans (13.8) sont définies sur l'espace poreux tout entier alors que dans (13.28), $\underline{T}_f^g$, M_f et $\underline{B}_f$ sont reliées à la famille de fissures considérée.

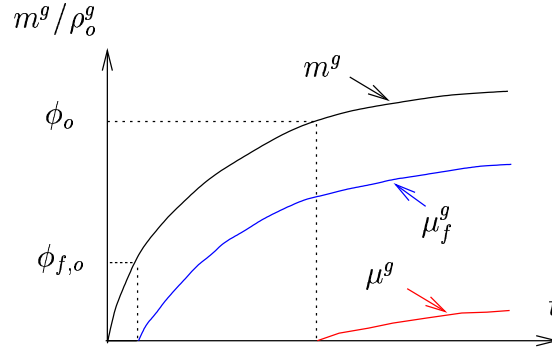


FIG. 13.5: influence de la porosité initiale

Pour une porosité ϕ_o de l'ordre de 10%, on trouve, d'après (13.11)-(13.12), $T_{33} = 0.5$. Pour des valeurs du paramètre de densité de fissures comprises entre 0.01 et 0.5, la figure 13.4 montre que le rapport des taux de déformation $T_{33}/T_{33}^f (= \dot{E}_{33}^{gA}/\dot{E}_{33}^{gB})$ est de l'ordre de 0.5-1. Ainsi, bien que les morphologies des domaines remplis par le gel, dans les cas *A* (mécanisme trans-solution associé à la porosité connecté) et *B* (mécanisme topochimique associé à la porosité de fissure), soient très différentes, en particulier la forme et la fraction volumique des vides, on s'aperçoit que, *pour un même taux de masse de gel*, les taux de déformation sont du même ordre de grandeur.

En d'autres termes, si l'on raisonne à présent sur le rapport des déformations $\dot{E}_{33}^{gA}/\dot{E}_{33}^{gB}$, l'analyse effectuée ci-dessus permet d'affirmer qu'il est de l'ordre du rapport des coefficients μ^{gA}/μ^{gB} . Or, pour une même fonction $m_g(t)$, la différence entre μ^{gA} et μ^{gB} réside d'après (13.8) et (13.22) dans les porosités initiales de l'espace rempli par le gel, respectivement égale à ϕ_o et $\phi_{f,o}$.

Précisément, la principale différence entre les cas *A* et *B* réside dans le fait que les fractions volumiques disponibles pour la libre expansion du gel, ϕ_o et $\phi_{f,o}$, ne sont pas du même ordre de grandeur. La porosité totale du matériau est de l'ordre de 5 – 10% alors que les valeurs usuelles de la porosité de fissures se situent bien en-deçà de 1%. Par conséquent, le temps de remplissage par le mécanisme trans-solution est 10 fois plus long que celui associé au mécanisme topochimique. D'après les équations (13.8) et (13.28), le gonflement débute lorsque le domaine susceptible d'être rempli par le gel est saturé par celui-ci, *i.e.* lorsque la masse de gel est égale à $m_g(t_o) = \rho_o^g \phi_o$ (cas A) ou $m_g(t_{f,o}) = \rho_o^g \phi_{f,o}$ (cas B). Aussi, la déformation de gonflement est contrôlée par la masse de gel produite à partir

de cet état de saturation, représentée par μ^g et μ_f^g dans (13.8) et (13.28) respectivement. Pour une même production de gel $m_g(t)$, on s'attend donc à ce que le gonflement se manifeste d'autant plus tôt ($t_o \gg t_{f,o}$) et soit d'autant plus important ($\mu^g(t) \ll \mu_f^g(t)$) que la porosité accessible au gel est limitée ($\phi_o \gg \phi_{f,o}$) (cf Fig.13.5).

cas de plusieurs familles de fissures

On propose ici une extension de la modélisation du mécanisme topo-chimique présentée au paragraphe précédent dans le cas d'une unique famille de fissures à la situation où le gel se forme dans plusieurs familles de fissures, modélisées par des familles d'ellipsoïdes d'orientation et de rapport d'aspect différents. On rappelle que les fissures considérées ici sont des objets “isolés” au sens où il n'existe aucune connexion entre elles ou avec la porosité connectée “naturelle” du matériau poreux. Pour cette raison, la pression du gel dépend *a priori* de la famille de fissures considérée. $\underline{\underline{\varepsilon}}_I$ et p_I^g désignent, dans la suite, la déformation locale et la pression du gel dans une fissure de la famille I .

De façon analogue à la section précédente, on développe une approche micromécanique permettant d'établir une relation entre la pression du gel p_I^g et la déformation $\underline{\underline{\varepsilon}}_I$ de la famille de fissures I , et la déformation macroscopique $\underline{\underline{E}}^g$. A partir du schéma dilué (interaction des fissures négligée), (13.23) se généralise immédiatement comme suit :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_I = (\mathbb{I} - \mathbb{S}_I)^{-1} : (\underline{\underline{E}}^g + p_I^g \mathbb{P}_I : \underline{\underline{\delta}}) \quad \text{avec} \quad \mathbb{P}_I = \mathbb{S}_I : (\mathbb{C}_o^{hom})^{-1} \quad (13.31)$$

où $\mathbb{S}_I$ est le tenseur d'Eshelby associé aux fissures de la famille I . En utilisant, une nouvelle fois, le théorème de Levin dans le cas où le matériau est libre de contraintes, (13.21) s'écrit maintenant :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = 0 \leftrightarrow \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}}^g = \sum_I p_I^g \underline{\underline{B}}_I \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{B}}_I = \phi_I \underline{\underline{\delta}} : (\mathbb{I} - \mathbb{S}_I)^{-1} \quad (13.32)$$

où $\phi_I = \frac{4}{3}\pi\omega_I N_I a_I^3$ est la porosité de la famille de fissures I , de densité N_I , de rapport d'aspect ω_I , et de rayon a_I . En négligeant les variations du rayon a_I d'une famille de fissures à l'autre, on peut considérer, en première approximation, que la porosité ϕ_I de la famille I est donnée par :

$$\phi_I = \frac{4}{3}\pi\omega_I \frac{N_I}{N} \epsilon \quad ; \quad \epsilon = N a^3 \quad (13.33)$$

où N est la densité de fissure, a est le rayon caractéristique des fissures et ϵ est le paramètre de densité de fissures.

Comme dans le paragraphe précédent, il est nécessaire d'exprimer une relation supplémentaire afin de fermer le problème défini par (13.31) et (13.32). La formation du gel étant essentiellement localisée à l'interface entre les granulats et la pâte de ciment, il est raisonnable de retenir une relation linéaire entre la masse de gel formée et la surface de cette interface. Dans ces conditions, la masse de gel formée est proportionnelle à la densité N_I de la famille considérée. On a donc $m_I^g = \frac{N_I}{N} m^g$. Cela revient à supposer que la masse de gel m_I^g/N_I formée par fissure de la famille I est identique d'une famille à l'autre, indépendamment de leur rapport d'aspect et de leur orientation. Ceci permet de relier la déformation $\underline{\underline{\epsilon}}_I$ dans une fissure de la famille I et la masse de gel formée m^g :

$$\omega_I (1 + tr \underline{\underline{\epsilon}}_I) = \frac{3}{4\pi\epsilon} \frac{m^g}{\rho_o^g} \quad \text{avec} \quad \epsilon = N a^3 \quad (13.34)$$

(13.31), (13.32) et (13.34) permettent théoriquement de déterminer la déformation macroscopique en fonction de la masse de gel produite. Ceci requiert bien sûr la description du rapport d'aspect et de l'orientation des fissures.

On notera toutefois que, d'après les résultats établis au paragraphe précédent, l'influence du rapport d'aspect des pores n'est pas significative pour une orientation donnée. On peut imaginer que ce résultat se généralise dans le cas d'ellipsoïdes orientés de façon arbitraire.

13.2 Modélisation du remplissage de la porosité connectée

On a présenté dans le paragraphe précédent les deux situations extrêmes du point de vue de la localisation du gel formé dans un matériau atteint d'alcali-réaction. On s'est intéressé (1) à la situation où la totalité de l'espace poreux connecté est envahi par le gel formé (mécanisme trans-solution) et (2) à celle où seules les fissures, principaux sites de réaction dans notre modélisation, se remplissent de gel sans avoir accès à la porosité naturelle de la pâte de ciment (mécanisme topo-chimique).

Dans la réalité, l'évolution du phénomène se situe vraisemblablement entre ces deux états

limites. L'idée consiste à supposer que le gel se forme initialement dans une première famille de pores, situés à l'interface entre la pâte de ciment et les granulats (mécanisme topochemique), puis que le gel envahit une deuxième famille de pores lorsque la pression de gel atteint une pression de seuil. Une fois ce seuil atteint, le gel va remplir les pores de la pâte de ciment de façon progressive, en passant d'une famille de pores à l'autre, pour finalement occuper la totalité de l'espace poreux des deux familles prises en considération. Ce type de mécanisme, d'inspiration topochemique, permet d'expliquer que l'on retrouve du gel dans la totalité de la porosité.

Deux situations sont examinées dans la suite. Dans le premier cas, les deux familles sont constituées de pores de même forme. Dans le second cas, on introduit une distinction morphologique entre les deux familles de pores : la première famille est constituée par des fissures de forme ellipsoïdale et la deuxième par des pores sphériques.

Pour simplifier, on suppose que les deux familles forment une partition de l'espace poreux disponible. On note $\phi_{1,o}$ la porosité initiale de la première famille. Il convient également de se donner la valeur de la pression de seuil p_s dont l'origine peut être liée à une barrière mécanique ou capillaire.

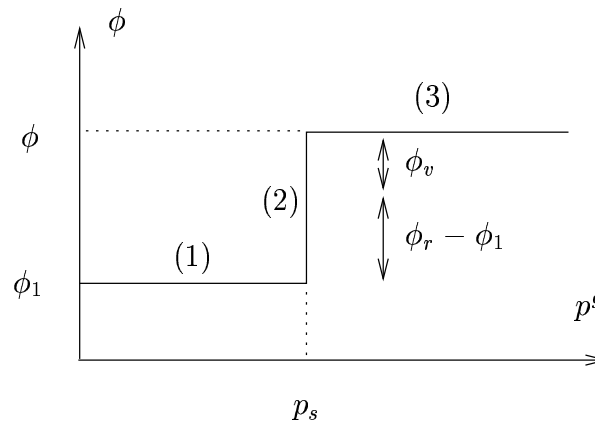


FIG. 13.6: mécanisme de remplissage de l'espace poreux (configuration relâchée)

Dans cette approche, l'introduction de deux familles de "pores" entraîne une décomposition du processus de remplissage de l'espace poreux en deux étapes délimitées par une pression de seuil (Fig. 13.6).

- Dans un premier temps (1), le gel remplit progressivement les pores de la première famille. Ce gel est mis en pression lorsque le volume de gel produit sature l'intégralité

de cette première famille de pores. Lorsque la pression du gel atteint la pression de seuil, l'accès à la deuxième porosité lui est ouvert.

- On suppose que le remplissage progressif de la deuxième famille de pores s'effectue à pression constante (2)⁴. A un instant donné, on note ϕ_r (resp. ϕ_v) la porosité déjà remplie (resp. encore vide).
- La troisième phase (3) correspond à la mise en pression de la porosité à présent entièrement saturée.

13.2.1 cas d'une même morphologie de pores

On cherche ici à définir le comportement “transitoire” d'un béton atteint d'alcali-réaction dans lequel le gel se forme dans deux familles de même morphologie, mais séparées par une barrière de pression, de fraction volumique respective ϕ_1 et ϕ_2 . En d'autres termes, on s'intéresse au remplissage de la totalité de l'espace poreux d'un béton en se limitant à deux tailles caractéristiques des pores : les micropores et les macropores. La première famille de pores, les macropores, peut être associée aux gros pores de la zone de transition (“Interface Transition Zone”) ([11], [61]) entre les granulats et la pâte de ciment, la deuxième rendant compte des micropores de la matrice cimentaire.

On fait l'hypothèse que le gel se forme d'abord dans les plus gros pores pour ensuite envahir les plus petits pores. Il est évident que la réalité physique ne se conforme pas strictement à cette hiérarchisation du réseau poreux. Toutefois, cette hypothèse constitue un premier perfectionnement pour dépasser les approches plus rustiques des sections 13.1.1 et 13.1.2.

$\phi_{1,o}$ désigne ici la fraction volumique initiale des pores de l'auréole de transition (“ITZ”). On admet que les gros pores se remplissent à pression de gel nulle. Il y a mise en pression des pores de cette première famille lorsque la porosité $\phi_{1,o}$ est saturée par le gel. Lorsque le gel atteint la pression de seuil p_s associée à la notion de rayon d'accès aux plus petits pores (barrière capillaire), il envahit les micropores. Ce remplissage s'effectue à pression constante. Une fois la deuxième famille de pores saturée par le gel, la pression p^g peut à nouveau augmenter. Ce scénario est illustré sur la figure 13.7. Notons que la pression de seuil peut également s'interpréter comme l'état de contrainte interne pour lequel la matrice cimentaire se fissure. Elle conduit alors à la création d'un espace poreux supplémentaire susceptible d'être rempli par le gel.

⁴il peut s'agir typiquement de la pression capillaire associée au rayon d'accès à la deuxième famille [50]

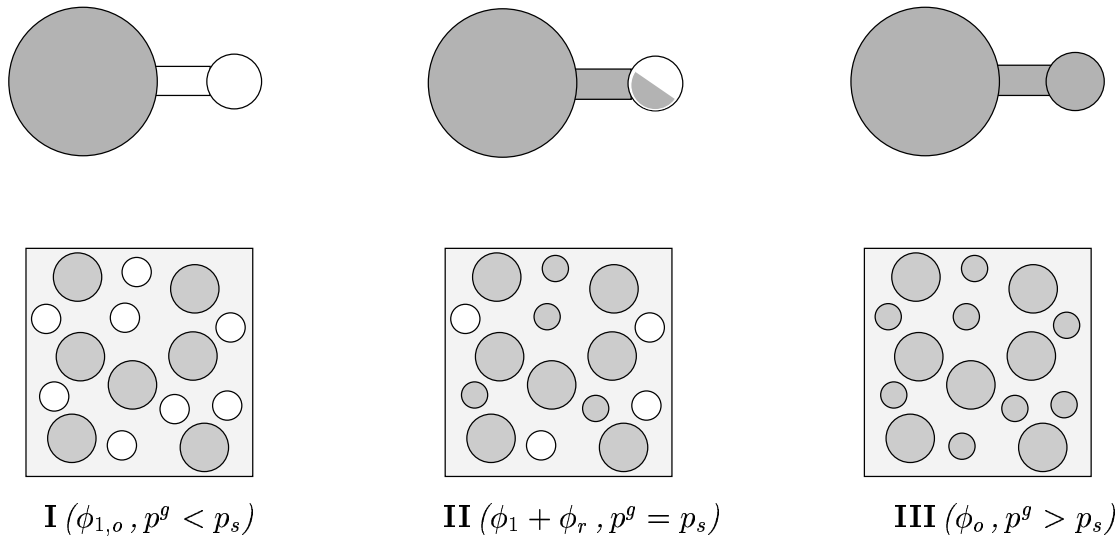


FIG. 13.7: schématisation du remplissage de l'espace poreux

Dans la suite, $\mathbb{C}^{hom}$ et $\underline{\underline{B}}$ désignent, comme à la section 13.1.1, le tenseur des modules d'élasticité et celui des coefficients de Biot pour le milieu poreux saturé dont la porosité est constituée des deux familles. On a donc :

$$\begin{cases} \mathbb{C}^{hom} = (1 - \phi) \mathbb{C}^s : \langle \mathbb{A} \rangle_s \\ \underline{\underline{B}} = \underline{\underline{\delta}} : [\mathbb{I} - (\mathbb{C}^s)^{-1} : \mathbb{C}^{hom}] \end{cases} \quad (13.35)$$

séquence I (mise en pression)

Une première façon d'aborder la modélisation de la séquence de mise en pression consiste à remarquer que les résultats obtenus à la section 13.1.2, pour une seule famille de fissures⁵ restent valables tant que la pression dans les fissures est inférieure à la pression de seuil. En effet, au cours de cette séquence, le mécanisme est topochimique et les équations du problème sont donc obtenues en transposant (13.21), (13.22), (13.23) et (13.24) :

$$\mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}}^g = p^g \underline{\underline{B}}_1 \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{B}}_1 = \phi_1 \underline{\underline{\delta}} : (\mathbb{I} - \mathbb{S})^{-1} \quad (13.36)$$

$$\phi_1 \text{tr} \underline{\underline{\varepsilon}}_1 = \mu_1^g \quad \text{avec} \quad \mu_1^g = \left\langle \frac{m^g}{\rho_o^g} - \phi_{1,o} \right\rangle_+ \quad (13.37)$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_1 = (\mathbb{I} - \mathbb{S})^{-1} : (\underline{\underline{E}}^g + p^g \mathbb{P} : \underline{\underline{\delta}}) \quad \text{avec} \quad \mathbb{P} = \mathbb{S} : (\mathbb{C}^s)^{-1} \quad (13.38)$$

dont on tire

$$\phi_1 \text{tr} \underline{\underline{\varepsilon}}_1 = \underline{\underline{B}}_1 : \underline{\underline{E}}^g + \frac{p^g}{M_1} \quad \text{avec} \quad \frac{1}{M_1} = (\underline{\underline{B}}_1 - \phi_1 \underline{\underline{\delta}}) : (\mathbb{C}^s)^{-1} : \underline{\underline{\delta}} \quad (13.39)$$

⁵en adoptant la valeur du rapport d'aspect judicieuse pour rendre compte de la forme des pores, par exemple $\omega_f = 1$ pour des pores sphériques

Dans (13.36), $\mathbb{C}^{hom}$ désigne l'élasticité du milieu de porosité $\phi = \phi_1 + \phi_2$ et $\mathbb{S}$ est le tenseur d'Eshelby relatif à la matrice solide (élasticité $\mathbb{C}^s$) et à la forme des pores (unique) des deux familles. Dans (13.37), μ_1^g représente la masse de gel, sous forme adimensionnelle, en excès par rapport à celle nécessaire à la saturation de l'espace poreux initialement accessible, *i.e.* $\phi_{1,o}$. Le tenseur des déformations macroscopiques est donné, en transposant (13.28), par la relation suivante :

$$\underline{\underline{E}}^g = \mu_1^g \underline{\underline{T}}^1 \quad \text{pour } 0 < p^g < p_s \quad (13.40)$$

$\underline{\underline{T}}^1$ représente le tenseur de couplage chemo-élastique associé à la porosité ϕ_1 dont l'expression, analogue à (13.28), est donnée par :

$$\underline{\underline{T}}^1 = \frac{[(\mathbb{C}^{hom})^{-1} - (\mathbb{C}_o^{hom})^{-1}] : \underline{\underline{\delta}}}{\frac{1}{M_1} + \underline{\underline{B}}_1 : (\mathbb{C}^{hom})^{-1} : \underline{\underline{B}}_1} \quad (13.41)$$

où $\mathbb{C}_o^{hom}$ est l'élasticité du milieu fictif constitué de la même matrice solide et de porosité ϕ_2 .

Une approche alternative consiste à retrouver ces résultats en valorisant ceux de la section III.6.2.3 concernant le comportement d'un milieu poreux non saturé dans le cas particulier où il existe une unique morphologie de pores. D'après (III.6.33), l'équation d'état en contrainte s'écrit :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}}^g - p^g \frac{\phi_1}{\phi} \underline{\underline{B}} \quad (13.42)$$

où $\underline{\underline{B}}$ est ici le tenseur des coefficients de Biot relatif à la totalité de l'espace poreux (de fraction volumique ϕ). En comparant avec la valeur de $\underline{\underline{B}}_1$ donnée en (13.36), on a donc :

$$\underline{\underline{B}} = \phi \underline{\underline{\delta}} : (\mathbb{I} - \mathbb{S})^{-1} = \frac{\phi}{\phi_1} \underline{\underline{B}}_1 \quad (13.43)$$

Dans le cas du gonflement libre, (13.42) s'écrit :

$$\mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}}^g = p^g \frac{\phi_1}{\phi} \underline{\underline{B}} \quad (13.44)$$

(13.43) qui repose clairement sur l'hypothèse d'une unique morphologie de pores assure la compatibilité de (13.36) et de (13.44), et par suite, celle des deux approches évoquées ci-dessus.

Dans le cas particulier de pores sphériques, on trouve les résultats suivants :

$$\underline{\underline{B}}_1 = b_1 \underline{\underline{\delta}} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} b_1 = b \frac{\phi_1}{\phi} \\ b = \phi \frac{1 + X^s}{X^s} \end{cases} \quad \text{avec} \quad X^s = 2 \frac{1 - 2\nu^s}{1 + \nu^s} \quad (13.45)$$

$$\underline{\underline{T}}^1 = T^1 \underline{\underline{\delta}} \quad \text{avec} \quad T^1 = \frac{1}{3} \frac{b_1}{b_1 - \phi_{1,o}(1 - b_1)} \quad (13.46)$$

Il en résulte les expressions suivantes de $\underline{\underline{E}}^g$ et p^g en fonction de μ_1^g :

$$\begin{cases} \underline{\underline{E}}^g = E^g \underline{\underline{\delta}} & \text{avec : } E^g = \frac{1}{3} \frac{b_1}{b_1 - \phi_{1,o}(1 - b_1)} \mu_1^g \\ p^g = \frac{K^{hom}}{b_1 - \phi_{1,o}(1 - b_1)} \mu_1^g \end{cases} \quad (13.47)$$

séquence II (invasion de la deuxième famille)

Lorsque le gel saturant les gros pores (de porosité ϕ_1), et dont la formation se poursuit de façon continue, atteint la pression de seuil $p^g = p_s$, il commence à remplir, à pression constante, le nouvel espace poreux accessible, de porosité ϕ_2 .

On déduit de (13.47) le volume de gel pour lequel le seuil $p^g = p_s$ est atteint :

$$\left(\frac{m^g}{\rho_o^g} \right)_s = \phi_{1,o} + \frac{p_s}{K^{hom}} [b_1 - \phi_{1,o}(1 - b_1)] \quad (13.48)$$

On note ϕ_r la fraction volumique de l'espace saturé par le gel. Au cours de cette séquence, on a donc $\phi_1 \leq \phi_r \leq \phi$. ϕ_r est une fonction du temps, évidemment reliée à la masse de gel formé par la relation :

$$\phi_r(t) = \frac{m^g(t)}{\rho_o^g} \quad (13.49)$$

Par ailleurs, la déformation macroscopique de gonflement est reliée à ϕ_r , d'après (III.6.33), par :

$$\mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}}^g = p^g \frac{\phi_r}{\phi} \underline{\underline{B}} \quad (13.50)$$

Il est instructif de comparer (13.44) et (13.50). Dans (13.44), la fraction volumique du

domaine saturé par le gel est ϕ_1 : c'est une constante. C'est donc l'évolution de la pression de gel qui est responsable du taux de déformation macroscopique. A l'inverse, dans (13.50), la pression étant constante, c'est l'évolution de la fraction volumique $\phi_r(t)$ du domaine saturé par le gel qui est la cause du taux de déformation macroscopique.

En rapprochant (13.49) et (13.50), on voit qu'il existe, au cours de cette deuxième séquence, une relation linéaire très simple entre déformation de gonflement et masse de gel formée. La forme isotrope de cette relation est :

$$\underline{\underline{E}}^g(t) = E^g(t)\underline{\underline{\delta}} \quad \text{avec} \quad E^g(t) = \frac{b}{3\phi} \frac{p_s}{K^{hom}} \frac{m^g(t)}{\rho_o^g} \quad (13.51)$$

application On fait à nouveau référence à une cinétique simplifiée (Fig. 13.8) et l'on cherche l'évolution correspondante de la déformation macroscopique. On se place dans l'hypothèse de pores sphériques.

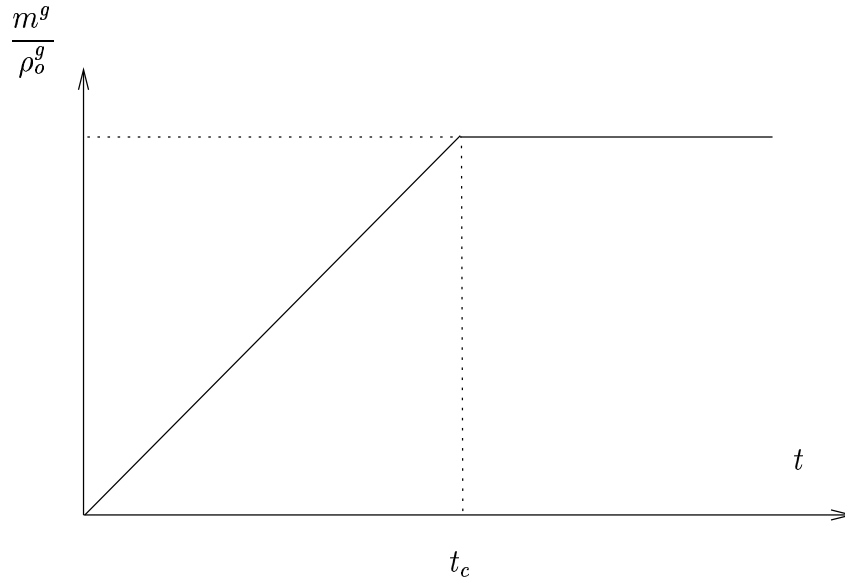


FIG. 13.8: cinétique simplifiée de formation du gel

On distingue alors 4 séquences :

- 0. $\frac{m^g}{\rho_o^g} \leq \phi_{1,o} : p^g = E^g = 0$
- I. $\phi_{1,o} \leq \frac{m^g}{\rho_o^g} \leq \left(\frac{m^g}{\rho_o^g}\right)_s : p^g$ et E^g sont donnés par (13.47).

Cette séquence débute à l'instant $t_i = \phi_{1,o} \frac{\rho_o^g}{\dot{m}^g}$.

II. $\left(\frac{m^g}{\rho_o^g}\right)_s \leq \frac{m^g}{\rho_o^g} \leq \frac{m_{max}^g}{\rho_o^g} : E^g$ est donné par (13.51) et $p^g = p_s$.

Cette séquence débute à l'instant t_s tel que $\frac{t_s}{t_i} = 1 + \frac{p_s}{K^{hom}} \frac{(b_1 - (1 - b_1) \phi_{1,o})}{\phi_{1,o}}$.

III. $m^g \geq m_{max}^g : \dot{E}^g = \dot{p}^g = 0$

On retrouve ces diverses séquences sur la figure 13.9.

Vis-à-vis de la figure 13.2, on retrouve l'existence de branches subhorizontales correspondant à la séquence de remplissage et à l'asymptote due à la cessation de la production de gel (équilibre chimique).

La nouveauté par rapport à la figure 13.2 réside dans l'apparition d'un changement de concavité lié à l'existence d'une pression de seuil et au remplissage de la deuxième famille de pores. Ce changement de concavité qui correspond à la séquence II est d'autant plus marqué (13.51) et survient d'autant plus tôt que la pression de seuil est basse.

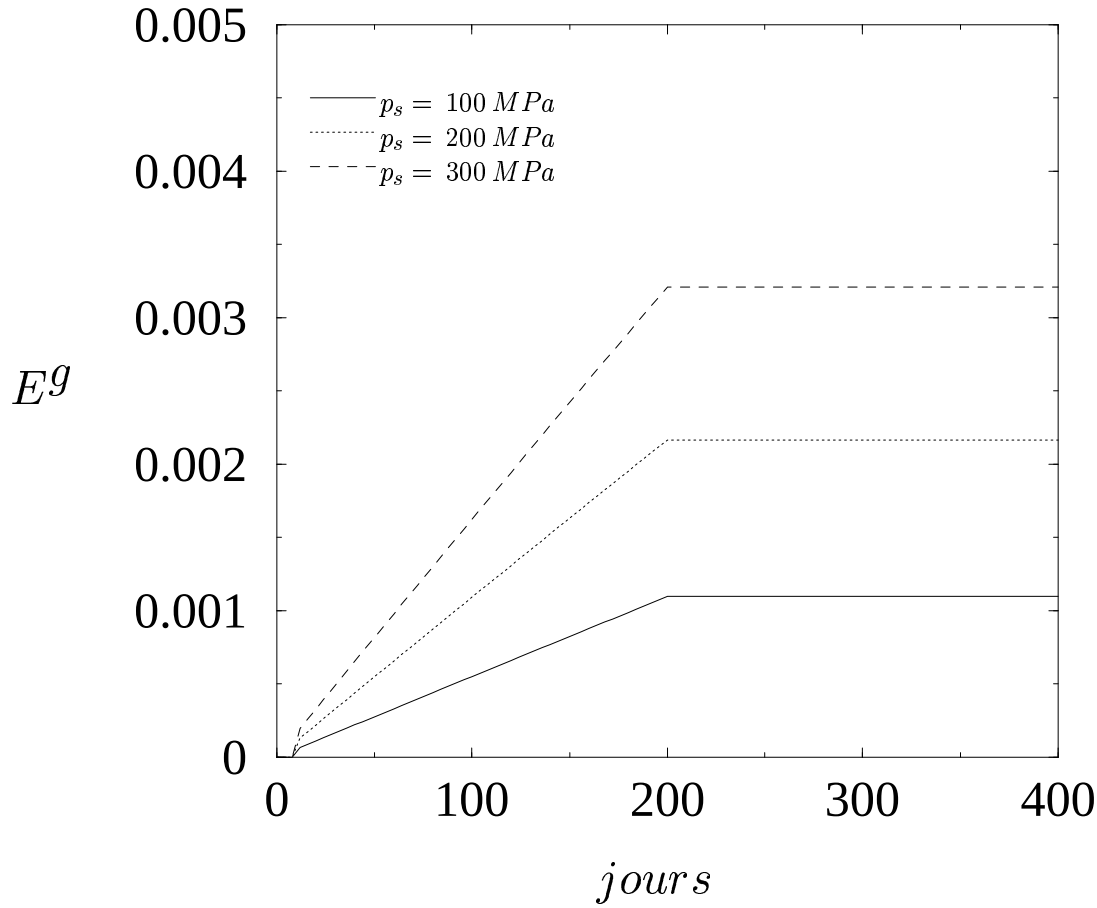


FIG. 13.9: évolution de la déformation macroscopique

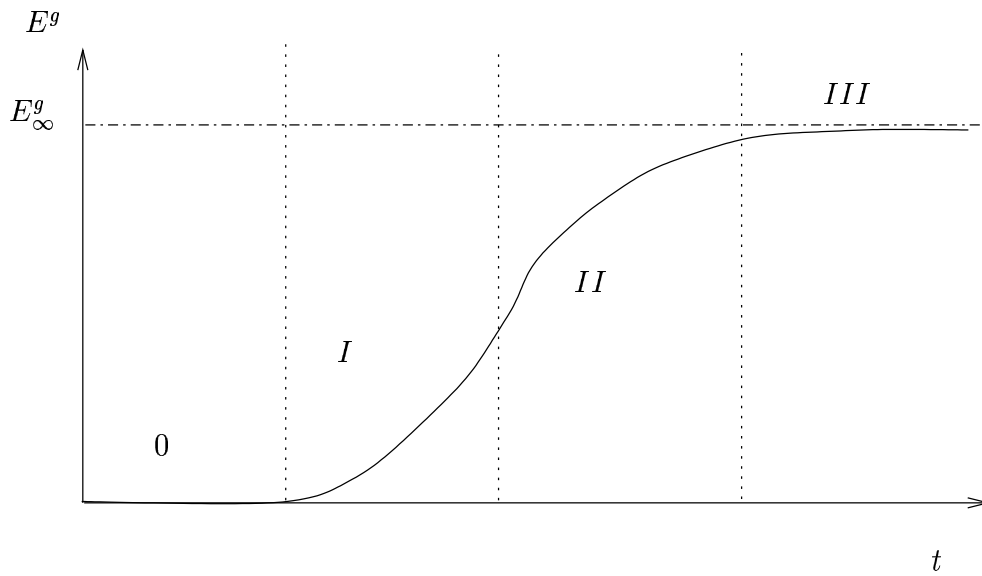


FIG. 13.10: les différentes séquences du comportement

13.2.2 cas de deux morphologies de pores

On se place, maintenant, dans la situation où l'on distingue morphologiquement deux familles de pores dans la pâte de ciment : les pores, supposés sphériques, de la porosité naturelle du béton et les fissures, modélisées par des ellipsoïdes. La porosité connectée du milieu poreux, ϕ est alors composée de la porosité du milieu poreux “sain”, ϕ_p , et de la porosité de fissures, ϕ_f . Elles vérifient, à chaque instant, la relation :

$$\phi = \phi_p + \phi_f \quad (13.52)$$

où ϕ peut se décomposer en une fraction remplie de gel, ϕ_r , et son complémentaire ϕ_v dans ϕ .

Dans le mécanisme de remplissage présenté au début du paragraphe, les fissures correspondent à la première famille de pores remplie par le gel et la porosité naturelle du béton représente la deuxième famille de pores.

En fait, le gel se forme d'abord dans une microporosité environnant les granulats et définissant l'interface pâte/granat. La liaison entre la pâte de ciment et le granulat se fait donc par l'intermédiaire d'une zone de plus faible cohésion et par conséquent de moindre résistance mécanique que la pâte de ciment. Aussi, on imagine aisément que la formation et la mise en pression du gel dans cette zone entraînent une première fissuration

dont la taille caractéristique est celle du granulat. On ne cherche pas ici à rendre compte de cet endommagement. On se place dans la situation où les fissures sont déjà formées et se remplissent de gel progressivement. Les fissures formées à l'interface pâte/granulat constituent donc la première famille de pores. Cette modélisation s'appuie sur les résultats expérimentaux de C. Larive [79] qui a observé une localisation de fissures à l'interface pâte/granulat sous les granulats.

Le comportement du béton lors du remplissage de la porosité de fissures est celui déterminé dans la section 13.1.2 tant que la pression du gel formé n'atteint pas la pression de seuil p_s . On a donc :

$$\underline{\underline{E}}^g = \mu_f^g \underline{\underline{T}}^f \quad \text{pour } p^g < p_s \quad (13.53)$$

où $\underline{\underline{T}}^f$, donné en (13.28), représente le coefficient de gonflement, sous forme tensorielle, associé à la porosité ϕ_f et μ_f^g est donné par :

$$\mu_f^g = \left\langle \frac{m^g}{\rho_o^g} - \phi_{f,o} \right\rangle_+ \quad (13.54)$$

On rappelle que, dans ces conditions, le tenseur des élasticités drainées macroscopique se met sous la forme :

$$\mathbb{C}^{hom} = \mathbb{C}^s : (\mathbb{I} - \phi_f \langle \mathbb{A} \rangle_f - \phi_p \langle \mathbb{A} \rangle_p) \quad (13.55)$$

où l'on a utilisé la condition de cohérence $\langle \mathbb{A} \rangle = \mathbb{I}$.

A partir de (13.35) et (13.55), on est en mesure d'écrire l'expression du tenseur des coefficients de Biot relatif à la totalité de l'espace poreux :

$$\underline{\underline{B}} = \phi_f \underline{\underline{\delta}} : \langle \mathbb{A} \rangle_f + \phi_p \underline{\underline{\delta}} : \langle \mathbb{A} \rangle_p \quad (13.56)$$

Par ailleurs, la précontrainte macroscopique est déterminée par la relation :

$$\underline{\underline{\Sigma}}^p = \langle \underline{\underline{\sigma}}^p : \mathbb{A} \rangle = -p_s \phi_f \underline{\underline{\delta}} : \langle \mathbb{A} \rangle_f - p_s (\phi_r - \phi_f) \underline{\underline{\delta}} : \langle \mathbb{A} \rangle_p \quad (13.57)$$

En tenant compte de (13.56) et (13.57), on aboutit finalement à l'expression de la précontrainte macroscopique sous la forme :

$$\underline{\underline{\Sigma}}^p = -p_s \frac{\phi_r - \phi_f}{\phi_p} \underline{\underline{B}} - p_s \frac{\phi_f \phi_v}{\phi_p} \underline{\underline{\delta}} : \langle \mathbb{A} \rangle_f \quad (13.58)$$

où l'on retrouve les résultats (13.1) dans le cas d'un poreux saturé à la pression p_s ($\phi_v = 0$) et (13.50) pour une localisation indépendante de la famille de pores ($\langle \mathbb{A} \rangle_f = \langle \mathbb{A} \rangle_p$).

On utilise alors la démarche systématique, utilisée dans le paragraphe précédent, qui consiste à relier p_s , $\underline{\underline{E}}^g$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}_r$ par le biais de la micromécanique.

En l'absence de contrainte macroscopique, la loi de comportement macroscopique conduit, d'après (13.58), à la relation suivante :

$$\mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}}^g = p_s \frac{\phi_r - \phi_f}{\phi_p} \underline{\underline{B}} + p_s \frac{\phi_f \phi_v}{\phi_p} \underline{\underline{\delta}} : \langle \mathbb{A} \rangle_f \quad (13.59)$$

où $\mathbb{C}^{hom}$ est donné en (13.55).

Une nouvelle fois, le schéma d'estimation dilué constitue un outil précieux pour relier les déformations locale et macroscopique. L'existence de deux familles de pores de géométrie différente conduit à une localisation différente selon que l'on se trouve dans un pore de forme sphérique ou dans un pore de forme ellipsoïdale.

Dans les fissures, de forme ellipsoïdale, la déformation locale $\underline{\underline{\varepsilon}}_f$ est donnée par :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_f = (\mathbb{I} - \mathbb{S}_f)^{-1} : (\underline{\underline{E}}^g + p_s \mathbb{P}_f : \underline{\underline{\delta}}) \quad \text{avec} \quad \mathbb{P}_f = \mathbb{S}_f : \mathbb{C}^{s-1} \quad (13.60)$$

Dans les pores de la porosité naturelle du béton, de forme sphérique, on obtient l'expression analogue pour $\underline{\underline{\varepsilon}}_r$:

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_r = (\mathbb{I} - \mathbb{S}_r)^{-1} : (\underline{\underline{E}}^g + p_s \mathbb{P}_r : \underline{\underline{\delta}}) \quad \text{avec} \quad \mathbb{P}_r = \mathbb{S}_r : \mathbb{C}^{s-1} \quad (13.61)$$

On aboutit finalement à l'extension du résultat (13.37) pour deux géométries de pores différentes :

$$\phi_f (1 + tr \underline{\underline{\varepsilon}}_f) + (\phi_r - \phi_f) (1 + tr \underline{\underline{\varepsilon}}_r) = \frac{m_g}{\rho_o^g} \quad (13.62)$$

où $\underline{\underline{\varepsilon}}_f$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}_r$ sont donnés en (13.60) et (13.61) respectivement.

13.2.3 généralisation à n familles de pores de même morphologie

Le paragraphe précédent s'est attaché à la modélisation du remplissage des pores connectés aux sites de réaction et de formation du gel silico-alkalin dans le cas simplifié de deux familles de pores. La généralisation de cette approche à n familles de pores est immédiate.

L'idée consiste à représenter l'espace poreux disponible au gel par une succession de familles de pores de rayon d'accès de plus en plus petit. Cela suppose bien évidemment que le gel se forme à proximité des plus gros pores. On peut penser que cette hypothèse est cohérente avec l'existence d'une "auréole de transition" à l'interface pâte/granulat (cf. section 13.2.1).

En effet, cette zone de transition est formée de pores dont la taille avoisine le micron ([11], [61]), c'est-à-dire au moins dix fois plus grande que les plus gros pores relatifs aux hydrates ($\sim 1000 \text{ \AA}$). On introduit alors pour n familles de pores ($n - 1$) pressions de seuil traduisant la mise en pression du gel nécessaire à son expansion dans l'espace poreux disponible. On aboutit alors à une représentation en escalier de la courbe *porosité accessible en fonction de la pression du gel* (cf figure 13.11).

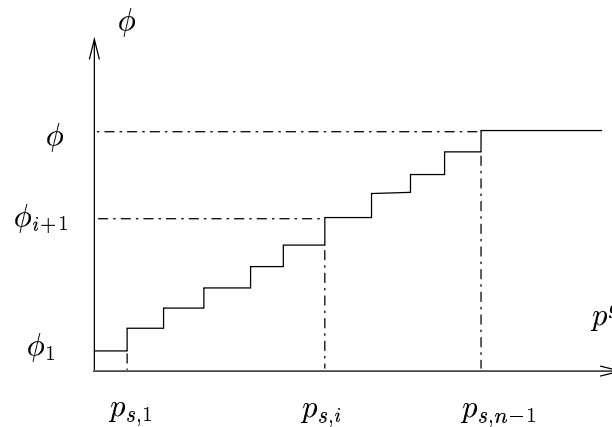


FIG. 13.11: schématisation du remplissage n familles de pores

De toute évidence, ce type de modélisation peut conduire à la détermination d'une courbe du type *porosimétrie au mercure* où le rôle du mercure serait tenu par le gel formé. Il est important de noter que l'expansion du gel dans les plus petits pores est susceptible d'engendrer des pressions internes très importantes capables d'endommager significativement les hydrates du béton et ainsi contribuer à la microfissuration de la pâte de ciment. On met ainsi en avant le caractère potentiellement destructif du principe de la porosimétrie

au mercure.

Sans nécessairement vouloir traquer l'effet de leur forme, dont on a montré qu'il n'était pas significatif dans le premier paragraphe, ces microfissures représentent alors un espace supplémentaire à l'expansion du gel. Dans ce cas, la formation continue de gel n'entraîne de gonflement du béton observable à l'échelle macroscopique qu'à partir du moment où ce nouvel espace poral est saturé par le gel [79].

Le raisonnement développé précédemment est maintenant adapté à l'existence d'une quantité n de familles de pores dont on rappelle qu'ils ont tous la même morphologie sphérique dans notre approche.

On montre que l'on aboutit aux mêmes relations à cette différence qu'elles sont à présent indicées par i . L'indice i , prenant toutes les valeurs de 1 à n , correspond à la famille de pores i , de porosité ϕ_i et à laquelle on associe une pression de seuil $p_{s,i}$.

Le comportement gonflant associé à la première famille de pores remplie est déterminé par la relation (13.40).

Lorsque le gel atteint une pression équivalente à la pression de seuil associée à la première famille de pores, il pénètre dans la deuxième famille. Le gel va ainsi s'introduire de proche en proche dans des pores de plus en plus petits et par la même mobiliser des pressions de seuil de plus en plus importantes.

Pour une famille donnée de taille de pores, nous allons à présent établir les relations nécessaires à la modélisation du gonflement dû à l'alcali-réaction.

Soit ϕ_i , la porosité associée à la famille i . De la même façon qu'au paragraphe 13.2.1, on introduit les variables ϕ_i^r et ϕ_i^v , respectivement la fraction de porosité de la famille i effectivement remplie par le gel et son complémentaire dans ϕ_i .

En se basant sur la démarche développée au paragraphe 13.2.1, on montre que la précontrainte macroscopique associée au processus de remplissage de la famille i est donnée par :

$$\underline{\underline{\Sigma}}_{(i)}^p = -p_{s,i-1} (\phi_{i-1} + \phi_i^r) \underline{\underline{\delta}} : < \mathbb{A} >_{(i)} \quad (13.63)$$

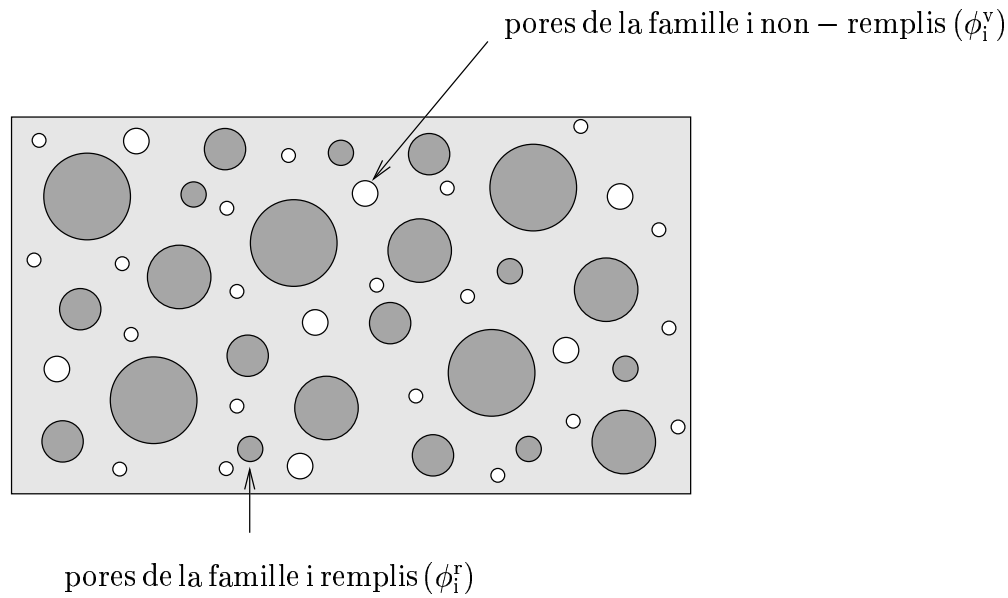


FIG. 13.12: remplissage de n familles de pores

A partir du tenseur des coefficients de Biot, on peut mettre la précontrainte macroscopique définie ci-dessus sous la forme :

$$\underline{\underline{\Sigma}}_{(i)}^p = -p_{s,i-1} \frac{\phi_{i-1} + \phi_i^r}{\phi} \underline{\underline{B}} \quad (13.64)$$

En l'absence de contrainte macroscopique, la loi de comportement macroscopique permet de relier la déformation macroscopique et la précontrainte macroscopique de la façon suivante :

$$\mathbb{C}^{hom} : \underline{\underline{E}}^g = p_{s,i-1} \frac{\phi_{i-1} + \phi_i^r}{\phi} \underline{\underline{B}} \quad (13.65)$$

Une nouvelle fois, les méthodes d'estimation fournissent le lien existant entre les déformations locales, les pressions locales et la déformation observée macroscopiquement.

Négligeant les éventuelles interactions entre les pores de la porosité connectée aux sites de réactions, on utilise le schéma d'estimation dilué et l'on obtient le résultat suivant :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_r^{(i)} = (\mathbb{I} - \mathbb{S}_r^{(i)})^{-1} : (\underline{\underline{E}}^g + p_{s,i-1} \mathbb{P}_r^{(i)} : \underline{\underline{\delta}}) \quad \text{avec} \quad \mathbb{P}_r^{(i)} = \mathbb{S}_r^{(i)} : \mathbb{C}^{s-1} \quad (13.66)$$

Finalement, en reliant la masse de gel formé et la déformation volumique locale, on aboutit à la dernière relation nécessaire à la détermination du comportement gonflant du béton :

$$(1 + tr \underline{\underline{\varepsilon}}_r^{(i)}) (\phi_{i-1,o} + \phi_{i,o}^r) = \frac{m_g}{\rho_o^g} \quad (13.67)$$

où $\phi_{i,o}^r$ désigne la fraction de porosité de la i -ème famille de pores remplie par le gel dans sa configuration relâchée.

Finalement, la combinaison de (13.65), (13.66) et (13.67) conduit à la détermination du comportement macroscopique d'un béton atteint d'alcali-réaction sous la forme d'une courbe d'évolution de la déformation en fonction du temps. La richesse de cette méthodologie, mais aussi sa difficulté, réside dans le fait qu'elle cherche à rendre compte de l'existence de différentes familles de pores séparées par des rayons d'accès contrôlant la mise en pression du gel dans la porosité connectée.

On ne présente pas ici de résultats quantitatifs. On pourra toutefois se reporter aux travaux de Sellier et Capra [50] et Capra et Bournazel [24], basés sur une approche probabiliste du remplissage des pores, et confronter les résultats obtenus par chacune de ces deux modélisations pour lesquelles l'interprétation du phénomène à l'échelle microscopique est analogue.

13.3 Conclusions

Depuis plusieurs années, l'alcali-réaction dans les bétons est au cœur des préoccupations des responsables du Génie Civil. Ce phénomène, qui prend naissance à l'échelle des pores dans le béton, se manifeste à l'échelle macroscopique, *i.e.* l'échelle observable, par un gonflement de la structure et l'apparition de fissures pouvant atteindre des dimensions métriques.

L'intérêt qu'a suscité cette pathologie du béton a permis de répondre à de nombreuses questions sur son origine. On est aujourd'hui capable d'atteindre le risque zéro pour la construction d'un ouvrage en béton. Cela requiert l'utilisation de constituants clairement identifiés dans l'élaboration du matériau béton utilisé. En particulier, pour les constructions sur sites potentiellement favorables au développement de l'alcali-réaction, *i.e.* à forte humidité (ponts, barrages), il est désormais interdit d'introduire des granulats réactifs dans la composition du béton. La limitation de la proportion d'alcalins dans la composition du ciment pourrait permettre d'aboutir au même résultat.

A l'heure actuelle, le véritable défi est celui de l'estimation de la durée de vie des ouvrages "malades" en service. Quelle est la durée de vie d'une structure en béton atteinte d'alcali-réaction à partir de l'instant où l'on observe les premières manifestations? La déformation de cette structure représentera-t-elle un risque pour l'homme? Peut-on en-

visager d'inhiber ce gonflement ? Ce sont autant de questions qui ont motivée notre travail.

Le développement de l'alcali-réaction, du point de vue du comportement mécanique, est composé essentiellement de trois phases : la cinétique d'attaque des granulats réactifs par les hydroxydes, la formation du gel et la déformation éventuelle de la structure. Du point de vue de l'ingénieur, l'objectif principal reste évidemment d'empêcher toute déformation macroscopique irréversible. L'effort de modélisation doit donc se porter sur les deux premières étapes du processus.

La première a fait l'objet de nombreux travaux qui font désormais référence ([91], [13]). Il s'agit de modéliser la diffusion des ions OH^- à l'intérieur des granulats afin d'obtenir la quantité de réactifs disponible pour la formation du gel. On évalue de la sorte la réactivité potentielle des granulats utilisés dans la composition du béton dont on a montré qu'elle était l'un des paramètres essentiels dans le développement de l'alcali-réaction.

Un autre point de vue consiste à se placer directement à l'échelle macroscopique, c'est-à-dire celle où l'on observe les manifestations du gonflement (fissuration). Dans ce cas, la démarche consiste à ignorer le détail du comportement microstructural en introduisant un paramètre capable de définir la capacité du matériau à former du gel. Cette approche a été développée par Ulm et al. [84] dans le cadre de la thermodynamique des milieux poreux. Les auteurs définissent un "degré d'avancement" de la réaction qui peut être interprété comme la vision macroscopique du processus décrit à l'échelle microscopique. La définition de ce nouveau paramètre permet alors une détermination quantitative des grandeurs macroscopiques définissant le comportement du matériau.

Néanmoins, par nature elles ne permettent pas de rendre compte de l'existence des propriétés et de la géométrie de la microstructure. Par conséquent, on n'est pas en mesure de discuter l'influence de ces caractéristiques sur le comportement macroscopique. C'est cette "insuffisance" qui a retenu notre attention.

Le cadre de travail proposé par la micromécanique pour traiter des problèmes de gonflement liés à la production et la mise en pression d'une substance dans toute ou fraction de l'espace poreux disponible, développé dans ce chapitre sur l'exemple de l'alcali-réaction dans les bétons, a permis d'établir des connexions rigoureuses entre les propriétés mécaniques, la morphologie de la microstructure et le gonflement du béton observé à l'échelle macroscopique.

Pour cela, on s'est placé dans la situation où la première étape du processus de formation du gel est supposée connue. La masse de gel formé par unité de volume, indéterminée et recherchée dans les modélisations précédentes, est désormais une donnée du problème. L'idée est alors de déterminer le comportement macroscopique en fonction de ce para-

mètre microscopique. Le lien entre ces deux échelles d'espace est naturellement défini par la microstructure, c'est-à-dire le comportement de la matrice solide et l'espace poreux accessible au gel.

En ce qui concerne la localisation du gel dans la porosité du matériau, deux situations ont été envisagées.

La première considère la totalité de l'espace poreux connecté. Supposant que le gel d'alcali-réaction se comporte comme un fluide, il joue alors un rôle analogue à celui de l'eau dans un poreux biphasique saturé classique. Par conséquent, son action mécanique est définie par une pression uniforme liée aux grandeurs macroscopiques par l'intermédiaire des équations d'état de la théorie classique de Biot. On a pu ainsi relier la pression du gel et la déformation macroscopique avec la masse de gel formé en prenant en compte la compressibilité de la matrice solide, la porosité initiale du milieu et la compressibilité du gel. On a mis en évidence une relation linéaire entre la déformation macroscopique et la masse de gel formé dans le cas d'un gel incompressible ou très compressible. La compressibilité du gel formé par les produits de la réaction joue un rôle significatif. Typiquement, pour des valeurs du module de compression du gel $K_g > 100$ GPa, le gel peut être considéré incompressible. C'est le cas par exemple des produits de la corrosion des armatures en acier dans les bétons armés qui se développent à l'interface béton-acier par réaction électrochimique. Inversement, la glace envahissant l'espace poreux du matériau cimentaire au cours de cycles de gel-dégel, connus pour leur action dévastatrice sur les structures en béton, doit être considérée comme une substance compressible, de module de compression K_g de l'ordre de 10 GPa. Actuellement, on ne dispose d'aucune information sur la compressibilité du gel d'alcali-réaction K_g .

Pour un nombre donné de sites de réaction, le gonflement macroscopique dû à la production de gel est d'autant plus faible que le matériau est fissuré. Dans la modélisation proposée ici, seules les fissures localisées à l'interface pâte de ciment/granulat sont considérées. La généralisation à un réseau de fissures qui se remplit progressivement en franchissant des paliers modélisés par des pressions de seuil est immédiate. Dans ce cas, la pression de seuil peut être identifiée à la valeur de la pression interne pour laquelle les fissures se propagent dans la matrice cimentaire. On trouve dans cette remarque une explication de l'anisotropie induite par l'état de contrainte macroscopique obtenue expérimentalement [79]. Ce problème de mécanique de la rupture va au delà du cadre de travail de la micromécanique développé dans ce chapitre.

A première vue, il est possible d'obtenir une courbe "en s" pour la déformation caractéristique du béton à l'échelle macroscopique en fonction du temps aussi bien dans l'hypothèse d'un mécanisme trans-solution (TS) (figure 13.2) que dans celle d'un mécanisme topocho-

mique (TP) avec ou sans pression de seuil (figure 13.9). Cette courbe est représentative du développement d'une réaction chimique dans un milieu poreux déformable. Elle est caractérisée par deux branches subhorizontales définissant les étapes initiale et finale du comportement gonflant du matériau béton. La première, relative à la phase initiale, est représentative du remplissage de la première famille de pores à pression nulle. La deuxième, relative à l'état final, est à rapprocher du phénomène d'équilibre chimique pour lequel la réaction s'arrête par épuisement d'un des réactifs.

Au delà de cette apparente similitude entre les courbes de gonflement obtenues, l'analyse micromécanique révèle des différences qui méritent d'être soulignées.

- La première concerne le temps caractéristique t_i , encore appelé *temps d'initiation*, défini comme la durée de la phase d'amorçage du processus de déformation. On a montré qu'elle correspond au temps nécessaire au remplissage du volume poreux (pores et/ou fissures) accessible aux produits de la réaction. Il est directement lié au volume initial susceptible d'être rempli avant que le matériau se déforme macroscopiquement. De fait, le rapport des temps d'initiation correspondant à chacun des mécanismes de formation du gel présentés $t_i^{(TS)}/t_i^{(TP)}$ est égal au rapport des volumes accessibles au gel dans ces deux cas.

- La seconde différence porte sur le temps caractéristique régissant le changement de concavité de la courbe "en s", représentative de l'évolution du comportement gonflant du matériau et directement liée au processus de remplissage. Dans le cas du mécanisme trans-solution, ce dernier est exclusivement lié à la cinétique de formation du gel. Il est donc de nature purement chimique. Il en est de même dans le cas d'un mécanisme topo-chimique sans pression de seuil. En revanche, dans le mécanisme topo-chimique avec pression de seuil, ce temps caractéristique est contrôlé par la valeur de la pression de seuil et par les propriétés micromécaniques du matériau envahi par le gel.

L'étude des temps caractéristiques, définissant la courbe d'évolution du gonflement macroscopique, à partir de la morphologie microstructurale et des propriétés micromécaniques du béton contribue à la compréhension de l'origine chemo-mécanique de la formation du gel gonflant. Elle permet, en outre, de privilégier un mécanisme de formation du gel (trans-solution, par exemple) ou l'autre (topo-chimique, par exemple). Dans le cas où la cinétique de formation du gel est une donnée du problème, les essais de laboratoire développés sur des bétons de rigidité et de résistance différentes devraient permettre de statuer sur le mécanisme effectivement mis en jeu dans le phénomène d'alcali-réaction. Il pourrait ainsi confirmer le scénario mixte, où mécanismes trans-solution et topo-chimique se combinent, envisagé à l'heure actuelle par certains auteurs. Cette compréhension est fondamentale pour optimiser la démarche prédictive et réduire les effets dévastateurs induits par le phé-

nomène d'alcali-réaction dans les structures en béton.

On rappelle ici que, pour donner à notre discussion la plus grande clarté possible, nous avons restreint notre analyse au cas de deux populations de pores, et à un processus de transition (d'une famille à l'autre) défini par une seule pression de seuil. De fait, le changement de concavité de la courbe de gonflement (voir figure 13.9) est très brutal. Manifestement, si l'on augmentait le nombre de familles de pores de morphologie identique, ou non, accessibles au gel par valeurs croissantes de pressions de seuil, on obtiendrait un profil de courbe plus progressif. La mise en pression permet de remplir la totalité de l'espace poreux dont le spectre s'étend des pores capillaires ($1\text{ }\mu\text{m}$) aux micropores (10-20 Å).

Sixième partie

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Nous avons présenté dans ce mémoire différentes contributions de la micromécanique à l'étude de la formulation des lois de transport et du couplage poromécanique dans les géomatériaux.

La démarche micromécanique vise à remonter à l'échelle macroscopique les informations disponibles à une échelle plus fine, dite microscopique. Chaque fois qu'il est possible de définir un volume élémentaire représentatif (v.e.r.), *i.e.* si la *séparation des échelles* est assurée, elle permet de déterminer un comportement macroscopique homogénéisé ou effectif à partir des données microscopiques.

L'homogénéisation des milieux périodiques constitue un outil d'analyse très performant pour l'identification de la structure des lois constitutives mais elle présuppose des informations morphologiques. Le présent mémoire est davantage orienté vers une vision aléatoire de la microstructure.

La première partie, consacrée à la problématique du transport, a permis de se familiariser avec les techniques d'homogénéisation des matériaux hétérogènes à structure aléatoire dans un contexte mathématique favorable, plus simple que celui du comportement mécanique. Parmi les perspectives, l'étude de l'influence de la microfissuration sur les propriétés de transport d'un géomatériau pourra être appliquée à la modélisation de la déplétion des réservoirs, au cours de laquelle la fermeture de certaines fissures est susceptible de modifier la perméabilité du massif rocheux.

La deuxième partie constitue la base de la modélisation micromécanique de la poroélasticité linéaire des géomatériaux. Elle propose en particulier des résultats largement exploités par les troisième et quatrième parties consacrées à l'étude du gonflement d'origine physico-chimique de géomatériaux naturels (argiles) et artificiels (bétons).

La troisième partie s'est intéressée au gonflement osmotique des argiles, et plus généralement des argilites. La démarche micromécanique a permis la décomposition de l'élasticité macroscopique en deux contributions respectivement de nature mécanique et physico-chimique. L'application aux essais de laboratoire développés par la société Total a constitué une validation très encourageante. Le bon accord entre résultats expérimentaux et théoriques permet d'envisager une étude similaire sur une géométrie axisymétrique simulant un puits de forage.

En ce qui concerne l'écriture du comportement macroscopique d'une argilite (section 9.2.4), il est important de remarquer que les résultats énoncés sont valables en dehors du cadre osmotique. En effet, le formalisme mis en place est indépendant de l'origine de la pression de gonflement. En particulier, il pourrait être adapté pour prendre en compte

une pression liée au phénomène d'hydratation présenté au Chapitre 7.

La dernière partie s'est attachée à étudier le phénomène d'alcali-réaction et ses conséquences sur le comportement macroscopique d'un béton. La présence d'un gel d'alcali-réaction loin des sites de réaction est classiquement expliquée par un mécanisme trans-solution de la formation du gel. Sur la base d'un raisonnement mécanique, on montre comment un mécanisme topo-chimique est capable d'expliquer la présence d'un gel "loin" des sites, en introduisant un mécanisme de propagation purement mécanique du gel lorsqu'un seuil de pression de gel assimilable à une barrière capillaire est atteint. L'accent a été mis sur le rôle de la morphologie et de la fraction volumique du domaine envahi par le gel.

Une première extension possible consisterait à introduire une non-linéarité du comportement de la phase solide dans la perspective d'inclure dans le modèle la microfissuration induite par la pression de gel.

L'influence d'une contrainte macroscopique sur le comportement gonflant d'un béton constitue une autre voie importante de recherche. Des données expérimentales indiquent que l'application d'une contrainte de compression inhibe le gonflement dans la direction de compression et favorise le gonflement dans les directions perpendiculaires. Les travaux consacrés à l'étude micromécanique de la propagation des fissures [55] détiennent probablement la clé de la modélisation de ce phénomène.

Bibliographie

- [1] A. Anandarajah and N. Lu. Numerical study of the electrical double-layer repulsion between non-parallel clay particles of finite length. *Int. J. for Num. and Analyt. Methods in Geomech.*, 15 :683–703, 1991.
- [2] P.W. Atkins. *Physical Chemistry*. Oxford University Press, 1990.
- [3] J.L. Auriault. *Comportement des milieux poreux saturés*. Manuel de rhéologie des géomatériaux, Presses de l'Ecole nationale des ponts et chaussées, 1987.
- [4] J.L. Auriault and J. Lewandowska. Homogenization analysis of diffusion and adsorption macrotransport in porous media : macrotransport in the absence of advection. *Geotechnique*, 43(3) :457–469, 1993.
- [5] J.L. Auriault and J. Lewandowska. On the cross-effects of coupled macroscopic transport equations in porous media. *Transport in Porous Media*, 16 :31–52, 1994.
- [6] J.L. Auriault and J. Lewandowska. Diffusion/adsorption/advection macrotransport in soils. *Eur. J. Mech. A./Solids*, 15(4) :681–704, 1996.
- [7] J.L. Auriault and J. Lewandowska. Effective diffusion coefficient : from homogenization to experiment. *Transport in Porous Media*, 27 :205–223, 1997.
- [8] J.L. Auriault and J. Lewandowska. Modelling of pollutant migration in porous media with interfacial transfer : local equilibrium/non equilibrium. *Mechanics of cohesive frictional materials*, 2 :205–221, 1997.
- [9] S.L. Barbour. *Osmotic flow and volume change in clay soils*. PhD thesis, University of Saskatchewan, Saskatoon, Saskatchewan, Canada, 1986.
- [10] S.L. Barbour and D.G. Fredlund. Mechanisms of osmotic flow and volume change in clay soils. *Canadian Geotech. Journal*, 26 :551–562, 1989.
- [11] V. Baroghel-Bouny. *Caractérisation des pâtes de ciment. Méthodes, analyse, interprétation*. PhD thesis, École nationale des ponts et chaussées, 1994.
- [12] T. Strzelecki J. Bauer and J.L. Auriault. Constitutive equation of a gas-filled two-phase medium. *Transport in Porous Media*, 10 :197–202, 1993.
- [13] Z.P. Bazant and A. Steffens. Mathematical model for kinetics of alkali-silica reaction in concrete. *Cement and Concrete Research*, 30(3) :419–428, 2000.

- [14] J. Bear and Y. Bachmat. *Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media*. Kluwer Academic Publishers, 1990.
- [15] M.A. Biot. General theory of three-dimensional consolidation. *J. of Appl. Phys.*, 12 :155–164, 1941.
- [16] M.A. Biot. Theory of elasticity and consolidation for a porous anisotropic solid. *J. of Appl. Phys.*, 26 :182–185, 1955.
- [17] M.A. Biot. Variational Lagrangian-thermodynamics of non isothermal finite strain. Mechanics of porous solid and thermomolecular diffusion. *Int. J. Solids and Struct.*, 13 :579–597, 1977.
- [18] G.H. Bolt. Physico-chemical analysis of the compressibility of pure clays. *Geotechnique*, 6(2) :86–93, 1956.
- [19] R. Dron F. Brivot and T. Chaussadent. Mechanism of the alkali-silica reaction. *Proceedings of the 10th Int. Congress on the Chemist. of Cement*, 1997.
- [20] K. Brodersen and K. Nilsson. Pores and cracks in cemented waste and concrete. *Cement and Concrete Research*, 22 :405–417, 1992.
- [21] B. Budiansky and R.J. O'Connell. Elastic moduli of a cracked solid. *Int. J. Solids Structures*, 12 :81–97, 1976.
- [22] H.D. Bui. *Mécanique de la rupture fragile*. Masson, 1978.
- [23] H. Cammoun. Étude des interactions physico-chimiques entre les boues de forage et les argiles. *Rapport de stage, Ecole Cent. Paris-DEA MSOE*, 1999.
- [24] B. Capra and J.P. Bournazel. Modeling of induced mechanical effects of alkali-aggregate reactions. *Cement and Concrete Research*, 28(2) :251–260, 1998.
- [25] C. Tognazzi J-M. Torrenti M. Carcasses and J.P. Ollivier. Coupling between diffusivity and cracks in cement-based systems. *Concrete Science Engineering - submitted*, 2000.
- [26] P.A. Charlez and S. Roatesi. A fully analytical solution of the wellbore stability problem under undrained conditions using a linearized Cam-Clay model. *Oil & Gas Science and Technology*, 54(5) :551–563, 1999.
- [27] S. Chatterji and P. Christensen. Studies of alkali-silica reaction. Part7. Modelling of expansion. *Cement and Concrete Research*, 20 :285–290, 1990.
- [28] M.P. Cleary I-W. Chen and S-M. Lee. Self-consistent techniques for heterogeneous media. *Journal of the Engineering Mechanics Division*, 106(5), October 1980.
- [29] J. Cook. The effects of pore pressure on the mechanical and physical properties of shales. *Oil & Gas Science and Technology, Rev. IFP*, 54(6) :695–701, 1999.

- [30] L. Dormieux P. Barboux O. Coussy and P. Dangla. A macroscopic model of the swelling phenomenon of a saturated clay. *Eur. J. Mech. A/Solids*, 14(6) :981–1004, 1995.
- [31] O. Coussy. *Mécanique des milieux poreux*. Éditions Technip, Paris, 1991.
- [32] R.H. Coutier. The assessment of ASR-affected structures. *Cement and Concrete Composites*, 12 :191–201, 1990.
- [33] J.F. Daian. Prévission des paramètres de transfert à partir de la structure de l'espace poreux. Confrontation modèles/expériences. *Actes du Séminaire "transferts 2000"*, avril 2000.
- [34] G.M. Boi S-W. Wong C.J. Davidson and D.C. Woddland. Borehole stability in shales. *Europ. Petroleum Conf. in Cannes - Soc. of Petr. Engin.*, 1992.
- [35] S.R. de Groot and P. Mazur. *Non-equilibrium thermodynamics*. North Holland Publishing Company, 1962.
- [36] V. de Laleu. Conséquences de la réaction alcali-granulats sur les barrages exploités par EDF. *Revue française de génie civil*, 4(4) :577–589, 2000.
- [37] G. de Marsily. *Hydrogéologie quantitative*. Masson, Paris, 1994.
- [38] L.S. Dent-Glasser. Osmotic pressure and the swelling of gels. *Cement and Concrete Research*, 9 :512–517, 1979.
- [39] L.S. Dent-Glasser and N. Kataoka. The chemistry of Alkali-Aggregate reaction. *Cement and Concrete Research*, 11 :1–9, 1981.
- [40] L. Dormieux. *Apport des méthodes de changement d'échelle à la résolution de quelques problèmes de mécanique des milieux poreux*. Actes du Séminaire Descartes. Presses des Ponts, 1999.
- [41] L. Dormieux and E. Lemarchand. A homogenization approach of advection and diffusion in cracked porous material - Accepté pour publication. *Journal of Engineering Mechanics*, 2001.
- [42] O. Coussy P. Dangla L. Dormieux and E. Lemarchand. A two-scale modelling of a swelling clay. *Journal de Physique IV*, 55(9) :9–21, 1999.
- [43] R. Dron and F. Brivot. Thermodynamic and kinetic approach to the alkali-silica reaction. Part 1 : Concepts. *Cement and Concrete Research*, 22 :941–948, 1992.
- [44] R. Dron and F. Brivot. Thermodynamic and kinetic approach to the alkali-silica reaction. Part 2 : Experiments. *Cement and Concrete Research*, 23 :93–103, 1992.
- [45] F.A.L. Dullien. *Porous Media, Fluid Transport and Pore Structure*. Academic Press, 1992.

- [46] H. Bensmina E. Canon and P. Valentin. On the modelling of generalized Taylor-Aris dispersion in chromatographs via multiple scales expansions. *Transport in Porous Media*, 36 :307–339, 1999.
- [47] J.D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. Roy. Soc. London*, A241 :235–251, 1957.
- [48] J.D. Eshelby. Elastic inclusion and inhomogeneities. *Progress in Solid Mechanics*, I.N Sneddon et R. Hill Ed., II :87–140, 1961.
- [49] J. Lombardi P. Massard et A. Perruchot. Les alcalins appartiennent-ils à la structure des gels, produits des alcalis-réactions dans les bétons ? *C. R. Acad. Sci. Paris, série II a*, pages 283–288, 1996.
- [50] A. Sellier et B. Capra. Modélisation physico-chimique de la réaction alcali-granulat : apport au calcul des structures dégradées. *Revue française de génie civil*, 1(3) :445–481, 1997.
- [51] L. Dormieux et E. Lemarchand. Modélisation macroscopique du transport diffusif : apport des méthodes de changement d'échelle d'espace. *Oil & Gas - Revue de l'Institut Français du Pétrole*, 55(1) :15–34, 2000.
- [52] L. Landau et E. Lifchitz. *Physique théorique. Mécanique des fluides. 3ème édition*, volume I. Éditions Ellipses, 1994.
- [53] H.I. Ene et E. Sanchez-Palencia. Équations et phénomènes de surface pour l'écoulement dans un modèle de milieu poreux. *Journal de Mécanique*, 14(1) :73–108, 1975.
- [54] J.L. Auriault et E. Sanchez-Palencia. Étude du comportement macroscopique d'un milieu poreux saturé déformable. *Journal de Mécanique*, 16(4) :575–603, 1977.
- [55] D. Kondo V. Renaud et J-F. Shao. *Modélisations à l'échelle mesoscopique de l'endommagement des géomatériaux : application au comportement d'un grès*. Ouvrages géomatériaux et interactions. Hermès, 1998.
- [56] J.L. Auriault et J. Lewandowska. Diffusion non linéaire en milieux poreux. *Cr. R. Acad. Sci. Paris*, t. 324 série II b. :293–298, 1997.
- [57] G. Arliguie R. Francois et J.P. Ollivier. Prédiction de la pénétration des chlorures dans les structures en béton armé. *Revue française de génie civil*, 1(3) :483–502, 1997.
- [58] X. Chateau et L. Dormieux. Approche micromécanique du comportement d'un milieu poreux non-saturé. *C. R. Acad. Sci Paris. t. 326, Série II*, pages 533–538, 1998.
- [59] W. Prince et R. Perami. Mise en évidence du rôle essentiel des ions OH^- dans les réactions alcali-silice. *Cement and Concrete Research*, 23 :1121–1129, 1993.

- [60] E.J. Garboczi. Permeability, diffusivity and microstructural parameters : a critical review. *Cement and Concrete Research*, 20 :591–601, 1990.
- [61] E.J. Garboczi and D.P. Bentz. Analytical formulas for interfacial transition zone properties. *Advanced Cement Based Materials*, 6 :99–108, 1997.
- [62] F. Gilbert. *Descriptions thermo-mécaniques de milieux à plusieurs constituants et application aux milieux poreux saturés. Thèse de Doctorat d'Etat*. PhD thesis, Paris VI, France, 1987.
- [63] G. Gouy. Sur la constitution de la charge électrique à la surface d'un électrolyte. *Ann. Phys.*, 9(série 4) :457–468, 1910.
- [64] J.K. Mitchell J.A. Greenberg and P.A. Whitherspoon. Chemico-osmotic effects in fine-grained soils. *J. of Soil Mech. and Found. Div.*, 94(SM4), April 1973.
- [65] J.S. Guedon. Relation fissuration-expansion. *Annales de l'ITBTP*, n° 512, mars-avril 1993.
- [66] J. Holly D. Hampton and M.D.A. Thomas. Modelling relationships between permeability and cement paste pore microstructures. *Cement and Concrete Research*, 23 :1317–1330, 1993.
- [67] Z. Hashin. Assesment of the self-consistent scheme approximation : Conductivity of particulate composites. *J. Composites Materials*, 2(3) :284–300, July 1968.
- [68] Z. Hashin. The differential scheme and its application to cracked materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 36(6) :719–734, 1988.
- [69] Z. Hashin and S. Shtrikman. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 11 :127–140, 1963.
- [70] D.W. Hobbs. *Alkali-silica reaction in concrete*. Thomas Telford Ltd., London, UK, 1988.
- [71] H. Horii and S. Nemat-Nasser. Overall moduli of solids with microcracks : load-induced anisotropy. *J. Mech. Phys. Solids*, 31(2) :155–171, 1983.
- [72] U. Hornung and R.E. Showalter. Diffusion models for fractured media. *J. of Math. Analys. and Appl.*, 147 :69–80, 1990.
- [73] B. Gérard D. Breysse A. Ammouche O. Houdusse and O. Didry. Cracking and permeability of concrete under tension. *Materials and Structures*, 29 :141–151, Avril 1996.
- [74] M. Huang and S. Pietruszczak. Numerical analysis of concrete structures subjected to alkali-aggregate reaction. *Mech. cohesive-frictional Mater*, 1(4) :305–319, 1996.
- [75] M. Huang and S. Pietruszczak. Modeling of thermomechanical effects of alcali-silica reaction. *Journal of Engineering Mechanics*, 125(4), April 1999.

- [76] J.M. Huyghe and J.D. Janssen. Thermo chemo electro mechanical formulation of saturated charged porous solids. *Transport in Porous Media*, 34 :129–141, 1999.
- [77] J.N. Israelachvili. *Intermolecular forces*. Academic Press, 1985.
- [78] M. Kaczmarek and T. Hueckel. Chemo-mechanical consolidation of clays : Analytical solutions for a linearized one-dimensional problem. *Transport in Porous Media*, 32 :49–74, 1998.
- [79] C. Larive. *Apports combinés de l'expérimentation et de la modélisation à la compréhension de l'alcali-réaction et de ses effets mécaniques*. PhD thesis, Laboratoires des Ponts et Chaussées, Paris, France., 1998.
- [80] C. Larive. Quand le béton se met à gonfler. *La recherche*, (319), 1999.
- [81] B. Larrouturou. *Modélisation mathématique et numérique pour les sciences de l'ingénieur*. Cours de l'Ecole Polytechnique, 1994.
- [82] J. Letey and W.D. Kemper. Movement of water and salt through a clay-water system : Experimental verification of Onsager Reciprocal Relation. *Water Resources Research*, 1968.
- [83] V.M. Levin. Thermal expansion coefficients of heterogeneous materials. *Mech. of Solids*, 11 :358–61, 1967.
- [84] F-J Ulm O. Coussy K. Li and C. Larive. Thermo-Chemo-Mechanics of ASR-expansion in concrete structures. *Journal of Engineering Mechanics, ASCE*, 126(3) :233–242, 2000.
- [85] T. Luping and L-O. Nilsson. A study of the quantitative relationship between permeability and pore size distribution of hardened cement pastes. *Cement and Concrete Research*, 22 :541–550, 1992.
- [86] F.T. Madsen and M. Muller-Vonmoos. Swelling pressure calculated from mineralogical properties of a jurassic opalinum shale, Switzerland. *Clays and Clay Minerals*, 33(6) :501–509, 1985.
- [87] F.T. Madsen and M. Muller-Vonmoos. The swelling behaviour of clays. *Applied Clay Science*, 4 :143–156, 1989.
- [88] M. Mainguy. *Modèles de diffusion non linéaire en milieux poreux. Applications à la dissolution et au séchage des matériaux cimentaires*. PhD thesis, École nationale des ponts et chaussées, 1999.
- [89] J.C. Maxwell. *A treatise on Electricity and Magnetism*. Clarendon Press, 2 Volumes, Oxford, 1892.
- [90] G. Mesri and R.E. Olson. Consolidation characteristics of Montmorillonite. *Géotechnique*, 21(4) :341–352, 1971.

- [91] Y. Xi A. Suwito X. Wen C. Meyer and W. Jin. *Testing and modeling alkali-silica reaction and the associated expansion of concrete*. In : G. Pijaudier-Cabot, Z. Bittnar B. Gérard (eds.), *Mechanics of quasi-brittle materials and structures*. Hermès science, Paris, France, 1999.
- [92] D.G. Miller. Thermodynamics of irreversible processes : The experimental verification of the Onsager reciprocal relations. 1959.
- [93] G.W. Milton. Bounds on the elastic and transport properties of two-component composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 30(3) :177–191, 1982.
- [94] J.A. Greenberg J.K. Mitchell and P.A. Whitherspoon. Coupled salt and water flows in a groundwater basin. *J. of Geophys. Research*, 78(27), September 1973.
- [95] J.K. Mitchell. *Fundamentals of Soil Behavior. 2nd edition*. Wiley, New-York, 1993.
- [96] F.K. Mody and A.H. Hale. A borehole stability model to couple the mechanics and chemistry of drilling-fluid/shale interaction, paper SPE/IADC 25728. *presented at 1993 Drilling Conference, Amsterdam*, 23–25 February 1993.
- [97] M. Moranville-Regourd. Modelling of expansion induced by ASR - New approaches. *Cement and Concrete Composites*, 19 :415–425, 1997.
- [98] J.P. Ollivier and M. Massat. Permeability and microstructure of concrete : a review of modelling. *Cement and Concrete Research*, 22 :503–514, 1992.
- [99] R.E. Olson and G. Mesri. Mechanisms controlling compressibility of clays. *J. of Soil Mech. and Found. Div.*, 96(SM6), November 1970.
- [100] L. Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. I. *Physical Review, 2nd Series*, 37(4) :404–426, 1931.
- [101] L. Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. II. *Physical Review, 2nd Series*, 38(12) :2265–2279, 1931.
- [102] T.K. Perkins and O.C. Johnston. A review of diffusion and dispersion in porous media. *Soc. of Petr. Engin.*, 1963.
- [103] M.G. Peterson. *Chemoplastic modeling of the alkali-silica reaction : Effects of stress-induced anisotropy due to applied uniaxial loading*. Massachusetts Institute of Technology, June 2000. B.S. Civil Engineering.
- [104] O.A. Plumb and S. Whitaker. Dispersion in heterogeneous porous media : 1. Local volume averaging and large-scale averaging. *Water Resources Research*, 24(7) :913–926, July 1988.
- [105] O.A. Plumb and S. Whitaker. Dispersion in heterogeneous porous media 2. Predictions for stratified and two-dimensional spatially periodic systems. *Water Resources Research*, 24(7) :927–938, July 1988.

- [106] A.B. Poole. *Introduction to alkali-aggregate reaction in concrete*. In : Swamy, R.N. (Ed.), *The Alkali-silica reaction in concrete*, Blackie, London, UK, 1992.
- [107] R.C. Reid J.M. Prausnitz and B.E. Poling. *The properties of gases and liquids. Fourth edition*. McGraw-Hill International Editions, 1987.
- [108] R.W. Gillham M.J.L. Robin and D.J. Dytynshyn. Diffusion of non-reactive and reactive solutes through fine-grained barrier materials. *Can. Geotech. J.*, 21 :541–550, 1984.
- [109] R. Seedsman. The behaviour of clay shales in water. *Can. Geotech. J.*, 23 :18–22, 1986.
- [110] R.W. Seedsman. Strength implications of the crystalline and osmotic swelling of clays in shales. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech.*, 24(6) :357–363, 1987.
- [111] J-F. Serratrice. Essais de laboratoire sur les sols gonflants. *Laboratoire Régional des Ponts et Chaussées. Aix-en-Provence. Thème GEO 37*, 1998.
- [112] C.D. Shackelford and D.E. Daniel. Diffusion in saturated soil : I. Background. *J. of Geotech. Engin.*, 117(3), March 1991.
- [113] C.D. Shackelford and D.E. Daniel. Diffusion in saturated soil : II. Results for compacted clay. *J. of Geotech. Engin.*, 117(3), March 1991.
- [114] J.D. Sherwood. Swelling of shale around a cylindrical wellbore. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 444 :161–184, 1994.
- [115] B.E. Sleep and J.F. Sykes. Compositional simulation of groundwater contamination by organic compounds. 1. Model development and verification. *Water Res. Research*, 29(6) :1697–1708, 1993.
- [116] T.E. Stanton. Expansion of concrete through reaction between cement and aggregate. *Proceedings of Amer. Soc. of Civ. Engin.*, 66 :1781–1811, 1940.
- [117] N.Z. Sun. *Mathematical Modeling of Groundwater Pollution*. Springer, 1996.
- [118] P. Suquet. *Continuum micromechanics. CISM Courses and Lectures No. 377*. Springer Verlag, Wien, New York, 1997.
- [119] G.I. Taylor. Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube. *Proc. R. Soc. Lond.*, A 219 :186–203, 1953.
- [120] A. vanOort A.H. Hale F.K. Mody and S. Roy. Critical parameters in modelling the chemical aspects of borehole stability in shales and in designing improved water-based shale drilling fluids. *Annual SPE Conf. in New-Orleans*, 1994.
- [121] B.P. Warkentin and R.K. Schofield. Swelling pressure of Na-Montmorillonite in NaCl solutions. *Journal of Soil Science*, 13(1), 1962.

- [122] J.R. Willis. Bounds and self-consistent estimates for the overall properties of anisotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 25 :185–202, 1977.
- [123] A.T. Yeung and J.K. Mitchell. Coupled fluid, electrical and chemical flows in soil. *Géotechnique*, 43(1) :121–134, 1993.
- [124] R.N. Yong and B.P. Warkentin. *Soils Properties and Behavior*. Elsevier, 1975.
- [125] A. Zaoui. *Matériaux hétérogènes et composites*. Cours de l'Ecole Polytechnique, 1996.
- [126] A. Zaoui. *Structural morphology and constitutive behaviour of microheterogeneous materials*. Continuum Micromechanics, CISM courses and lectures n° 377, Edited by P. Suquet, SpringerWienNewYork, 1997.