HAL
open science

Modélisation multi échelle des phénomènes de retrait et de fluage dans les matériaux cimentaires : approches numériques couplant les éléments finis et la méthode de Lattice-Boltzmann

Jean-Luc Adia

To cite this version:

Jean-Luc Adia. Modélisation multi échelle des phénomènes de retrait et de fluage dans les matériaux cimentaires : approches numériques couplant les éléments finis et la méthode de Lattice-Boltzmann. Génie civil. Université Paris-Est, 2017. Français. NNT : 2017PESC1013 . tel-01757055

HAL Id: tel-01757055

https://theses.hal.science/tel-01757055v1

Submitted on 3 Apr 2018

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

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

UNIVERSITÉ PARIS-EST

ÉCOLE DOCTORALE SCIENCE INGÉNIERIE ET ENVIRONNEMENT

THÈSE

présentée pour l'obtention du diplôme de docteur de

L'UNIVERSITÉ PARIS-EST

Spécialité : ***Génie Civil***

par

Jean-Luc Delamonte ADIA

Sujet de la thèse :

Modélisation multi échelle des phénomènes de retrait et de fluage dans les matériaux cimentaires : approches numériques couplant les éléments finis et la méthode de Lattice-Boltzmann

Version définitive

Thèse soutenue le 28 novembre 2017 devant le jury composé de :

Frédéric RAGUENEAU	Professeur, ENS Cachan	Président
Frédéric GRONDIN	Professeur, École Centrale Nantes	Rapporteur
Benoît BARY	Ingénieur Chercheur, CEA	Rapporteur
Nhu-Cuong TRAN	Ingénieur Chercheur, EDF R&D	Examinateur
Julien SANAHUJA	Ingénieur Chercheur, EDF R&D	Examinateur
Julien YVONNET	Professeur, Université Paris-Est Marne-la-Vallée	Directeur de thèse
Qi-Chang HE	Professeur, Université Paris-Est Marne-la-Vallée	Co-directeur de thèse

Remerciements

Le présent manuscrit est le résultat d'un travail de recherche d'un peu plus de trois ans, effectué dans le cadre d'une thèse CIFRE en partenariat avec EDF R&D et le laboratoire MSME. Choisir de faire une thèse, après mon diplôme d'ingénieur et une année d'expérience professionnelle n'a pas été pour moi un choix évident. Ma curiosité scientifique, m'a conduit à reprendre mes études dans le Master Recherche Génie Civil et Environnement de l'Ecole centrale Paris. Cela a été mon premier contact avec le monde la recherche qui m'a tout de suite séduit et conforter dans mon nouveau choix de carrière. Ainsi, je me rends compte de la grande opportunité qui m'a été accordée. Pour cela, je souhaiterais d'abord exprimer ma grande gratitude à mes directeurs et encadrants de thèse, Julien Yvonnet, Qi-Chang He, Nhu-Cuong Tran et Julien Sanahuja, sans qui cette thèse n'aurait pas pu être réalisée. Je les remercie, pour leur patience, leur encouragement et leur réactivité pendant la période d'incertitude lors de l'étude de mon projet de thèse par l'ANRT.

Ces trois années à travailler sous la direction de Julien Yvonnet, ont renforcé mon estime pour ses qualités scientifiques et humaines reconnues de tous. J'ai énormément appris de lui, et je reste impressionné par sa motivation face aux opportunités de travailler sur de nouveaux sujets de recherche. Les observations et conseils de mon équipe encadrante sur les plans, scientifique et personnel, m'ont accompagné le long de ma recherche doctorale. Je pense notamment aux séances de discussion et d'implémentation de mon outil de simulation des fluides diphasiques avec Julien Yvonnet. Aux discussions et conseils, sur la stratégie de modélisation avec Qi-Chang He, sur la micromécanique avec Julien Sanahuja et sur les attentes d'EDF R&D avec Nhu-cuong Tran.

Je remercie vivement Monsieur Frédéric Ragueneau qui a présidé le jury, Messieurs Frédéric Grondin et Benoît Bary qui ont pris soin de rapporter ce manuscrit. Leurs lectures détaillées est d'une grande valeur et m'a permis d'améliorer ma présentation et d'avoir un regard très constructif sur le manuscrit. La discussion effectuée à la suite de la soutenance était également très passionnante et a permis de dégager plusieurs pistes d'amélioration et des perspectives à mon travail de thèse.

J'ai eu la chance d'avoir passé ces trois ans au sein de deux équipes constituées de gens très sympathiques et bienveillants. Je remercier donc mes collègues doctorants et chercheurs du Laboratoire MSME pour l'ensemble des discussions scientifiques ou personnelles que nous avons pu partager. Je remercie aussi mes collègues de l'équipe Génie Civil et Combustible (T25) du site des Renardières d'EDF R&D. J'adresse ma sincère reconnaissance à Nicolas Prompt et Hing-Ip Wong, successivement chefs du groupe T25, pour m'avoir recruté comme Thésard par Nicolas et aujourd'hui comme Ingénieur Chercheur par Hing-Ip. J'adresse aussi ma reconnaissance aux doctorants et chercheurs de l'équipe Génie Civil du groupe T25, Laurent Charpin, Patrick Sémété, Jean-Philipe Mathieu, Yassine El Assami, Françis Lavergne, Shun Huang, Justin Kinda, Patrick Desgree, Laurent Petit, Charles Toulemonde. Je les remercie en particulier pour être venus en nombre à ma soutenance de thèse.

Je souhaite remercier ma mère, mon père, Rose et Ruffin, mes frères et ma sœur, Gérard, Olivier, Christian et Christelle, qui m'ont soutenu par la prière et les encouragements. Je suis également reconnaissant envers mes amis, qui ne comprennent sans doute toujours pas pourquoi mon travail de recherche porte sur le béton. Je remercie enfin ma femme Corinne qui m'a soutenu dans mes moments de dur labeur, et surtout en supportant les difficultés de l'organisation de notre mariage.

Résumé

Modélisation multi échelle des phénomènes de retrait et de fluage dans les matériaux cimentaires : approches numériques couplant les éléments finis et la méthode de Lattice-Boltzmann

Dans les structures en béton précontraint, les phénomènes de fluage et de retrait tendent à réduire les efforts de précontrainte initialement prévus pour maintenir le béton dans un état minimisant les forces de traction et donc la fissuration. La compréhension et la prédiction de ces phénomènes par le biais de modèles sont donc primordiales pour la conception et la maintenance à long terme des ouvrages du génie civil tels que les enceintes de confinement des centrales nucléaires.

L'objectif de cette thèse est d'élaborer un cadre de modélisation micromécanique pour décrire de manière unifiée le retrait et le fluage dans les matériaux cimentaires. Pour cela, l'étude se base sur l'échelle de la microstructure poreuse du gel de C-S-H où les mécanismes intrinsèques de ces déformations différées du béton opèrent. Une approche d'homogénéisation numérique modélisant ces phénomènes dans des microstructures poreuses à morphologies quelconques est développée. Une description explicite du réseau poreux ainsi que de la phase liquide de l'eau pendant les processus de séchage/humidification est prise en compte. Les mécanismes concernant les déformations différées dans la phase solide sont modélisés par la théorie de la microprécontrainte-solidification (MPS). Les simulations à l'échelle microscopique sont réalisées par une approche originale couplant la méthode de Lattice Boltzmann (LBM) et la méthode des éléments finis (FEM). La LBM est utilisée pour décrire la distribution du liquide capillaire à l'échelle du pore, tandis que la FEM est employée pour simuler la déformation du squelette solide sous l'action combinée de l'eau dans l'espace poreux et d'un chargement macroscopique.

La démarche proposée permet, au travers des simulations, de mieux comprendre les mécanismes liés à la non saturation et aux effets capillaires dans les milieux poreux. En particulier, la prise en compte de morphologies réalistes de microstructures et des ménisques formés conduit à différents régimes de retrait/gonflement. Ainsi les effets de l'intensité de la pression capillaire, de la tension de surface et des surfaces de chargement sur la réponse élastique du squelette solide sont évalués. Enfin, nous proposons une extension des approches précédentes au cas d'un squelette viscoélastique se déformant sous les effets de la pression capillaire et des tensions de surface. A partir des observations numériques réalisées, nous proposons un modèle pour décrire le fluage et le retrait du gel de C-S-H de manière unifiée.

Mots-clés : Retrait, Fluage, Modélisation multi échelle, Silicate de Calcium Hydraté (C-S-H), Méthode de Lattice Boltzmann (LBM), Méthode des Éléments finis (FEM).

Abstract

Multi-scale modelling of the shrinkage and creep phenomena of cementitious materials : a combined Finite Elements-Lattice Boltzmann-numerical approach

In pre-stressed concrete structures, creep and shrinkage tend to reduce the pre-stress forces which are initially produced so as to maintain concrete in a state minimizing traction forces and then cracks. Understanding and predicting these phenomena through models are thus highly important for the design and durability of civil engineering structures, such as containment buildings in nuclear power plants.

The objective of this thesis is to develop a micromechanical modeling framework to describe shrinkage and creep in cementitious materials in a unified manner. For this purpose, the study focuses on the scale of the porous structure of the C-S-H gel where the intrinsic mechanisms of delayed strains are active. A computational homogenization approach is developed to model these phenomena in porous structures with arbitrary morphologies. An explicit description of the porous network and of the liquid phase of water during the drying/humidification process is taken into account. The mechanisms related to delayed strains in the solid phase are modeled by the microprestress-solidification theory (MPS). The simulations at the microscale are conducted based on an original approach coupling the Lattice Boltzmann method (LBM) and the finite element method (FEM). The LBM is used to describe the distribution of capillary water in the porous structure, whereas the FEM serves as modeling the strain of the solid skeleton under the capillary water effets and a macroscopic load.

The proposed method allows, by means of the simulations, to better understand the mechanisms related to the capillary effects in the porous structure. More specifically, taking into account realistic morphologies of microstructures and of the formed menisci lead to different regimes of shrinkage/swelling. Then, the effects of capillary pressure intensity, of surface tension and of morphologies of capillary surfaces on the elastic response of the solid skeleton are evaluated. Finally, the above approaches are extended to the case of a viscoelastic solid deformed under the action of the capillary water. From numerical observations, we propose a model is proposed to describe the creep and shrinkage of C-S-H gel in a unified way.

Keywords : Shrinkage, creep, multi-scale modelling, Calcium Silicate Hydrate (C-S-H), Lattice Boltzmann Method (LBM), Finite Element Method (FEM).

Cadre de la thèse

Cette thèse a été préparée entre le Laboratoire de Modélisation et de Simulation Multi Échelle (MSME), unité mixte de recherche de l'Université Paris-Est Marne-la-Vallée, de l'Université Paris-Est Créteil Val de Marne et du CNRS (UMR 8208), et le groupe T25 (Génie Civil et Combustible) du département Matériaux et Mécanique des Composantes (MMC) d'EDF R&D, et ce dans le cadre d'un financement CIFRE.

Laboratoire MSME, Université Paris-Est
5 Bd Descartes 77454 Marne-la-Vallée Cedex 2, France
http ://msme.u-pem.fr

EDF R&D, site des Rénardières
Avenue des Rénardières-Ecuelles 77818 Moret-Sur-Loing, France
http ://www.edf.fr

Table des matières

Introduction générale **1**

I Les phénomènes de fluage et de retrait dans les matériaux cimentaires **5**

1 Observations expérimentales, microstructure et mécanismes élémentaires **7**

1.1 Introduction 8
1.2 Observations expérimentales 8
1.2.1 Les déformations de retrait endogène et de dessiccation 9
1.2.2 La déformation de fluage propre 10
1.2.3 La déformation de fluage de dessication 12
1.3 Microstructure des bétons 13
1.3.1 Description de la réaction d'hydratation du ciment 13
1.3.2 Description des hydrates 14
1.3.3 Description de la pâte de ciment 16
1.3.4 Description du mortier et du béton 17
1.3.5 Description de la porosité et du rôle de l'eau 18
1.3.6 Vision multi échelle de la microstructure des bétons 20
1.4 Mécanismes des déformations différées 23
1.4.1 Pendant le fluage propre 23
1.4.2 Pendant le retrait endogène ou de dessiccation 27
1.4.3 Pendant le fluage de dessiccation 29
1.5 Conclusion 30
1.5.1 Les tendances expérimentales 31
1.5.2 Les mécanismes retenus 35

II Une approche de modélisation multi physique des microstructures poreuses basée sur la méthode des éléments finis et la méthode de Boltzmann sur réseau : méthodologie **39**

2 Écoulements isothermes d'un fluide monophasique à l'échelle de l' espace poreux par la méthode de Boltzmann sur réseau **41**

2.1 Introduction 43
2.2 Théorie 43
2.2.1 Description d'un système fluide à différentes échelles 43
2.2.2 Équation de Boltzmann 46

2.2.3 De Boltzmann à l'hydrodynamique 50
2.3 Implémentation numérique 58
2.3.1 Discrétisation de l'espace des quantités de mouvement 58
2.3.2 Discrétisation en espace et en temps 63
2.3.3 De LBM à Navier-Stokes : la procédure de Chapmann-Enskog 64
2.3.4 Conditions initiales et aux limites 65
2.3.5 Algorithme 68
2.4 Exemples numériques 69
2.4.1 Écoulement de Poiseuille 70
2.4.2 Écoulement dans une cavité à couvercle entraîné 74
2.4.3 Écoulement laminaire cisaillant de Taylor 76
2.4.4 Estimation de la perméabilité 79
2.5 Conclusion 83

3 Équilibre thermodynamique en condition isotherme d'un fluide diphasique à l'échelle du réseau poreux par la méthode de Boltzmann sur réseau 85
3.1 Introduction 87
3.2 Théorie 87
3.2.1 Équation de Boltzmann en présence d'interactions non locales 87
3.2.2 De Boltzmann aux équations de Navier-Stokes 90
3.3 Implémentation numérique 92
3.3.1 Discrétisation de l'équation de Boltzmann-BGK modifiée 93
3.3.2 Conditions aux limites 95
3.3.3 Algorithme 96
3.3.4 D'une description continue vers une description discontinue des interfaces 97
3.4 Exemples numériques 100
3.4.1 Séparation en phase liquide et vapeur 100
3.4.2 Coexistence thermodynamique des phases liquides et gazeuses 102
3.4.3 La loi de Laplace 103
3.4.4 La loi de Young 104
3.4.5 Courbe capillaire d'un pore de forme ellipsoïdale allongée 106
3.4.6 Microstructures à morphologie complexe 108
3.5 Conclusion 114

4 La réponse mécanique en condition non saturée des microstructures poreuses à morphologie quelconque 117
4.1 Introduction 118
4.2 Théorie 119
4.2.1 Problème d'équilibre local en condition non saturée 119
4.2.2 Modéle de comportement de la phase solide du gel C-S-H 125

4.3 Implémentation numérique 131
4.3.1 Conditions aux limites périodiques 131
4.3.2 Algorithmes de détection des interfaces, de calcul de la courbure locale signée et de la moyenne de contrainte de membrane 133
4.3.3 Intégration numérique de la théorie MPS : algorithme exponentiel 136
4.4 Exemples numériques 139
4.4.1 Validations des conditions aux limites périodique en 3-D 139
4.4.2 Détection des interfaces solide-liquide, solide-vapeur et liquide-vapeur . . 144
4.4.3 Surpression/depression induite par la présence de tension de surface . . . 147
4.4.4 Simulations de la réponse d'un point matériel avec la théorie MPS 148
4.5 Conclusion 156

III Une approche de modélisation multi physique des microstructures poreuses basée sur la méthode des éléments finis et la méthode de Boltzmann sur réseau : applications 157

5 Modélisation du retrait/gonflement élastique dans les microstructures poreuses à morphologie quelconque 159
5.1 Introduction 160
5.2 Équations constitutives homogénéisées de l'élasticité non saturée 160
5.2.1 Sous-problème $(\mathcal{P}_1)$: $\bar{\varepsilon}_{kl} \neq 0,\ p^v = p^l = \gamma^{lv} = 0$ 161
5.2.2 Sous-problème $(\mathcal{P}_2)$: $p^l \neq 0,\ \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{0}, p^v = \gamma^{lv} = 0$ 163
5.2.3 Sous-problème $(\mathcal{P}_3)$: $p^v \neq 0,\ \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{0}, p^l = \gamma^{lv} = 0$ 164
5.2.4 Sous problème $(\mathcal{P}_4)$: $\gamma^{lv} \neq 0,\ \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{0}, p^l = p^v = 0$ 165
5.3 Homogénéisation numérique de l'élasticité non saturée par la méthodologie LBM-FEM 167
5.3.1 Définitions des cas de chargement numérique et des propriétés poroélastiques associées 167
5.3.2 Microstructure périodique contenant des pores allongés selon $\mathbf{e}_3$ 168
5.3.3 Microstructure périodique à morphologie cubique centrée 178
5.4 Conclusion 184

6 Modélisation unifiée des mécanismes de fluage et de retrait dans les microstructures poreuses à morphologie quelconque 187
6.1 Introduction 188
6.2 Premières simulations par éléments finis sous Code_Aster de la théorie MPS . . 188
6.2.1 simulations du fluage propre 189
6.2.2 simulations de l'effet Pickett 192

6.3 Homogénéisation numérique de la viscoélasticité linéaire vieillissante dans les microstructures poreuses vides ou saturées . . . 194
6.3.1 Microstructure périodique contenant des pores allongés selon $\mathbf{e}_3$ . . . 195
6.3.2 Microstructure périodique à morphologie cubique centrée . . . 199
6.4 Vers un modèle unifié pour les mécanismes de fluage et de retrait . . . 201
6.5 Conclusion . . . 202

Conclusion générale et perspectives **205**

A Annexe : La méthode de Boltzmann sur réseau pour la modélisation d'un fluide mono-phasique **209**
A.1 Éléments de théorie cinétique . . . 209
A.1.1 Théorème de Liouville . . . 209
A.1.2 Hierarchie BBGKY . . . 210
A.1.3 Intégrale de collision de Boltzmann . . . 211
A.2 Discrétisation de l'équation de Boltzmann . . . 213
A.2.1 Polynômes d'Hermite . . . 213
A.2.2 Quadrature de Gauss-Hermite . . . 214

B Annexe : La méthode de Boltzmann sur réseau pour la modélisation d'un fluide diphasique **219**
B.1 Tenseur de contrainte du modèle SC LBM . . . 219
B.2 Définition de la tension de surface γ^{lv} . . . 220
B.3 Calcul de la courbure locale signée . . . 222

C Annexe : La réponse mécanique en condition non saturée des microstructures poreuses **223**
C.1 Moyenne des contraintes en présence des tensions de surface solide-liquide, solide-vapeur et liquide-vapeur . . . 223
C.2 Tenseur d'Eshelby d'une inclusion ellipsoïdale de revolution allongée dans un milieu isotrope . . . 225

Bibliographie **227**

Table des figures

1 Schématisation de la méthodologie de modélisation micromécanique unifiée des phénomènes de fluage et de retrait à l'échelle du gel de C-S-H. 2

1.1 Les contributions des déformations différées des bétons 8

1.2 Représentation schématique de la structure globulaire et colloidale des C-S-H (Jennings, 2004) 15

1.3 Réprésenation schematique de la structure en feuillets des C-S-H (Feldman and Sereda, 1968). 15

1.4 Micrographes TEM d'échantillons de C-S-H fabriqués par hydratation de C_3S à [CaO] = $12mmol/l$ en fin de la periode d'accélération (haut gauche), de décélération (haut droite) pendant l'hydration, on observe une morphologie de type feuillet ($\frac{Ca}{Si} \sim 1.34$). De même en ce qui concerne les mêmes phases de la cinétique d'hydratation pour [CaO] = $27mmol/l$ (bas gauche et droite), on observe cette fois une morphologie de type fibre ($\frac{Ca}{Si} \sim 1.86$), (Rodriguez et al., 2014). . . 16

1.5 Modèle multi échelle de la microstructure des C-S-H partant de feuillets élémentaires (Minet, 2003). 16

1.6 (a) Micrographie SEM BSE d'une pâte de ciment Portland à 7 jours d'hydratation.(b) illustration schematique de la formation de coques d'hydrates selon la taille des grains (Scrivener, 2004). En particulier sur la figure (b), l'espace poreux est en blanc et selon la taille des grains les auteurs mettent en exergue la possibilité de formation d'une porosité après hydrataion des grains anhydres de petites tailles. 17

1.7 Description schématique des micropores et des efforts qui y sont appliqués (inspirée par (Bazant et al., 1997a)). 21

1.8 Description des agrégats de C-S-H formant le gel 22

1.9 Description de la microstructure simplifiée de pâte de ciment 22

1.10 Description de la microstructure simplifiée du mortier (a) et du béton (b) 23

1.11 Cinétique du retrait $\frac{\varepsilon^r}{\varepsilon^r_\infty}$ et retrait asymptotique ε^r_∞. 31

1.12 Effet de la vitesse du séchage sur le retrait, Day et al. (1984). 31

1.13 Hysteresis entre retrait et gonflement pendant un cycle de séchage-humidification lent, Day et al. (1984). 32

1.14 Effet de la fissuration sur la mesure de la déformation de retrait. 32

1.15 Vitesse de la complaisance de fluage propre à différents âges t_0 du béton, (Ulm and Acker, 1988). 33

1.16 Effet du vieillissement du béton sur son fluage propre, (L'Hermite et al., 1965, 1968). 33

1.17 Recouvrance de fluage propre et fluage irreversible, (Ross, 1958). 34

1.18 L'effet du séchage sur la déformation de fluage, (Troxell et al., 1958). 34
1.19 Chargement hydrique : Dépression des mésopores et des macropres du fait de la pression capillaire et la tension de surface et mise en pression des micropores du fait de la pression de disjonction. 35
1.20 Hydratation : accroissement de la fraction volumique du C-S-H où le mécanisme de fluage a lieu. 35
1.21 Mécanismes de microglissement de cisaillement, relaxation de la microprécontrainte et variation de la microprecontrainte avec l'humidité des pores adjacents. 36
1.22 Mécanisme de microfissurations aux échelles des microstructures de pâte de ciment, de mortier et de béton. 36

2.1 Schémas de discrétisation de l'espace des quantités de mouvement (a) D_2Q_9 en 2-D et (b) D_3Q_{19} en 3-D 62
2.2 Conditions aux limites à l'interface solide-fluide Γ^{sf}. La méthode de rebond partiel. 66
2.3 Condition aux limites en pression (Zou and He, 1997). f_k sortant et entrant aux limites extérieures $\partial\Omega^f$ pour un schéma D_2Q_9. 67
2.4 Condition aux limites périodique. 68
2.5 Algorithme global de la LBM standard. 69
2.6 Étapes de pré-collision, de collision et de propagation. 69
2.7 Écoulement de Poiseuille. 70
2.8 Champ de pression d'un écoulement de Poiseuille pour un nombre de Reynold $Re = 10$. 71
2.9 Champ de la composante v_x de la vitesse d'un écoulement de Poiseuille pour un nombre de Reynold $Re = 10$. 72
2.10 Comparaison du profil de la composante v_x de la vitesse d'un écoulement de Poiseuille pour un nombre de Reynold $R_e = 10$ donnée par la LBM avec la solution analytique. 72
2.11 Champ de la composante v_y de la vitesse d'un écoulement de Poiseuille pour un nombre de Reynold $Re = 10$. 73
2.12 Erreur entre solution LBM et solution analytique pour une norme L_2 , pour différents critères de convergence et différentes finesses de la grille dans le cas d'un écoulement de Poiseuille pour un nombre de Reynold $R_e = 10$. N_y est le nombre de pixels suivant y. 73
2.13 Écoulement dans une cavité à couvercle entraîné. 74
2.14 Champ de la norme de la vitesse pour un un écoulement à couvercle entraîné $R_e = 100$. 75
2.15 Comparaison du profil passant par le centre géométrique de la cavité des composantes vx et vy de la vitesse donné par la LBM et (Ghia et al., 1982) pour un écoulement à couvercle entraîné avec $R_e = 100$. 76
2.16 Écoulement laminaire cisaillant de Taylor. 77

2.17 Champ (a) de la norme de la vitesse angulaire et (b) de la pression du fluide d'un écoulement laminaire cisaillant de Taylor. 78
2.18 Comparaison du profil passant par le centre géométrique des cylindres concentriques (a) de la vitesse et (b) de la pression, obtenus à partir de la LBM et de la solution analytique dans le cas d'un écoulement laminaire cisaillant de Taylor. 78
2.19 Cellule élémentaire d'un arrangement carré de cylindres à section circulaire. . . . 80
2.20 Arrangement carré de cylindres à section circulaire : champ de la composante v_x de la vitesse pour un rapport $a/b = 0.3$. 81
2.21 Perméabilité normalisée K_{11}/S d'un écoulement suivant x à travers un reseau de cylindres à section circulaire. Comparaison de la perméabilité calculée par la LBM et les résultats de (Wang, 2001) et de (Sangani and Acrivos, 1982) dans le cas de l'arrangement carré. 81
2.22 Cellule élémentaire d'un arrangement carré de cylindres à section carrée. 82
2.23 Arrangement carré de cylindres à section carrée : champ de la composante v_x de la vitesse pour un rapport $a/b = 0.3$. 82
2.24 Perméabilité normalisée K_{11}/S d'un écoulement suivant x à travers un reseau de cylindres à section carrée. Comparaison de la perméabilité calculée par la LBM et les résultats de (Wang, 1996) dans le cas de l'arrangement carré. 83

3.1 D_3Q_{19} Schéma de discrétisation de l'espace des quantités de mouvement 94
3.2 Conditions aux limites intérieur et extérieur. (a) schéma de rebond partiel sur Γ^{sf} et (b) condition aux limites périodique sur $\partial\Omega^f$. 95
3.3 Algorithme de Boltzmann sur réseau de type Shan-Chen. 96
3.4 Anisotropie du tenseur de contrainte du fluide le long de l'interface ($\delta \neq 0$). Ici δ est l'épaisseur de l'interface, $d\delta$ réprésente l'abscisse normale le long de l'épaisseur de l'interface, σ_{nn} et σ_{tt} sont les composantes normale et tangentielles de $\boldsymbol{\sigma}$. . . . 98
3.5 Remplacement des interfaces solide, liquide et vapeur épaisses ($\delta \neq 0$) par des interfaces imparfaites cohérentes ($\delta \to 0$), équivalentes. Ici δ, $[\![\mathbf{t}]\!]$ et $[\![\mathbf{u}]\!]$ sont l'épaisseur des interfaces, le saut du vecteur contrainte et le saut du vecteur déplacement des interfaces, respectivement. 98
3.6 Séparation en phase liquide et vapeur. Évolution temporelle du champ de densité à $t = 0ts$, $t = 30ts$, $t = 300ts$, $t = 3000ts$, $t = 30000ts$ et $t = 300000ts$. Dans cette simulation une fraction volumique initiale de liquide $S_r = 4.32\%$ avec $\rho^l > \rho_{crit}$ et $T/T_{crit} = 0.6$ a été utilisée. 101
3.7 Coexistence thermodynamique. La solution analytique est obtenue à partir de la construction de Maxwell de l'équation d'état de (Carnahan and Starling, 1969). . 102
3.8 Loi de Laplace et calcul de la tension de surface liquide-vapeur. 103
3.9 Différents champs de densité finale en mu/lu^3 obtenus à $T/T_{crit} = 0.585$ avec $\delta_0 = 5lu$ et un rayon initial R_0. 104

3.10 Différents angles de contact obtenus en ajustant la densité fictive du solide ρ^s à $\frac{T}{T_{crit}} = 0.585$. 105
3.11 Différents angles de contact, tensions de surface liquide-vapeur, solide-vapeur et solide-liquide en fonction de la densité fictive du solide ρ^s à $\frac{T}{T_{crit}} = 0.585$. 105
3.12 Pore de forme ellipsoïdale en condition non saturée. (a) géométrie 3-D (b) hypothèse d'un ménisque sphérique (c) agrandissement sur l'angle β. 106
3.13 Pore ellispoïdal en condition non saturée. (a), (b) : Champs de densité pour $\frac{T}{T_c} = 0.585$. 107
3.14 Courbe capillaire d'un pore ellipsoïdal $\alpha = 0.5$. 107
3.15 Description d'une microstructure poreuse à morphologie cubique centrée. (b) : en rouge la phase solide et en bleu l'espace poreux. 108
3.16 Caractéristiques du réseau poreux d'une microstructure de type cubique centré : (a) tortuosité and (b) tailles de pore. 109
3.17 Répartition à l'équilibre thermodynamique des phases liquide et vapeur dans l'espace poreux pour différente saturation en liquide d'une microstructure de type cubique centré. 110
3.18 Courbe capillaire d'une microstructure de type cubique centré. 111
3.19 Réprésentation schématique d'une particule de C-S-H ((Barbarulo, 2002) à partir du modèle de Courault et Nonat (Courault, 2001; Nonat et al., 2001)) 112
3.20 Description d'une microstructure poreuse à morphologie du type du gel de C-S-H. (b) : en rouge la phase solide et en bleu l'espace poreux. 112
3.21 Caractéristiques du réseau poreux d'une microstructure de type C-S-H : (a) tortuosité and (b) tailles de pore. 112
3.22 Répartition à l'équilibre thermodynamique des phases liquide et vapeur dans l'espace poreux pour différentes saturations en liquide d'une microstructure de type C-S-H. 113
3.23 Courbe capillaire d'une microstructure de type C-S-H. 114

4.1 Description schématique des différentes échelles d'un milieu poreux en condition non saturée. (a) échelle microscopique, (b) échelle macroscopique et (c) échelle de la structure. 119
4.2 Concept de contrainte de membrane. 120
4.3 Influence du centre de courbure. 121
4.4 Etat de référence complètement saturé en liquide à pression nulle $p^l = p^v = 0$ et en présence de la tension de surface liquide-vapeur γ^{sl} sur toute l'interface solide-fluide Γ^{sf}. 123
4.5 Chargement hydrique en condition non saturée et équilibre du squelette solide. . 125
4.6 Théorie de la microprécontrainte-solidification (MPS). 127
4.7 Vue de haut de la boîte de calcul : appareillage des nœuds opposés des arrêtes en 3-D. 133

4.8 Algorithme de segmentation du maillage de l'interface Solide-Fluide Γ^{sf}. 134
4.9 Seuil δ_{lim} de segmentation du maillage de l'interface Solide-Fluide Γ^{sf}. 134
4.10 Algorithme de calcul du champ aux points de Gauss de l'interface solide-fluide Γ^{sf} de la courbure locale signée. 135
4.11 Opération d'assemblage de tous les éléments partageant le nœud i. 135
4.12 Algorithme de construction du maillage de l'interface liquide-vapeur Γ^{lv}. 136
4.13 Forme différentielle de la partie non vieillissante du terme viscoélastique $\boldsymbol{\varepsilon}^{ve}$ de la théorie MPS. 137
4.14 Composantes normalisées du tenseur de rigidité effectif d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'éllipsoïde de révolution allongé. . 140
4.15 Composantes du tenseur de Biot d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'éllipsoïde de révolution allongé. 143
4.16 Module de Biot d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'éllipsoïde de révolution allongé. 144
4.17 Maillage de la microstructure à morphologie de type du gel C-S-H, 638883 nœuds et 3475860 tétrahèdres. En bleu : interface solide-fluide Γ^{sf} et En blanc : contour extérieur $\partial\Omega^s$. 144
4.18 Opération de segmentation du maillage de l'interface solide-fluide Γ^{sf}, en deux parties, interface solide-liquide Γ^{sl} et interface solide-vapeur Γ^{sv}, en fonction de la répartition des phases liquide et vapeur dans le réseau poreux. 145
4.19 Opération de reconstruction du maillage de l'interface liquide-vapeur Γ^{lv} (en rouge), en fonction de la répartition des phases liquide et vapeur dans le réseau poreux. 146
4.20 Maillage d'un quart de sphère soumis à une tension de surface. 147
4.21 Évaluation de la surpression induite par la tension de surface. 147
4.22 Erreur sur l'évaluation de la surpression induite par la tension de surface en fonction du raffinement du maillage de l'interface solide-pore. 148
4.23 Approximation d'ordre $k = 3$ du spèctre continu $L(\tau)$ et de la fonction de complaisance $\phi(t - t')/q_2$ normalisée de la partie non vieillissante de $d\boldsymbol{\varepsilon}^{ve}$. 150
4.24 Complaisance de fluage vieillissant $F(t, t')$ à différents âges $t' = 2, 7, 28, 90, 365$ jours à humidité constante $h = 1$. En noir : Mtest et en bleu : complaisance exacte. 151
4.25 Comparaison aux données expérimentales de (Komendant et al., 1976) de la complaisance de fluage vieillissant $F(t, t')$ à différents âges $t' = 28, 90, 270$ jours à humidité constante $h = 1$.En noir : Mtest et en bleu : les données expérimentales. 151
4.26 Comparaison aux données expérimentales de (Ross, 1958) de la recouvrance de fluage vieillissant à humidité pour un chargement initial à différents âges $t' = 14, 60$ et une décharge à 46 jours plus tard et ce à humidité constante $h = 1$. En noir : Mtest et en bleu : les données expérimentales. 152

4.27 Comparaison aux données expérimentales de (Ross, 1958) d'une réponse en fluage vieillissant d'un cycle de charge décharge à humidité constante $h = 1$. En noir : Mtest et en bleu : les données expérimentales. 153
4.28 Comparaison aux données expérimentales de (L'Hermite et al., 1965) de la tendance de la réponse en fluage séchant. En noir : Mtest et en bleu : les données expérimentales. 155
4.29 Effet de l'humidité sur la déformation totale.(a) histoire de l'humidité, (b) variation de la microprécontrainte, (c) variation de la viscosité et (d) variation de la complaisance $F(t, t')$. 155

5.1 Cas de chargement en poroélasticité non saturée. 161
5.2 Composantes du tenseur de Biot liquide-vapeur (seulement les effets de l'interface solide-vapeur) d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'ellipsoïde de révolution allongé. 170
5.3 Module de Biot liquide-vapeur d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'ellipsoïde de révolution allongé. 171
5.4 Composantes du tenseur de Biot liquide en fonction du degré de saturation liquide d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'ellipsoïde de révolution allongé. 172
5.5 Composantes du tenseur $\mathbf{\Gamma}$ (Eq. (5.64)) en fonction du degré de saturation liquide d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'ellipsoïde de révolution allongé, $\alpha = 1/2$. 174
5.6 Surface des interfaces liquide-vapeur $|\Gamma^{lv}|$ et solide-vapeur $|\Gamma^{sv}|$, $\alpha = 1/2$. 175
5.7 Composantes du tenseur de Biot liquide-vapeur en fonction du degré de saturation liquide d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'ellipsoïde de révolution allongé $\alpha = 1/2$. 176
5.8 Comparaison des effets capillaires de volume $p_c \mathrm{Tr}\mathbf{B}^l$ et de surface $\gamma^{lv}\mathrm{Tr}\mathbf{B}^{lv}$ d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'ellipsoïde de révolution allongé $\alpha = 1/2$. 177
5.9 Variation de volume induite par le séchage d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'ellipsoïde de révolution allongé $\alpha = 1/2$. 177
5.10 Hystérésis d'un cycle de séchage/humidification d'une microstrcuture cubique centrée dont le VER à les dimensions $100 \times 100 \times 100\ nm^3$. 179
5.11 Hystérésis de la courbe capillaire et distribution locale des ménisques liquides dans l'espace poreux. 179
5.12 Selon la loi de Laplace le remplissage d'un pore donné se produit lorsque la pression capillaire correspond au rayon R du pore. 180
5.13 Selon la loi de Laplace la vidange d'un pore donné se produit lorsque la pression capillaire correspond au rayon r d'accès. 180

5.14 Maillage périodique utilisé dans les calculs LBM-FEM, constitué de tétrahèdres linéaires : 341842 nœuds, 1838095 tétrahèdres : interface solide-vapeur Γ^{sv} en bleu et interface solide-liquide Γ^{sl} en rouge. 181
5.15 Évolution du cœfficient (a) b^l et du module (b) N^l de Biot liquide en fonction du degré de saturation en liquide d'une microstructure cubique centrée. 181
5.16 Évolution du cœfficient (a) b^{lv} et du module (b) N^{lv} de Biot liquide-vapeur en fonction du degré de saturation en liquide d'une microstructure cubique centrée. 182
5.17 Comparaison des effets capillaires de volume $p_c b^l$ et de surface $\gamma^{lv} b^{lv}$ d'une microstructure cubique centrée. 183
5.18 Variation de volume induite par le séchage d'une microstructure cubique centrée. 183

6.1 Maillage linéaire d'une éprouvette cylindrique de diamètre 16 cm et de hauteur 32 cm (11217 noeuds et 54983 tetrahèdres). 188
6.2 Effet du vieillissement du matériau sur sa réponse en fluage propre.(a) histoire de la pression, (b) histoire de l'humidité, (c) composante ε_{33} de la déformation et (d) les composantes ε_{11}, ε_{22} de la déformation. 190
6.3 Réponse de l'éprouvette pour des cycles de charge-décharge de la pression.(a) histoire de la pression ; (b) histoire de l'humidité ; (c) composante ε_{33} de la déformation et (d) les composantes ε_{11}, ε_{22} de la déformation. 191
6.4 Réponse en fluage propre de l'éprouvette à différentes humidités.(a) histoire de la pression, (b) histoire de l'humidité, (c) composante ε_{33} de la déformation. . . . 192
6.5 Réponse en fluage et retrait de l'éprouvette avec un séchage initial de $h = 100\%$ à $h = 75,50\%$.(a) histoire de la pression, (b) histoire de l'humidité, (c) composante ε_{33} de la déformation. 193
6.6 Composantes $R^{eff}_{ijkl}(t,t')$ ($t' = 28$ jours) du tenseur de relaxation effectif d'une microstructure périodique contenant des pores ellipsoïdaux allongés. En rouge les composantes du tenseur de relaxation de la phase solide $R^{s}_{ijkl}(t,t')$ ($t' = 28$ jours). 196
6.7 Composantes $B_{ij}(t,t')$ ($t' = 28,90$ jours) du tenseur de Biot saturé d'une microstructure périodique contenant des pores ellipsoïdaux allongés. 197
6.8 Trajet complexe de chargement : (a) composante non nulle de la déformation macroscopique $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$, (b) pression du fluide saturant l'espace poreux p. 197
6.9 Réponse de la microstructure périodique contenant des pores ellipsoïdaux allongés au trajet de chargement complexe : composantes non nulles de la contrainte macroscopique totale $\overline{\sigma}_{11}$, $\overline{\sigma}_{23}$, $\overline{\sigma}_{22}$, $\overline{\sigma}_{33}$. 198
6.10 Composantes $R^{eff}_{ijkl}(t,t')$ ($t' = 28$ jours) du tenseur de relaxation effectif d'une microstructure périodique à squelette solide cubique centré. En rouge la composante du tenseur de relaxation de la phase solide $R^{s}_{ijkl}(t,t')$ ($t' = 28$ jours). 199
6.11 Composantes $B_{ij}(t,t')$ ($t' = 28,90$ jours) du tenseur de Biot saturé d'une microstructure périodique à squelette solide cubique centré. 200

6.12 Réponse de la microstructure périodique à squelette solide cubique centré au trajet de chargement complexe : composantes non nulles de la contrainte macroscopique totale $\overline{\sigma}_{11}$, $\overline{\sigma}_{23}$, $\overline{\sigma}_{22}$, $\overline{\sigma}_{33}$. 200

A.1 Illustration du comportement d'une fonction de distribution à deux particules f^2. Le vecteur distance entre les deux particules est donné par $\mathbf{x}$, et l'impulsion relative est $\boldsymbol{\xi}$. Les deux particules sont corrélées seulement dans la plage des forces d'interactions intermoléculaires, indiquées par la sphère de rayon r_0. Hors de cette sphère c'est la fonction de distribution à 2 particules est le produit des fonctions de distribution à une particule f^1 de chacune des particules. 212

B.1 interface liquide-vapeur Γ^{lv} plane de normale $\mathbf{e}_x$ dans le système de coordonnées $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ 221

Liste des tableaux

1.1 Porosité et l'eau dans la microstructure des bétons 21

2.1 Paramètres de simulation de l'écoulement de Poiseuille (adimensionnés). 71
2.2 Paramètres adimensionnés de simulation de l'écoulement dans une cavité à couvercle entraîné. 75
2.3 Paramètres de simulation de l'écoulement laminaire cisaillant de Taylor. 77
2.4 Paramètres utilisés pour l'estimation de la perméabilité. 80

4.1 Valeurs des coefficients A_α obtenus en discrétisant $L_3(\tau)$ pour $\tau_1 = 10^{-4}$ jour et $N = 10$. 149
4.2 Valeurs de paramètres matériaux. 150
4.3 Valeurs de paramètres matériaux optimisés par (Jirasek and Havlasek, 2014) sur les données de expérimentales de (Komendant et al., 1976). 152
4.4 Valeurs de paramètres matériaux optimisés par (Bazant and Prasannan, 1989b) sur les données de expérimentales de (Ross, 1958). 153
4.5 Valeurs de paramètres matériaux optimisés par (Bazant et al., 1997b) sur les données de expérimentales de (L'Hermite et al., 1965). 154

A.1 Formule de quadrature Gauss-Hermite en 1-D. ξ_k et w_k sont les nœuds et les poids de la quadrature. La formule de quadrature est notée par convention $E^q_{D,m}$, où D est la dimension de l'espace de configuration, m est la précision algébrique de la quadrature et q est le nombre de nœuds de la quadrature. 215
A.2 Formule de quadrature de Gauss-Hermite en 2-D. $\boldsymbol{\xi}_k$ et w_k sont les nœuds et les poids de la quadrature. La formule de quadrature est notée par convention $E^q_{D,m}$, où D est la dimension de l'espace de configuration, m est la précision algébrique de la quadrature et q est le nombre de nœuds de la quadrature. Les groupes représentent les classes de symétrie et q_i est le nombre de nœuds de la quadrature par groupe. 216
A.3 Formule de quadrature de Gauss-Hermite en 3-D. $\boldsymbol{\xi}_k$ et w_k sont les nœuds et les poids de la quadrature. La formule de quadrature est notée par convention $E^q_{D,m}$, où D est la dimension de l'espace de configuration, m est la précision algébrique de la quadrature et q est le nombre de nœuds de la quadrature. Les groupes représentent les classes de symétrie et q_i est le nombre de nœuds de la quadrature par groupe. 217

Introduction générale

Contexte de la thèse

Dans le cadre de sa mission de maître d'ouvrages exploitant un parc de production d'électricité, EDF doit s'assurer de la pérennité, de la fiabilité et de la sûreté de ses installations. Pour cela, EDF R&D met en place des outils et des méthodes permettant de mieux estimer le comportement à long terme des ouvrages en béton. Ceux-ci sont sujets à de multiples phénomènes de dégradation induits par les composants du béton lui-même ainsi que par son environnement.

Dans le domaine du génie civil, afin de bien gérer les ouvrages en exploitation et de mieux concevoir les nouveaux, le comportement différé (retraits et fluages) du béton est un des sujets de recherche de première importance. En effet, ce phénomène apparaît dans toutes les structures en béton et il crée des déformations différées potentiellement considérables dans le béton et peut réduire la capacité portante de la structure, ou le cas échéant l'effort de précontrainte, au cours du temps.

Depuis de nombreuses années, différentes études rapportées dans la littérature témoignent de progrès dans ce domaine. Les études partent du principe de la décomposition de la déformation différée en quatre composantes : retrait endogène, retrait de dessiccation, fluage propre, fluage de dessiccation. L'approche souvent utilisée dans les études consiste à se baser sur l'expérimentation et à établir, à partir des résultats d'essais, des modèles empiriques de comportement du béton. Dans une large mesure, ceux-ci sont limités à la reproduction des essais et ne permettent pas la compréhension des phénomènes physiques et mécaniques associés, qui ont lieu à l'échelle de la microstructure. De plus, cette approche rencontre une grande difficulté dans la résolution d'une question majeure en suspens : « l'impact des phénomènes hydriques sur les déformations différées du béton ». La difficulté réside principalement dans le fait que les essais en dessiccation ne peuvent s'affranchir de l'effet structurel résultant d'un état hydrique non uniforme.

Par ailleurs, il a été constaté récemment que la décomposition additive, empirique et classiquement adoptée jusqu'à maintenant, montre ses limites. En effet, il y a des interactions entre les phénomènes. Dans la littérature, des modèles unifiés commencent à apparaître pour modéliser le fluage et le retrait, mais ceux-ci sont actuellement limités par la complexité des phénomènes au niveau microscopique et font appel généralement à des modèles viscoélastiques linéaires simples pour des idéalisations de la morphologie de la microstructure.

Face à ces difficultés, les approches de modélisation micromécanique et multi échelle, malgré leur complexité, deviennent nécessaires pour proposer des modèles de fluage basés sur une compréhension des couplages multi physiques et applicables à des situations plus générales que les conditions d'essai.

Objectif de la thèse

L'objectif de la thèse est d'élaborer une approche micromécanique permettant de modéliser de manière unifiée le retrait et le fluage dans les matériaux cimentaires. Pour cela, l'étude se focalise sur l'échelle du gel de silicate de calcium hydraté (C-S-H) où les mécanismes élémentaires des phénomènes macroscopiques (fluage et retrait) du béton, s'opèrent. Dans le cadre de cette thèse, ceux-ci incluent :

— les glissements visqueux des particules de C-S-H dépendant de la microprécontrainte dans les nanopores où siège de l'adsorption gênée,

— le processus d'hydratation des grains anhydres responsable du comportement vieillissant du béton à court terme,

— les transferts d'eau au sein de l'espace poreux se traduisant en accélération/décélération de l'hydratation, en relaxation de la microprécontrainte et en chargement mécanique induit lors des processus de séchage/humidification.

Méthodologie de la thèse

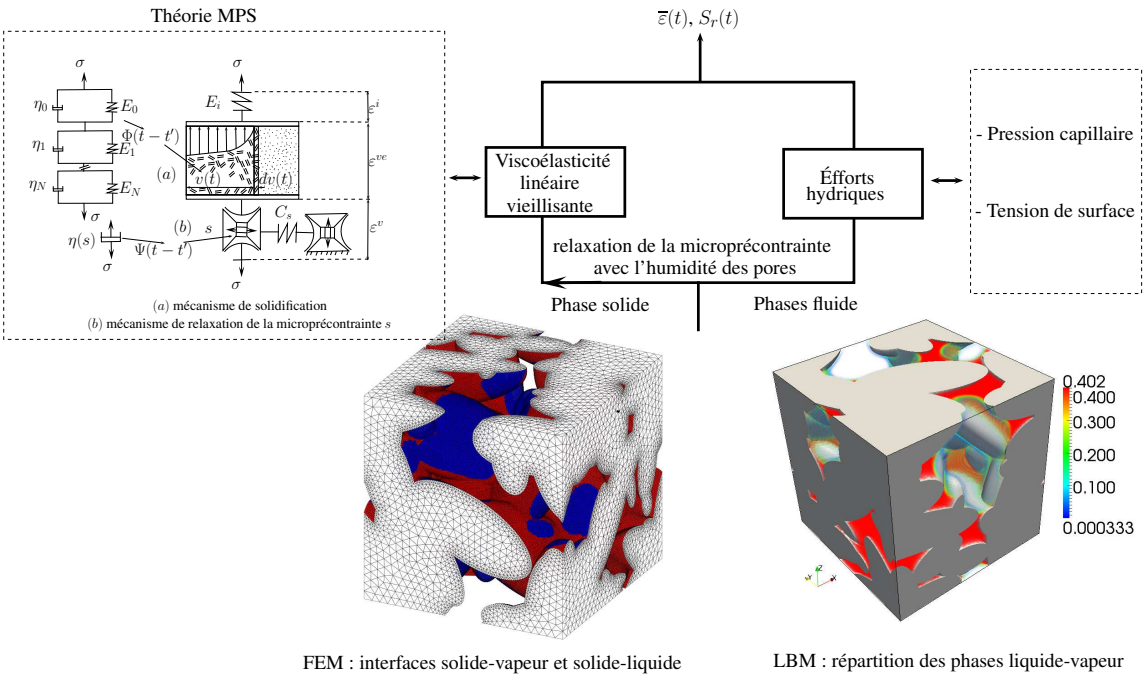


Fig 1 – Schématisation de la méthodologie de modélisation micromécanique unifiée des phénomènes de fluage et de retrait à l'échelle du gel de C-S-H.

.

La méthodologie mise en œuvre dans cette thèse vise à modéliser de manière unifiée, dans

un cadre d'homogénéisation numérique, l'ensemble des mécanismes cités en objectif, dans le but de construire une équation constitutive poromécanique incorporant toute l'information microscopique. La principale difficulté dans la mise en œuvre de cette approche réside dans le développement des outils numériques. C'est ainsi que cette thèse développe l'ensemble des composants, allant de la mécanique des fluides diphasiques à l'échelle du réseau poreux pour simuler les états d'équilibre thermodynamique pendant les processus de séchage/humidification, en passant par le traitement particulier associé à l'interface solide-fluide, au modèle de comportement viscoélastique vieillissant modélisant les mécanismes des déformations différées. En raison de cette difficulté, la thèse se concentre plus sur les aspects liés au dévéloppement de ces outils, et moins sur l'analyse physique des résultats de la méthodologie. Comme illustré, sur la Fig. 1, les composants développés au cours de cette thèse sont les suivants :

— Un composant s'appuyant sur la méthode de lattice Boltzmann pour la simulation des fluides diphasiques, à l'échelle du réseau poreux.
— Un composant générant à partir d'un maillage d'une microstructure poreuse à morphologie quelconque et de la répartition locale des phases fluide dans le réseau, la détection des interfaces solide-liquide et solide-vapeur.
— La théorie de la microprécontrainte-solidification (MPS) pour simuler les mécanismes des déformations différées dans la phase solide des microstructures poreuses.

Pour décrire en détail la méthodologie présentée en Fig. 1, et montrer les premières applications de celle-ci la thèse s'organise en trois partie. La première partie contenant le chapitre 1 est consacrée à une étude bibliographique sur les phénomènes de fluage et de retrait, la seconde composée des chapitres 2 à 4 est destinée à la description de la mise en œuvre de la méthodologie et enfin la dernière partie comportant les chapitres 5 et 6 présente les premières applications de la méthodologie.

Première partie

Les phénomènes de fluage et de retrait dans les matériaux cimentaires

Chapitre 1

Observations expérimentales, microstructure et mécanismes élémentaires

Sommaire

1.1 Introduction **8**

1.2 Observations expérimentales **8**

1.2.1 Les déformations de retrait endogène et de dessiccation 9

1.2.1.1 Observations faites sur des échantillons de béton 9

1.2.1.2 Observations faites sur des échantillons de pâte de ciment 10

1.2.2 La déformation de fluage propre 10

1.2.2.1 Observations faites sur des échantillons de béton 11

1.2.2.2 Observations faites sur des échantillons de pâte de ciment 11

1.2.3 La déformation de fluage de dessication 12

1.2.3.1 Observations faites sur des échantillons de béton 12

1.2.3.2 Observations faites sur des échantillons de pâte de ciment 13

1.3 Microstructure des bétons **13**

1.3.1 Description de la réaction d'hydratation du ciment 13

1.3.2 Description des hydrates 14

1.3.3 Description de la pâte de ciment 16

1.3.4 Description du mortier et du béton 17

1.3.5 Description de la porosité et du rôle de l'eau 18

1.3.6 Vision multi échelle de la microstructure des bétons 20

1.4 Mécanismes des déformations différées **23**

1.4.1 Pendant le fluage propre 23

1.4.2 Pendant le retrait endogène ou de dessiccation 27

1.4.3 Pendant le fluage de dessiccation 29

1.5 Conclusion **30**

1.5.1 Les tendances expérimentales 31

1.5.2 Les mécanismes retenus 35

1.1 Introduction

Le fluage et retrait du béton, et particulièrement leur dépendance de l'âge au chargement initial et de la teneur en eau du matériaux est un sujet de recherche de première importance depuis de nombreuses années. Les recherches sur le fluage et le retrait du béton ont permis d'accumuler une quantité très importante d'observations expérimentales, qui sont interprétées pour comprendre les mécanismes élémentaires en jeu dans le but de proposer des modèles de comportement. Néanmoins, si les caractéristiques du fluage et du retrait semblent faire consensus, ce n'est pas le cas des mécanismes élémentaires qui pourraient les expliquer. De nombreux aspects rendent difficiles la compréhension de ces phénomènes, la microstructure multi échelle du béton, la très grande variété des tailles de pore du béton, les interactions entre retrait et fluage à travers l'eau sous leurs différentes formes dans la microstructure. Dans la première partie de ce chapitre, nous présentons les caractéristiques observées des phénomènes de retrait et de fluage. Dans la seconde partie, après un bref rappel de la microsctructure multi échelle des bétons nous faisons un tour d'horizon et discutons les mécanismes élémentaires proposés dans la littérature pour expliquer les tendances expérimentales observées. Enfin, nous présentons pour chacune des observations expérimentales les mécanismes qui seront retenus, comme base de construction de nos modélisations dans les chapitres suivants.

1.2 Observations expérimentales

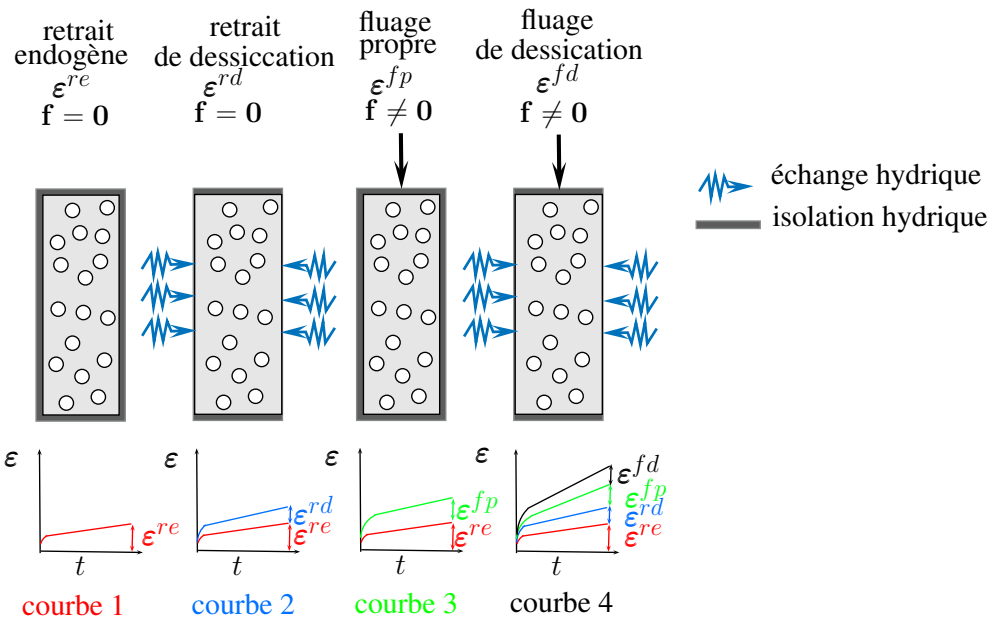


Fig 1.1 – Les contributions des déformations différées des bétons

Les déformations différées des bétons, mortiers ou pâtes de ciment matures dans la littérature sont systématiquement séparées en :

1. déformation de retrait endogène $\boldsymbol{\varepsilon}^{re}$
2. déformation de retrait de dessication $\boldsymbol{\varepsilon}^{rd}$
3. déformation de fluage propre $\boldsymbol{\varepsilon}^{fp}$
4. déformation de fluage de dessication $\boldsymbol{\varepsilon}^{fd}$

La Fig. 1.1 présente les essais dans la littérature pour identifier chacune des précédentes contributions des déformations différées. Dans la suite, nous décrivons et faisons une analyse des tendances expérimentales observées pour chacune de ces contributions.

1.2.1 Les déformations de retrait endogène et de dessiccation

La déformation de retrait endogène est définie comme la déformation différée obtenue en condition d'isolation hydrique (voir la courbe 1 sur la Fig. 1.1) en l'absence d'effort mécanique extérieur $\mathbf{f} = \mathbf{0}$. La déformation de retrait de dessiccation quand à elle correspond au surplus de déformation différée obtenue sous l'effet du séchage (échange hydrique avec l'environnement) aussi en l'absence de chargement mécanique extérieur $\mathbf{f} = \mathbf{0}$ (voir la courbe 2 sur la Fig. 1.1). Les déformations de retrait endogène et de dessiccation sont respectivement la conséquence des efforts hydriques induits par l'auto-dessiccation résultant de l'hydratation et la dessiccation causée par l'équilibrage hydrique entre l'éprouvette et son environnement.

1.2.1.1 Observations faites sur des échantillons de béton

Les observations ci-dessous concernent des essais effectués sur des éprouvettes de béton.

(Acker and Ulm, 2001), les déformations de retrait endogène et de dessiccation se caractérisent par une lente réduction de volume de l'éprouvette et présentent la même cinétique de déformation. Cette observation est en accord avec la précédente explication, selon laquelle les deux déformations proviennent du même type d'efforts hydriques.

(Granger et al., 1997), le retrait n'est pas strictement proportionnel ni à l'humidité relative ni à la teneur en eau massique. En effet une forte non linéarité est observée au début et à la fin du processus de séchage.

(Granger, 1996), le retrait présente une cinétique similaire à celle du fluage mais avec un caractère asymptotique. Cette observation remet en question la décomposition additive systématique utilisée pour interpréter les déformations différées et ainsi les approches phénoménologiques de construction de loi de comportement empirique qui en découlent.

(Brooks, 2005), contrairement au retrait qui a une cinétique d'évolution en deux phases, une augmentation rapide de la déformation puis une évolution plutôt stationnaire, la déformation de gonflement en humidification est d'abord stationnaire puis augmente rapidement. Cette observation pourrait être expliquée par les effets de goulot et souligne l'importance du sens de variation de l'humidité relative sur la réponse mécanique du béton.

(Hansen, 1960a,b), la vitesse de séchage de deux éprouvettes, l'une sans chargement mécanique et l'autre avec un chargement mécanique, est presque identique. Ainsi le chargement

mécanique a une influence négligeable sur les phénomènes hydriques et donc les théories de consolidation visant à expliquer les déformations volumiques peuvent être écartées. Cette observation est aussi, à la base des approches de modélisation supposant un couplage faible entre le séchage et la réponse mécanique du béton.

1.2.1.2 Observations faites sur des échantillons de pâte de ciment

Les mesures de retrait sur des échantillons de béton sont parasitées par la microfissuration des éprouvettes du fait d'une dessiccation hétérogène le long de l'épaisseur des éprouvettes. On a effet un séchage très rapide en peau et un séchage très lent à cœur. Cette microfissuration réduit fortement le retrait macroscopique en relaxant les contraintes de traction dues à la dessiccation. Ainsi, pour limiter les problèmes de mesure lié à la microfissuration et dans le but d'approfondir les observations sur le retrait, des essais expérimentaux ont été réalisés sur des échantillons de très faible épaisseur garantissant homogénéité du séchage dans l'épaisseur des éprouvettes. Le béton ne permettant pas la confection d'éprouvettes minces du fait de la taille des granulats, les essais ont été réalisés sur des pâtes de ciment. En plus, les échantillons minces de pâte de ciment permettant un équilibre hydrique rapide, ils ont l'avantage de diminuer considérablement la durée des essais et sont qualitativement représentatifs du comportement en retrait du béton. La similitude de comportement entre béton et pâte de ciment s'explique partie par le fait que le comportement viscoélastique du béton provient de celui de la pâte de ciment. Tandis que, la présence des granulats présentant un comportement élastique et rigide en comparaison avec celui de la pâte de ciment, a pour effet de réduire la déformation de la pâte de ciment en l'absence de fissuration. Les observations ci-dessous concernent donc des essais effectués sur des éprouvettes minces de pâte de ciment.

(Day et al., 1984), souligne que les non linéarités entre le retrait et l'humidité ou la teneur en eau massique observées par (Granger et al., 1997) sur les bétons au début et à la fin du séchage sont probablement liées à la vitesse du séchage. En effet, la vidange est rapide au début lorsque le réseau poreux contient beaucoup d'eau libre, à la fin lorsque qu'on a que de la vapeur et lent aux degré de saturation intermédiaires. Alors que le retrait tend à être linéaire lorsque le séchage est lent et fortement non linéaire lorsqu'il est rapide.

(Parrott and Young, 1982), la déformation de retrait est partiellement irréversible en réhumidification même en l'absence de fissuration. Cette observation pourrait être partiellement expliquée par les effets de goulot mais laisse penser qu'il existe un mécanisme à l'échelle de la nanostructure responsable de cette irréversibilité.

1.2.2 La déformation de fluage propre

La déformation de fluage propre est définie comme la déformation différée obtenue en condition d'isolation hydrique (voir la courbe 3 sur la Fig. 1.1) dans la cadre d'un essai sous un chargement mécanique $\mathbf{f} = \mathbf{cst}$ maintenu constant dans le temps. Le fluage propre correspond à

la déformation différée supplémentaire obtenue après avoir retranché la déformation de retrait endogène.

1.2.2.1 Observations faites sur des échantillons de béton

Les observations ci-dessous concernent des essais effectués sur des éprouvettes de béton.

(Ulm and Acker, 1988), en compression uniaxiale le fluage propre présente une double cinétique, dite "***court terme***" et "***long terme***". Cette conclusion a été faite suite à l'observation de plusieurs courbes de vitesse de fluage en fonction du temps et ce pour plusieurs bétons chargés à des âges différents. A court terme la vitesse de fluage diminue rapidement puis une diminution lente et identique à long terme pour tous les bétons d'âges différents est observée.

(Rolls, 1964), pour des chargement en compression uniaxiale proche de la résistance mécanique, le fluage propre devient non linéaire. Cette non linéarité commence à être observée au-delà de 35% de la résistance en compression.

(Bryant and Vadhanavikkit, 1987) souligne, en s'appuyant sur des essais en compression uniaxiale, la dépendance de la déformation de fluage à l'âge du matériau au chargement. Cette sensibilité de la déformation de fluage à l'âge du béton se caractérise par une diminution de la déformation d'autant plus que le béton est vieux. L'effet du vieillissement du béton sur le fluage se manifeste pendant la phase d'hydratation par une augmentation de la viscosité macroscopique du béton avec le temps et un accroissement de sa rigidité. En fin d'hydratation, l'effet de vieillissement persiste au travers de l'augmentation de la viscosité macroscopique du béton avec le temps pour une rigidité maintenue constante. Par ailleurs, ces essais mettent en évidence l'irréversibilité du fluage propre en recouvrance.

(Acker and Ulm, 2001), l'amplitude de la déformation de fluage propre est fortement dépendante de la teneur en eau interne de l'éprouvette de béton. A humidité relative et contrainte de compression constante, le béton contenant moins d'eau évaporable subit un fluage plus faible.

1.2.2.2 Observations faites sur des échantillons de pâte de ciment

Afin d'approfondir la question du rôle de l'eau dans le processus du fluage propre certains expérimentateurs ont effectué pour les mêmes raisons que dans le cas du retrait, des essais sur des pâtes de ciment minces. Les observations ci-dessous concernent donc des essais effectués sur des éprouvettes minces de pâte de ciment.

(Tamtsia and Beaudoin, 2000), confirme à partir d'essais en compression sur des pâtes de ciment minces l'observation de (Acker and Ulm, 2001) sur la dépendance du fluage propre à l'humidité relative. Cependant, il refute l'hypothèse de fluage nul à humidité relative nulle car il observe autant ou un plus grand fluage pour des échantillons de pâte de ciment séchés comparé à des échantillons saturés. Il souligne aussi que les échantillons de pâtes de ciment séchés à une humidité intermédiaire puis re-saturés ont un fluage plus significatif que les échantillons saturés initialement. Ces observations montrent que les mouvements d'eau dans la porosité jouent un rôle important dans le processus de fluage et ne doivent donc pas être négligés.

(Bernard et al., 2003), dans le but de comprendre le comportement en compression multi axial du fluage propre ces auteurs se sont intéressés à des essais en compression volumique et déviatorique sur des pâtes de ciment et mortier à calcaire lixivié. Les observations faites par (Bernard et al., 2003) sont donc à prendre avec un certain recul puisse qu'elles sont faites pour des matériaux cimentaires beaucoup plus poreux que les normaux. Néanmoins, sous l'hypothèse que seul le Silicate de Calcium Hydraté (C-S-H) soit visqueux ces matériaux sont représentatifs de la pâte de ciment et du béton. A partir donc des essais décrit ci-dessus (Bernard et al., 2003) tirent les conclusions suivantes :

— Le fluage propre présente bien une double cinétique comme précédemment souligné par (Ulm and Acker, 1988). Selon lui le fluage à court-terme est caractérisé par une variation de volume tandis que le fluage à long-terme se produit à volume constant pour un état de fissuration stabilisé.

— Le fluage à court-terme peut avoir un comportement dilatant. Cet aspect de potentiel gonflement de l'éprouvette en compression multi-axial est lié au développement de micro-fissuration induit par la porosité trop importante des matériaux. Ce comportement ne peut donc être transposé à la pâte de ciment et au béton.

— Le coefficient de Poisson en fluage n'est pas constant. Comme dans l'observation précédente nous soupçonnons fortement que ce soit la micro-fissuration prépondérante dans ces essais du fait de la porosité trop importante qui induit cet effet de cœfficient de Poisson variable en fluage.

1.2.3 La déformation de fluage de dessication

Le fluage de dessiccation peut être défini comme la déformation différée additionnelle que l'on obtient en plus des déformations de retrait et de fluage propre lorsqu'une éprouvette est soumise à un chargement mécanique $\mathbf{f} = \mathbf{cst}$ maintenu constant dans le temps et à un séchage simultané (voir la courbe 4 sur la Fig. 1.1).

1.2.3.1 Observations faites sur des échantillons de béton

Les observations ci-dessous concernent des essais effectués sur des éprouvettes de béton.

(Pickett, 1942), contrairement à ce qui a été souligné par (Acker and Ulm, 2001) en ce qui concerne la réduction de la déformation du fluage propre en compression pour de faibles teneurs en eau, l'effet Pickett (déformation de fluage de dessiccation) réfère à une augmentation de la déformation du fluage aussi bien en séchage qu'en humidification. L'effet Picket est aussi observé en traction (Kolver, 1999).

(Brooks, 2005), les cinétiques de déformation de fluage pendant le séchage et pendant l'humidification, comme dans le cas du retrait et celui du gonflement, sont inverses. En effet, la vitesse de fluage en milieu séchant diminue rapidement et se stabilise à long terme tandis que celui du fluage en milieu humidifiant est d'abord faible et augmente ensuite considérablement à

long terme. Aussi, selon (Brooks, 2005) la recouvrance de fluage est plus importante en milieu humidifiant comparée à celle observée en milieu séchant et ce, aussi bien à court qu'à long terme.

1.2.3.2 Observations faites sur des échantillons de pâte de ciment

Lors de la mesure expérimentale du fluage en dessiccation, l'hypothèse additive des déformations de retrait et de fluage est systématiquement appliquée. Ainsi, après soustraction du retrait de dessiccation de la déformation totale de l'éprouvette chargée et séchée, on a, en plus de la déformation de fluage, une déformation de fissuration de l'éprouvette libre dont il faut tenir compte. Les problèmes de durée et de fissuration liés aux essais de fluage séchant sur les éprouvettes de béton , qui sont complexes à interpréter, ont réorienté la recherche expérimentale vers le fluage en dessiccation des pâtes de ciment. De tels essais étant qualitatifs de la réponse en fluage séchant du béton permettent aux expérimentateurs de mettre l'accent sur la part intrinsèque de la déformation de fluage de dessiccation et ainsi de faire la distinction avec la déformation supplémentaire induite par l'effet de structure (fissuration). Nous rappelons que la pâte de ciment mince assure des échanges rapides d'humidité avec l'ambiance, ce qui minimise les fissurations et les contraintes résiduelles. Ainsi, sur des éprouvette de pâte de ciment mince, (Bazant et al., 1976) confirment l'effet Pickett et rajoute que la recouvrance de fluage est aussi augmentée en séchage et en humidification. Enfin, ils observent que l'accélération du fluage due au séchage est retardée comparée à la perte de masse d'eau de l'éprouvette.

1.3 Microstructure des bétons

Dans cette section nous décrivons la microstructure complexe du béton afin d'en déduire une vision multi-échelle de celle-ci. Cette vision de la microstructure du béton nous permettra de discuter les mécanismes élémentaires susceptibles d'expliquer les tendances macroscopiques précédemment décrites.

1.3.1 Description de la réaction d'hydratation du ciment

Le béton est une mixture de granulats, d'eau et de ciment anhydre. Lorsque le ciment anhydre ou clinker et l'eau sont mélangés, la réaction d'hydratation s'initie et les hydrates précipitent. Le clinker ordinaire est essentiellement constitué :

— de silicate tricalcique C_3S,
— de silicate dicalcique C_2S,
— d'aluminate tricalcique C_3A,
— d'aluminoferrite tetracalcique C_4AF,
— et de gypse.

Ces constituants faisant du ciment un liant hydraulique, ont la propriété de se transformer par hydratation. Au contact de l'eau, ces composés, dits “anhydres“, se dissolvent et régissent

en solution pour former des hydrates : Les silicates de calcium hydratés (C-S-H), les cristaux de portlandite (CH) pour les silicates, C_2AH_8, C_3AH_6 et C_4AH_{13} pour les aluminates.

Les C-S-H sont les principaux hydrates (en volume) formés suivis de la portlandite lors de l'hydratation des ciments Portland. L'espace complémentaire au domaine occupé par les grains anhydres et les hydrates est formé des pores capillaires, initialement remplis d'eau. Les proportions du mélange initial sont caractérisées par le rapport $\frac{e}{c}$ entre la masse d'eau et la masse de ciment.

L'hydratation du ciment se déroule sur une échelle de temps relativement étendue et ne se stabilise qu'au bout de plusieurs mois. On caractérise l'avancement de la réaction par le degré d'hydratation, égal au rapport entre le volume d'anhydres déjà hydratés et le volume d'anhydres initial.

En ce qui concerne le C-S-H en particulier, on en retrouve deux types différents dans la pâte de ciment hydratée qui se différencient par leur densité respective. Le premier qui se forme est le C-S-H FD dit de faible densité caractérisé par une plus grande porosité. Le second, qui est le C-S-H HD dit de haute densité, se forme ensuite par un confinement plus important et une faible accessibilité de l'eau au cours de l'hydratation.

La phase d'hydratation ou de vieillissement à court terme est caractérisée par une dépendance de la viscosité macroscopique de la pâte de ciment ou du béton au temps et par une augmentation de la rigidité de celle-ci. La pâte de ciment durcie en fin d'hydratation après environ une année à température ambiante connaît une autre phase de vieillissement dite de long terme qui est caractérisée seulement par la dépendance de sa viscosité au temps.

1.3.2 Description des hydrates

Dans cette section nous nous intéressons uniquement aux C-S-H qui sont les hydrates majoritaires dans la pâte de ciment. Par ailleurs, il a été montré par des essais de nanoindentation (Vandamme and Ulm, 2013) que ce sont les seules hydrates qui présentent un fluage important. La portlandite CH pouvant être considérée comme élastique joue un rôle d'inclusion rigide dans une matrice de C-S-H au même titre que les granulats à une échelle au dessus.

Dans la littérature on rencontre deux écoles selon la forme élémentaire des C-S-H : feuillet ou sphère. (Jennings, 2004), propose un modèle de C-S-H globulaire, dont la sphère unité a $1.1nm$ de rayon et le globule ou l'assemblage de C-S-H a $2.8nm$ de rayon (Fig. 1.2).

(Feldman and Sereda, 1968) proposent un modèle morphologique de C-S-H de type feuillet (Fig. 1.3). Par ailleurs, des observations expérimentales obtenues par microscopie électronique soulignent que le gel de C-S-H est composé de feuillets et de fibres minces (Rodriguez et al., 2014). La Fig. 1.4 souligne que la morphologie des C-S-H depend du rapport calcium sur silice $\frac{Ca}{Si}$. Elle est plutôt de type feuillet pour de faibles rapports et de type fibre pour de grands rapports $\frac{Ca}{Si}$.

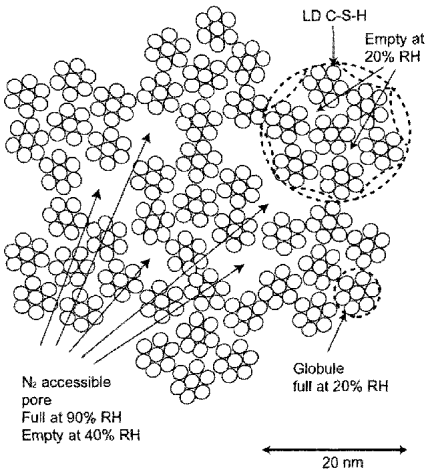


Fig 1.2 – Représentation schématique de la structure globulaire et colloidale des C-S-H (Jennings, 2004)

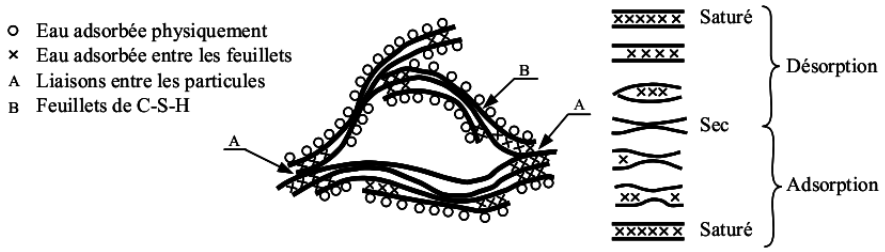


Fig 1.3 – Réprésenation schematique de la structure en feuillets des C-S-H (Feldman and Sereda, 1968).

Nous retiendrons donc la morphologie en feuillet des C-S-H pour la suite. Pour ce faire nous adoptons le modèle d'organisation structurel multi-échelle des C-S-H proposé par (Minet, 2003). La Fig. 1.5 illustre bien le modèle morphologie proposé.

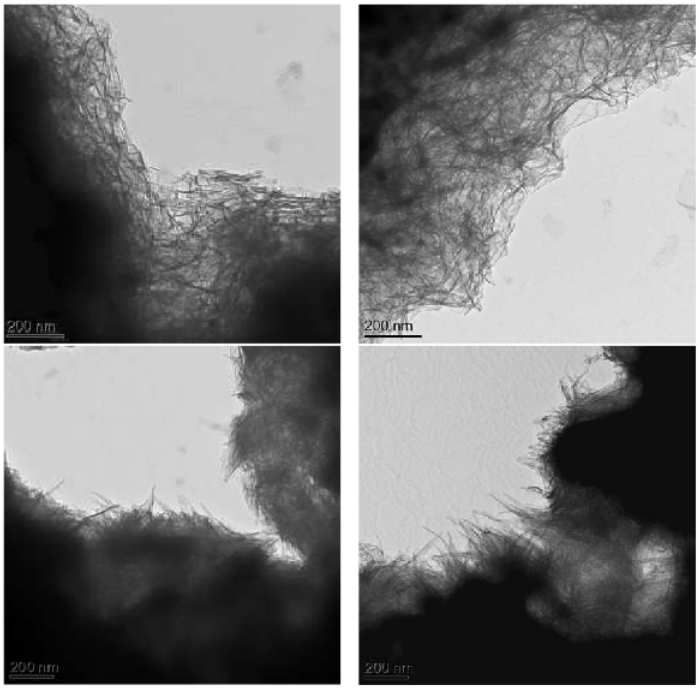


Fig 1.4 – Micrographes TEM d'échantillons de C-S-H fabriqués par hydratation de C_3S à [CaO] = $12mmol/l$ en fin de la periode d'accélération (haut gauche), de décélération (haut droite) pendant l'hydration, on observe une morphologie de type feuillet ($\frac{Ca}{Si} \sim 1.34$). De même en ce qui concerne les mêmes phases de la cinétique d'hydratation pour [CaO] = $27mmol/l$ (bas gauche et droite), on observe cette fois une morphologie de type fibre ($\frac{Ca}{Si} \sim 1.86$), (Rodriguez et al., 2014).

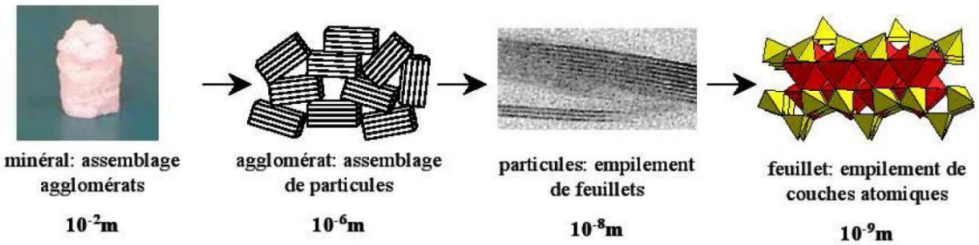


Fig 1.5 – Modèle multi échelle de la microstructure des C-S-H partant de feuillets élémentaires (Minet, 2003).

1.3.3 Description de la pâte de ciment

La Fig. 1.6 présente une micrographie de la pâte de ciment. On y souligne les hydrates principaux (silicates de calcium hydratés C-S-H, portlandite CH), les grains anhydres non hydratés et la porosité capillaire obtenus par hydratation d'un ciment portland.

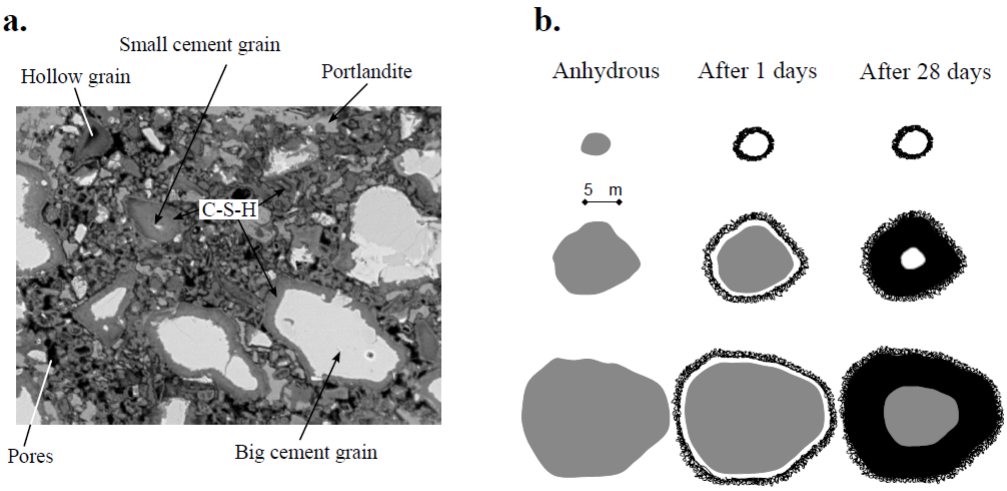


Fig 1.6 – (a) Micrographie SEM BSE d'une pâte de ciment Portland à 7 jours d'hydratation.(b) illustration schematique de la formation de coques d'hydrates selon la taille des grains (Scrivener, 2004). En particulier sur la figure (b), l'espace poreux est en blanc et selon la taille des grains les auteurs mettent en exergue la possibilité de formation d'une porosité après hydrataion des grains anhydres de petites tailles.

La taille d'un volume élémentaire représentatif est de l'ordre de 200 μm et il contient approximativement :

— 50% de silicates de calcium hydratés C-S-H,
— 15% de portlandite CH,
— 7% d'aluminates AF,
— et les grains anhydres restant selon le rapport eau sur ciment $\frac{e}{c}$ et la durée d'hydratation (Pichler and Lackner, 2008).

1.3.4 Description du mortier et du béton

Une échelle au dessus de la pâte de ciment est celle des mortiers caractérisée par la pâte de ciment comme matrice et les grains de sable ($0.1mm$ à $5mm$) jouant le rôle d'inclusions rigides. En ce qui concerne le béton, le mortier à son tour sert de matrice avec des grains de gravier ($1mm$ à $25mm$) comme inclusions quasiment rigides.
Aux échelles du mortier ou du béton, on observe en plus des auréoles de transition (ITZ) entre la matrice "pâte de ciment" et les granulats, qui influencent principalement la résistance et les propriétés de transport du mortier ou du béton (Pichler and Lackner, 2008).
A l'échelle du mortier cette interphase (ITZ) a une épaisseur comprise entre $15\mu m$ et $40\mu m$, tandis qu'à l'échelle du béton elle peut être négligée car sa fraction volumique est négligeable

et elle impacte peu les propriétés effectives du béton (Stora, 2007).

1.3.5 Description de la porosité et du rôle de l'eau

Que savons-nous sur la structure poreuse des matériaux cimentaires ?

De la structure de la pâte de ciment nous pouvons dégager une porosité capillaire qui correspond à l'espace entre les agrégats de C-S-H qui eux-mêmes contiennent une porosité de gel due à l'espace entre les particules, lamelles et feuillets (Feldman and Sereda, 1970). La porosité capillaire est contrôlée par le pourcentage d'hydratation et par le rapport eau sur ciment $\frac{e}{c}$ (Jennings, 2004). En effet, cette porosité capillaire résulte du déficit de la balance volumique des réactions d'hydratation (Le Chatelier, 1900) ; de ce fait elle se trouve aussi être partiellement non saturée. (Winslow, 1985) postule une structure fractale des pores capillaires ($20nm$ à $10\mu m$) et la paroi de ces pores est essentiellement constituée de C-S-H ayant aussi une structure poreuse fractale (centrée sur $17nm$). (Jennings, 2004) va plus loin en proposant une classification simplifiée des pores :

— les pores capillaires correspondant à l'espace entre les agrégats de C-S-H ($> 75nm$) ;
— les gros pores de gel ou mésopores qu'on retrouve dans les agrégats de C-S-H FD ($2nm$ ou $5nm$ à $75nm$) ;
— les petits pores de gel ou micropores qu'on retrouve principalement dans les agrégats de C-S-H HD mais aussi dans les C-S-H FD ($1.2nm$ ou $2nm$ à $5nm$) ;
— Enfin la porosité intra-unité de C-S-H ($< 0.5nm$).

La porosité de gel dans les agrégats de C-S-H HD est de 26% et de 36% dans les agrégats de C-S-H FD et elle contient une plage de pore de $1nm$ à $0.2\mu m$ tandis que les pores capillaires s'étalent sur une plage de $0.2\mu m$ à $10\mu m$. (Sanahuja, 2008), propose une taille de pores des C-S-H HD de l'ordre de $5nm$ à $60nm$, ce qui correspond grossièrement aux mésopores de gel, tandis que la phase de C-S-H FD renferme à la fois les mésopores de gel et les pores capillaires s'étalant de $50nm$ à $20\mu m$. Selon (Bazant et al., 1997a), les pores capillaires sont définis comme les pores plus larges que $1\mu m$, et la porosité de gel sub-capillaire varie de $0.263nm$ (diamètre effectif de la molécule d'eau) à environ $1\mu m$. La porosité de gel peut être scindée en deux : les mésopores et les micropores de gel. Pour (Gmira et al., 2004), la mésoporosité correspond à l'espace interparticules et la microporosité subnanométrique contenant des liaisons chimiques est celle qui est intraparticulaire. (Jennings, 2004) souligne aussi la présence de liaisons chimiques dans les micropores. Pour lui outre l'accroissement du pourcentage d'hydratation, le vieillissement est le processus d'augmentation de ces liaisons (polymerisation) entre les cristaux de C-S-H, rendant la pâte de ciment plus rigide, plus résistante et plus dense. Tandis que pour (Bazant et al., 1997a), outre l'hydratation et la polymerisation, il y a aussi un vieillissement à moyen terme qui diffère de la polymérisation. Il s'agit de la relaxation d'une microprécontrainte portée par les liaisons atomique dans les micropores. (Granger, 1996), considère qu'en outre, il faut tenir compte de la porosité de l'ITZ qui se trouve être plus importante que celle de la pâte de ciment en raison d'un effet de bord et du phénomène de ressuage interne qui accompagne la

sédimentation des granulats. L'ITZ est un lieu privilégié d'accumulation de l'humidité.

La structure poreuse du béton étant plus ou moins connue, que pouvons nous dire à propos de l'eau contenue dans celle-ci ?

La question concernant les différentes formes de l'eau dans les pâtes de ciments, a été d'un intérêt particulier pour plusieurs auteurs. Il convient de rappeler que tous les matériaux cimentaires sont en condition "non saturée" du fait du déficit de la balance volumique des réactions d'hydratation (Le Chatelier, 1900). (Granger, 1996; Tamtsia and Beaudoin, 2000), proposent une classification simplifiée de l'eau dans la pâte de ciment :

— L'eau porale ou libre (capillaire) dans les vides capillaires et de gel, à une distance d'au moins $1nm$ à $2nm$ des surfaces solides et alors hors de portée des forces d'adhérence de type Van der waals. Ainsi, cette eau occupe les pores capillaires et les mésopores de gel suffisamment grands pour qu'elle circule hors de portée des forces de surfaces. L'eau libre résiste aux tensions d'interfaces et transmet plusieurs mégapascal (MPa) de tensions à la matrice minérale (Acker, 2003) ;

— L'eau adsorbée sur les surfaces des agrégats de C-S-H à une épaisseur de couche variant de 1 à 5 molécules d'eau à saturation. On parle d'eau physisorbée car elle est liée aux forces électriques de type Van der Waals. Cette eau est sous l'influence des forces d'une surface solide dans les pores capillaires ou dans les mésopores de gel. Cependant dans les pores capillaires, certaines couches d'eau adsorbées sur les parois sont exposées à la vapeur et donc sujettes à la pression propagation, ce qui réduit la tension de surface entre le solide et la vapeur (Bazant et al., 1997a) ;

— L'eau adsorbée interparticulaire ou interlamellaire, c'est-à-dire l'eau confinée entre des surfaces de particules mutuellement adjacentes dans des espaces très étroits. Ce type d'eau est dite chimiquement liée en raison de la présence de liaisons chimiques dans les espaces restreints qu'elle occupe ;

— Enfin, l'eau zoelitique ou interfoliaire, qui est d'environ d'une épaisseur d'une molécule d'eau incorporée entre les feuillets de C-S-H. Une partie de cette eau se trouve être fortement liée au solide (chimie-sorption) et elle est définie comme eau hydroxylique.

Le séchage du béton se limite par définition à l'eau évaporable. L'eau non évaporable peut être définie comme l'eau résiduelle dans la structure correspondant à la valeur limite de la courbe de désorption à 0% d'humidité relative. Ainsi les précédentes classes d'eau peuvent être considérées comme suite :

— l'eau libre et physiquement sorbée comme eau évaporable,

— et l'eau chimiquement liée et chimiquement sorbée comme eau non évaporable.

Par ailleurs, à 100% d'humidité relative, les couches d'eau adsorbée étant d'une épaisseur de 5 molécules d'eau, il est légitime de penser que dans les pores de moins de 10 molécules d'eau, l'adsorption soit gênée. (Bazant et al., 1997a), postule en plus que ces zones d'adsorption gênée correspondent aux micropores de gel dans lesquels il y a des liaisons chimiques transversales. D'autre part, des pressions de disjonction sont initiées dans l'ensemble de la porosité de gel

par la répulsion entre les molécules d'eau adsorbée empêchant le rapprochement des couches solides, tandis que les ménisques dans les pores capillaires conduisent aux tensions de surface aux interfaces liquide-solide ayant tendance à contracter la matière (Wittmann, 1982). Ces pressions de disjonction provenant de force électrostatique qui sont à l'origine de la cohésion du béton et des pâtes de ciment malgré une continuité du réseau de liaisons iono-covalentes presque partout interrompue par des films d'eau d'épaisseur variable (Gmira et al., 2004). (Gmira et al., 2004), considèrent donc que les forces prédominantes dans les micropores de gel sont iono-covalente, impliquant des ions calcium et des molécules d'eau fortement localisées, alors que dans les mésopores de gel il y aurait des forces de corrélation ionique dues à des ions calcium mobiles au sein des films liquides.

En plus de la pression de disjonction, (Bazant et al., 1997a) souligne la présence de phénomènes supplémentaires tels que la pression d'accroissement des cristaux pendant l'hydratation qui agit similairement. Particulièrement dans les micropores (zone d'adsorption gênée et contenant des liaisons atomiques), la pression de disjonction et la pression d'accroissement sont équilibrées par des forces de tension, partiellement portées par le cadre solide autour des micropores et par les liaisons chimiques transversales. Ces forces de tensions reprises par les liaisons ont été présentées par (Bazant et al., 1997a) comme une microprécontrainte qui s'accumule pendant l'hydratation ou pendant le séchage. Il postule l'équilibre thermodynamique (égalité de potentiel chimique) entre l'eau des pores capillaires et celle des micropores puisque les distances de microdiffusion sont très courtes entre les micropores de gel et les pores capillaires adjacents, d'où un équilibrage quasi-instantanée de la pression de disjonction avec les variations des tensions capillaires et de surface.

1.3.6 Vision multi échelle de la microstructure des bétons

Dans cette section nous proposons notre vision multi échelle de la microstructure des bétons. Au vu des différentes caractéristiques de la porosité des bétons et de l'eau dans celle-ci, nous proposons une caractérisation simplifiée du réseau poreux et des efforts importants à prendre en compte dans les différentes phases de l'eau. Le Tab. 1.1 synthétise ainsi l'information sur la porosité et les forces prédominantes dans l'eau sous ses différentes formes dans les bétons.

Dans notre décomposition les pores allant de **60 nm** à **20 μm** sont appelés ***"macropores"***, ceux allant de **2.64 nm** à **60 nm** sont les ***"mésopores"*** et tous les pores de taille inférieure à **2.64 nm** sont les ***"micropores"***. Comme il est indiqué dans le Tab. 1.1 :

- les phénomènes capillaires sont prépondérants dans les macropores,
- les phénomènes de tension de surface et capillaire sont prépondérants dans les mésopores,
- et dans les micropores qui sont considéré comme saturés d'eau adsorbée gênées, la pression de disjonction et la ***"microprécontrainte"*** correspondant à la partie de la pression de disjonction reprise par les liaisons transverses sont les phénomènes prépondérants.

Catégorie de pores	Taille caractéristique	Catégorie d'eau	Type de force prédoninante
Macropores	$60\,nm\ -\ 20\,\mu m$	Libre ou capillaire mélange air-vapeur Physisorbée	1-Pression capillaire
Mésopores	$2.64\,nm\ -\ 60\,nm$	Libre ou capillaire mélange air-vapeur Physisorbée	1-Tension de surface 2- Pression capillaire
Micropores	$0.1\,nm\ -\ 2.64\,nm$	Physisorbée Chimisorbée Liaisons atomiques	1-Pression de disjonction 2-Microprécontrainte (effort repris par les liaisons)

Tab 1.1 – Porosité et l'eau dans la microstructure des bétons

L'épaisseur maximale d'adsorption libre sur une paroi porale est de l'ordre de 5 molécules d'eau soit $1.32\,nm$. Alors il est légitime de penser que l'adsorbtion dans les micropores soit gênée car il n'y a pas suffisamment d'espace pour la formation de la totalité des couches adsorbées sur les parois adjacentes des micropores. La pression de disjonction est la pression dans les films d'eau adsorbée sous l'influence des forces de surface imposée au fluide par le solide. (Bazant, 1972), en utilisant la thermodynamique de l'adsorption, montre que les pressions de disjonction peuvent atteindre des valeurs très importantes, par exemple dans un pore de deux molécules d'eau de largeur, la pression disjonction vaut $p_d = 174MPa$ à $h = 100\%$ d'humidité relative et pour une température de $25^{\circ}C$.

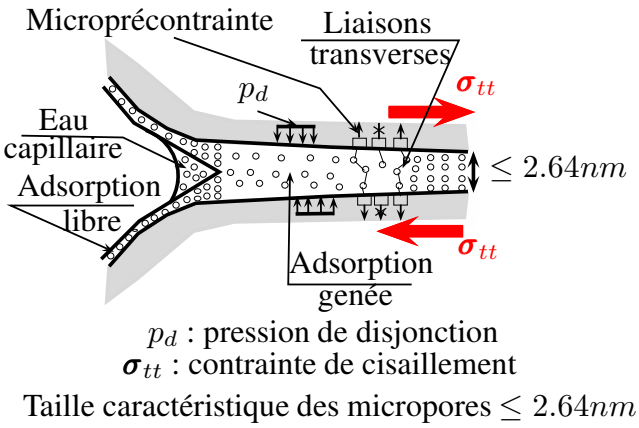


Fig 1.7 – Description schématique des micropores et des efforts qui y sont appliqués (inspirée par (Bazant et al., 1997a)).

Cette pression augmente avec la saturation et atteint sa valeur maximale lorsque le réseau poreux est totalement saturé. La pression de disjonction est reprise d'une part par le cadre solide des micropores et d'autre part par les ***"liaisons transversales"*** présentes dans les micropores.

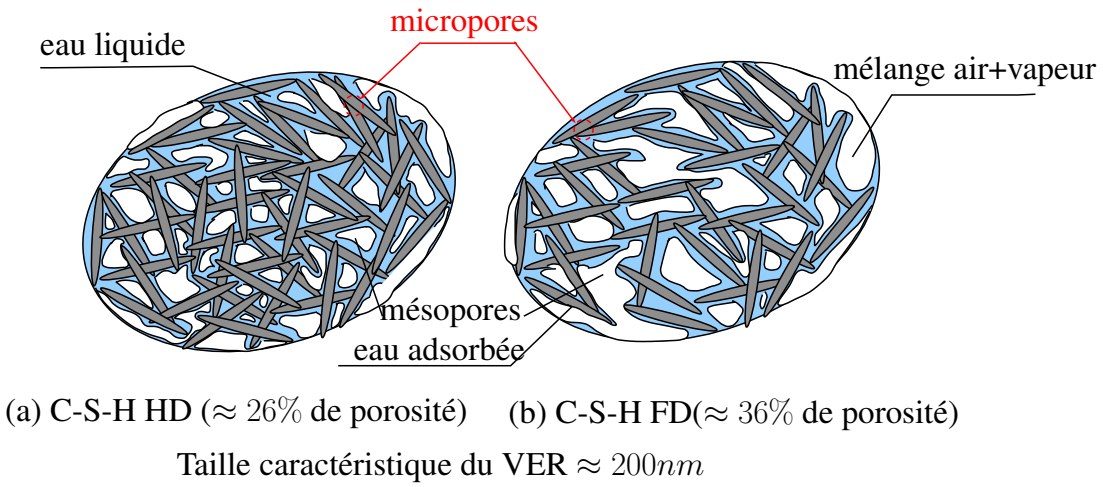


Fig 1.8 – Description des agrégats de C-S-H formant le gel

L'effort repris par ces liaisons transversales est appelée ***"microprécontrainte"*** par (Bazant et al., 1997a). La microprécontrainte équilibre de façon quasi-instantanée la pression de disjonction et devient maximale lorsque le réseau poreux est totalement saturé. La Fig. 1.7 présente la description des micropres et celle des éfforts qu'on y trouve.

Le gel de C-S-H se compose de deux types d'agrégat, le C-S-H HD de haute densité qui a une porosité d'environ 26% et le C-S-H FD de basse densité qui a une porosité d'environ 36%. Dans la mésoporité du gel on retrouve l'eau liquide capillaire, l'eau adsorbée sur les surfaces solides et le mélange air-vapeur. La Fig. 1.8 décrit schématiquement les deux types d'agrégat de C-S-H et les phases qui les composent.

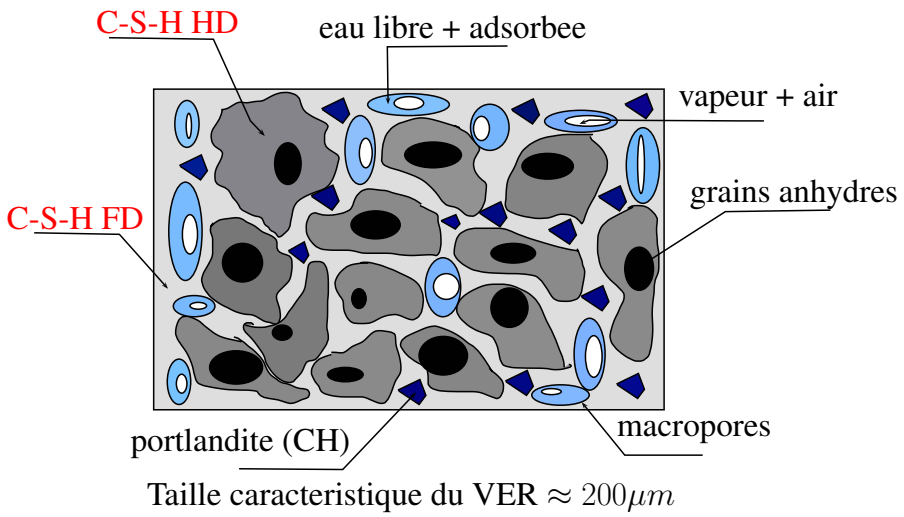


Fig 1.9 – Description de la microstructure simplifiée de pâte de ciment

La microstructure de la pâte de ciment est constituée du gel de C-S-H de basse et haute

densités, des grains anhydres et de la portlandite. La Fig. 1.9 schématise la microstructure simplifiée de la pâte de ciment.

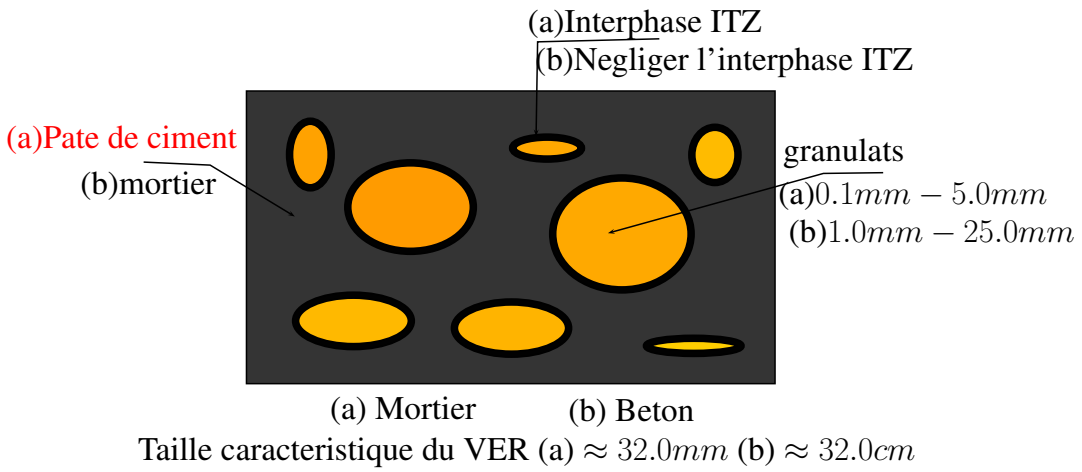


Fig 1.10 – Description de la microstructure simplifiée du mortier (a) et du béton (b)

Enfin, la Fig. 1.10 présente la microstructure des mortiers et des bétons. Nous rappelons que les mortiers comportent la pâte de ciment, les granulats de taille allant de $0.1mm$ à $5mm$ et l'interphase ou auréole de transition ITZ alors que le béton est constitué du mortier et des granulats allant de $1mm$ à $25mm$.

1.4 Mécanismes des déformations différées

La question des mécanismes élémentaires à l'origine des phénomènes des déformations différées des bétons reste d'actualité du fait de la difficulté à interpréter les résultats expérimentaux disponibles. Nous discuterons ces aspects dans cette section en commençant par les mécanismes en jeux pendant le fluage propre puis nous élargirons la discussion aux mécanismes élémentaires pendant le retrait de dessication et terminons par le fluage de dessication.

1.4.1 Pendant le fluage propre

Il existe plusieurs théories dans la littérature qui essayent d'expliquer le fluage propre du béton. Nous listons quelques théories qu'on rencontre dans cette section et essayons de les analyser en fonction des observations expérimentales précédentes.

(Powers, 1968), la théorie de l'infiltration attribue les variations de volume causées par l'application d'une charge mécanique externe à la variation de la pression de vapeur interne et ainsi, à la teneur en eau du gel. En effet, dans cette théorie la charge externe entraîne une diffusion de l'eau des zones d'adsorption gênée vers les zones d'adsorption libre, causant la diminution graduelle de la pression de disjonction et du volume de la pâte puisque l'espacement des particules dans le gel se réduit. Nous pensons que cette théorie présente une sérieuse limite

puisque les phases solides dans la microstructure du béton sont trop rigides pour engendrer des déformations suffisantes pour faire varier l'espace poreux de sorte à induire un écoulement non négligeable.

(Feldman and Sereda, 1968), la théorie de la couche intermédiaire considère que le fluage de la pâte de ciment est une manifestation de la cristallisation graduelle ou du vieillissement du matériau silicate stratifié mal cristallisé, accéléré par le séchage ou la contrainte. De notre point de vue cette explication du fluage n'est pas assez précise puisqu'elle n'explique pas comment le vieillissement du béton est accélérée par le séchage ou la contrainte.

(Ruetz, 1968), selon la théorie du cisaillement visqueux, le fluage se produit à travers des glissements entre les particules de C-S-H dans un processus de cisaillement dans lequel l'eau agit comme un lubrifiant. Ce mécanisme, comme nous le verrons, est le mécanisme communément accepté par une grande partie de la communauté scientifique de nos jours.

(Wittmann, 1970), D'après la théorie d'activation thermique, l'eau joue un rôle indirecte à travers son effet sur la pression de disjonction qui, à son tour, affaiblit les liaisons transversales. Son hypothèse est que les déformations différées soient le résultat de processus thermiquement activés qui peuvent être décrits par la théorie du taux de processus, c'est-à-dire que les déformations de fluage proviennent de déformations de microvolumes de la pâte de ciment désignés comme ***"sites de fluage"*** et ces sites de fluage sont vus comme les zones de glissement entre les particules adjacentes de C-S-H. Cette théorie précise que c'est seulement aux sites de fluage qu'ont lieu les glissements en réponse aux cisaillement précédemment évoqués (Ruetz, 1968). Aussi, elle sous-entend que le glissement dépend de la pression de disjonction mais sans préciser comment.

Enfin, nous présentons une toute autre école pour laquelle, les phénomènes de fluage peuvent provenir de la microfissuration qui pourrait se produire à haute humidité relative comme un résultat de contraintes de retrait développées proche des cristaux de portlandite (CH) ou provenir de glissement possible entre la pâte de ciment et les agrégats (Ishai, 1968).

La problématique de l'origine des déformations différées du béton fait ainsi polémique dans la communauté scientifique. Celle-ci a orienté la recherche expérimentale vers des échelles de plus en plus fines du matériau. En effet, des résultats des techniques de nanoindentation ont montré que la seule composante de la pâte de ciment à l'origine du comportement visqueux des matériaux cimentaires est le C-S-H. Ces résultats plutôt bien acceptés par la communauté scientifique, ont été complétés par des essais de microindentation sur les phases secondaires de la pâte de ciment synthétisées en vue de comprendre leurs éventuelles participations aux processus des déformations visqueuses. Ainsi, (Nguyen et al., 2013) a récemment mis en exergue un possible fluage d'une portlandite (CH) synthétique compacte même pour une humidité relative de 0%. Cependant, en supposant une faible amplitude de fluage de la portlandite comparée au fluage du C-S-H nous optons pour un fluage intrinsèque trouvant son origine dans les C-S-H comme la majorité des auteurs.

Dans cette optique, (Acker, 2001) propose que les déformations de fluage du béton pro-

viennent du seul comportement viscoplastique des C-S-H, dont la déformation visqueuse l'emporte largement sur la déformation élastique, et que cette déformation visqueuse est totalement irréversible. (Acker, 2003), précise cette idée en disant que le gel de C-S-H est essentiellement soumis à des sollicitations de cisaillement et compte tenu de la structure en feuillet des C-S-H les déformations qui s'y produisent sont des glissements entre les feuillets. Ce mécanisme se produit à volume constant ou quasi-constant, et à un long terme non asymptotique, soient des effondrements dans l'empilement des feuillets et la consolidation du gel. Ce mécanisme implique un drainage de l'eau du gel vers les pores capillaires, avec une cinétique contrôlée par la compacité (porosité) du gel, avec un comportement asymptotique puisque la compacité du gel a une limite physique, celle de l'empilement compact. Nous tenons à souligner qu'au vu des observations expérimentales la recouvrance de fluage est partielle, ce qui indique que la déformation visqueuse des C-S-H n'est pas totalement irréversible. Aussi, nous sommes sceptiques à propos de la consolidation du gel de C-S-H et ce pour la simple raison que la variation de la taille des pores sous chargement mécanique dans le cas de matériaux cimentaires n'est pas suffisante pour modifier l'équilibre hydrique dans les pores.

(Tamtsia and Beaudoin, 2000), en s'interrogeant sur le rôle de l'eau dans le processus de fluage propre, soulignent que le fluage des échantillons de la pâte de ciment durcie est principalement dû aux microglissements entre particules de C-S-H qui est en plus influencé par la couche intermédiaire ou l'agrégat des feuillets de C-S-H. En effet, leurs observations expérimentales soulignent l'importance de l'eau dans les mécanismes de fluage sans pour autant expliquer l'influence de l'eau sur les microglissements.

(Vandamme and Ulm, 2013), observent qu'après quelques secondes de mesure par nanoindentation que la fonction de fluage des C-S-H est très bien saisie par une fonction logarithmique du temps et en la comparant avec des essais de fluage macroscopique sur le béton, montre que des nanoindentations de quelques minutes permettent une évaluation quantitative des propriétés de fluage à long terme des matériaux cimentaires. Cela souligne que les glissements entre particules, lamelles ou feuillets influencés par l'eau des micropores sont certainement à l'origine du fluage à long terme et confirme la double cinétique à court et à long terme du fluage des bétons.

Pour (Sellier and Buffo-Lacarrière, 2009), la diminution de la vitesse de fluage à long terme est due à la consolidation causée par des contraintes sphériques et à un écrouissage sans doute dû à des enchevêtrements et à des blocages lors des déplacements des feuillets de C-S-H.

(Gmira et al., 2004), en s'intéressant aux forces électrostatiques à l'origine de la résistance des matériaux cimentaires, apportent un support microscopique fort pour les mécanismes de fluage à double cinétique de la pâte de ciment avec un premier mécanisme à court terme rapide impliquant la diffusion d'eau dans l'espace vide et un second mécanisme vieillissant impliquant le glissement de lamelles de C-S-H voisines grâce à un mécanisme de type dislocation.

(Bernard et al., 2003), soulignent aussi un fluage à double cinétique à court et à long terme des matériaux cimentaires. Dans la phase de fluage court terme, ils postulent deux mécanismes

de relaxation, le fluage des C-S-H et la microfissuration. Pour eux le fluage des C-S-H est un phénomène purement deviatorique qui se produit à volume constant. L'hypothèse du fluage purement déviatorique des C-S-H signifie que la matrice du gel de C-S-H sous chargement deviatorique provoquant un fluage s'étend dans les micropores afin de préserver son volume solide d'où la variation de volume macroscopique observée. Dans le cas d'une compression déviatorique macroscopique appliquée, avec un important déviateur de contrainte de sorte que la relaxation par fluage du déviateur de la microcontrainte soit trop lente pour être supportée par le matériau, il y a activation de la relaxation par microfissuration, ce qui est macroscopiquement exprimé par un comportement dilatant. La relaxation par fluage se produit à l'échelle de la matrice de C-S-H et la microfissuration se produit à l'échelle de la pâte de ciment et de l'ITZ. Les deux mécanismes de relaxation (fluage versus microfissuration) sont en compétition dans le temps. Quand la fissuration prend le dessus il y a dilatance et lorsqu'elle devient trop importante il y a rupture par fluage. La phase de fluage long terme est quant à elle caractérisée par un fluage purement déviatorique qui se produit à volume constant en absence de fissuration.

(Bazant et al., 1997a; Bernard et al., 2003), considèrent que le fluage du gel de ciment durci provient de glissements dans la microstructure du gel de C-S-H induits par des microcontraintes de cisaillements et sont influencés par les microcontraintes normales au travers des plans de glissements. Ils considèrent aussi comme dans la théorie d'activation thermique que la microstructure contient des positions dispersées et très localisées où les liaisons atomiques sont soumises à de grandes tractions. Ils font l'hypothèse que ces liaisons fortement sollicitées correspondent aux liaisons traverses situés dans les micropores de gel contenant l'eau adsorbée gênée et que les couches d'eau adsorbées gênées sont les plans de glissements d'où apparaît le fluage (la part visqueuse du fluage à long terme). Pour eux le fluage est le résultat macroscopique de plusieurs ruptures de ces liaisons atomiques se produisant à différents instants aux différentes positions sursollicitées ou sites de fluage dans les couches adsorbées gênées. Le glissement de cisaillement est le résultat de ruptures, de reformes de liaisons atomiques et de rotations des liaisons avec les atomes adjacents (***quasi-dislocation***). Chaque rupture et reforme de liaison sur un site de fluage relaxe la contrainte. Un autre site de fluage peut se surcharger entraînant une nouvelle rupture de liaison. Une relaxation progressive de l'effort de cisaillement aux sites de fluage et de l'épuisement des sites de fluage surchargés disponibles fait diminuer le taux de fluage sous une contrainte macroscopique constante appliquée. La rupture de liaison sans sa reforme est possible et elle conduit à la nucléation et à la propagation de microfissures de traction, le résultat est aussi le fluage mais un fluage non linéaire puisque les microfissures engendrent une diminution de la rigidité macroscopique (endommagement), qui se produit au-delà des contraintes de services du béton.

Il serait erroné de déduire que les glissements de cisaillement pourraient causer seulement le fluage de cisaillement à l'échelle macroscopique. A cause de la grande porosité et de la grande hétérogénéité de la microstructure du gel de ciment durci, une contrainte hydrostatique macroscopique cause non seulement des contraintes sphériques dans la microstructure mais aussi

des contraintes de cisaillement. Ainsi, les glissements dans la microstructure pourraient causer des variations de volumes (fluage volumique). (Bazant et al., 1997a,b) soulignent qu'à cause du fluage dans la direction transversale du plan de glissement, la microprécontrainte de traction subit une relaxation. Cette relaxation réduit la viscosité effective des glissements de cisaillement et traduit ainsi l'effet vieillissant à long terme du mécanisme de glissement des C-S-H. En effet, la relaxation de la microprécontrainte réduit le taux de glissement aux sites de fluage et rend aussi inactifs certains sites. Tandis qu'au jeune âge le vieillissement résultant de l'accroissement de volume des hydrates est simultané et dominant par rapport à la relaxation de microprécontrainte. L'humidité porale joue un rôle similaire sur le vieillissement à court terme ; en fait, l'hydratation et les processus de fluage sont ralentis par une diminution de l'humidité interne.

En somme, nous retenons comme mécanismes du fluage propre (Fig. 1.7) :

1. ***Echelle des micropores* : les microglissements de cisaillement influencés par la microprécontrainte aux sites de fluage comme définis par (Bazant et al., 1997a). Les sites de fluage sont définis comme étant les micropores dans lesquelles la microprécontrainte est maximale. La relaxation de cette microprécontrainte et la polymérisation sont à considérer pour prendre en compte l'effet du vieillissement pendant et à la fin de l'hydratation.**
2. ***Echelle de la pâte et du mortier/béton* : la microfissuration initiée par le dépassement de la limite en traction ou pour un déviateur de contrainte microscopique trop important pour être relaxé assez rapidement par fluage. Ce dernier mécanisme est à prendre en compte dans le cas de fluage non linéaire c'est-à-dire pour des chargements mécaniques importants.**

1.4.2 Pendant le retrait endogène ou de dessiccation

Comme dans le cas du fluage propre, il existe plusieurs théories dans la littérature qui essayent d'expliquer le retrait de dessiccation des bétons. Nous listons quelques théories que l'on rencontre dans la suite et essayons de les analyser à l'aide des observations expérimentales précédentes.

(Acker, 2003), les mécanismes actifs lors du séchage ou de l'auto-dessiccation sont un processus de consolidation dans le gel de C-S-H, l'évolution des pressions de disjonction ainsi que des forces de disjonction (forces reprises par les liaisons dans les micropores ou microprécontrainte selon (Bazant et al., 1997a)). Pour justifier que le processus de consolidation ci-dessus est un mécanisme actif en retrait et en fluage et qu'il a une limite physique, (Acker, 2003) a observé une diminution de l'amplitude du fluage propre des bétons à haute performance par rapport aux bétons ordinaires et pour lui, la cause doit être cherchée dans une « compaction » des C-S-H due au retrait endogène. Ainsi, le fait que les deux phénomènes, retrait et fluage, mettent en jeu le même processus de déformation visqueuse dans les C-S-H et que ces déformations présentent une limite physique, conduit à la conclusion que ces deux phénomènes sont profondément couplés, et ne peuvent pas être décrits par l'addition de deux modèles indépendants.

(Feldman and Sereda, 1970) soutiennent la même idée que (Acker, 2003) à propos de la consolidation, en soulignant que le séchage a pour effet de rapprocher les unités de C-S-H. Par ailleurs, ils étendent leur idée à une explication possible de l'irréversibilité de la déformation de retrait en ré-humidification. En effet, lors du séchage les surfaces des unités de C-S-H à l'intérieur des assemblages se rapprochent, créant de nouvelles liaisons induisant un retrait irréversible car beaucoup de ces liaisons sont conservées lorsque qu'on ré-humidifie le milieu.

A l'échelle des micropores lors du séchage jusqu'à 0% d'humidité relative interne, (Gmira et al., 2004) remarque un rapprochement des surfaces solides d'environ $0.3\,nm$ qui n'est pas récupéré après ré-humidification. Cette observation montre que le séchage piège des particules dans un **"*puits d'énergie potentielle très profond*"**. D'autre part, la partie réversible du retrait concerne les pores qui se vident pendant le séchage et qui se remplissent pendant l'humidification.

(Jennings, 2004), le séchage engendre un retrait qui se traduit par une contrainte de compression qui induit un fluage. Le retrait macroscopique observé serait ainsi un retrait par séchage plus du fluage induit.

Le phénomène de consolidation décrit ici nous laisse sceptique pour la même raison évoquée dans le cas du fluage propre. Nous pensons que les variations de volume macroscopique observées ne sont rien d'autre que le résultat apparent des glissements de cissaillement à l'échelle nanométrique. En effet, puisque ces glissements se font à volumes constants la matière s'étale dans le réseau poreux et induit une variation de volume macroscopique.

L'ensemble de ces considérations nous conduit à retenir ces mécanismes :

1. ***Echelle des macropores , des mésopores et des micropores*** **: les mouvements des phases liquide, vapeur et adsorbée de l'eau dans le but de retrouver un équilibre thermodynamique.**

2. ***Echelle des micropores*** **: les microglissements comme dans le cas du fluage propre ; puisque que le séchage engendre à l'échelle des micropores des contraintes de cisaillements du fait de la microstructure fortement hétérogène. De plus ces microglissements sont influencés par l'évolution de la microprécontrainte avec l'augmentation de la pression capillaire et des pressions de disjonction. Ainsi, la variation de la viscosité des microglissements avec la microprécontrainte lors du séchage et de l'humidification et la relaxation de la microprécontrainte (vieillissement long-terme) sont à l'origine d'une partie du retrait irréversible.**

3. ***Echelle de la pâte et du mortier/béton*** **: la microfissuration est active à l'échelle de la pâte de ciment et de l'ITZ seulement par dépassement de la résistance en traction. Car le cisaillement microscopique engendré par le séchage est suffisamment faible pour être relaxé par les microglissements.**

1.4.3 Pendant le fluage de dessiccation

Comme dans le cas du fluage propre et du retrait de dessiccation, il existe plusieurs théories dans la littérature qui tentent d'expliquer le fluage de dessiccation des bétons. Nous en citons quelques unes dans la suite et essayons de les analyser en nous appuyant sur les observations expérimentales.

(Acker and Ulm, 2001), à propos de l'effet Pickett, deux écoles partagent actuellement la communauté scientifique. Une explication le considère comme un effet de structure impliquant la fissuration de surface due au séchage de l'échantillon. Pour l'extrapolation des données de fluage à long terme, avec cette approche la déformation finale dépendra en particulier du degré de réversibilité des déformations de la zone fissurée. La seconde explication, suggère que le taux de fluage dépend non seulement de la teneur en eau mais aussi de son taux de variation. Pour l'extrapolation des données de fluage à long terme, le taux de fluage tend à être uniforme quelque soit la dimension de l'élément de structure.

(Sellier and Buffo-Lacarrière, 2009), un exemple d'explication de la déformation de fluage de dessiccation en phase avec l'école de la fissuration serait que le fluage de dessication soit considéré comme un accroissement de retrait dû à une meilleure transmission des effets de la dépression capillaire vers le squelette solide. En effet, ils justifient cette meilleur transmission d'effort par la réduction de la fissuration à cause de la compression supplémentaire appliquée comparée à une éprouvette en séchage seul. L'argument est pertinent mais n'arrive pas à expliquer le fluage de dessiccation observé aussi en traction (Kolver, 1999).

(Kolver, 1999), le fluage de dessiccation étant une déformation supplémentaire en compression comme en traction uni-axiale, on peut supposer que cette composante de déformation supplémentaire du béton dépend d'un seul mécanisme physique commun pour la traction et la compression. Ainsi ces essais écartent aussi la thèse de la contrainte induite par retrait.

(Bazant et al., 2004), les deux écoles n'ont pas totalement tort, pour lui la source physique du fluage de dessiccation est maintenant connue pour impliquer les deux mécanismes : Mécanisme apparent consistant en un fluage additionnel dû à la microfissuration ou à un endommagement de déformation adoucissante et un vrai mécanisme qui réside dans la nanostructure et qui consiste en le fait que le taux de cisaillement (glissement) est réduit (amplifié) à cause des ruptures et reformes des liaisons atomiques dans les C-S-H par une diminution (augmentation) de l'amplitude de la microprécontrainte qui agit à travers les plans de glissements. La variation de contrainte est produite par une variation dans le potentiel chimique (énergie libre de Gibbs par unité de masse) de l'eau porale à cause du séchage.

Dans la même optique visant à concilier les deux écoles, pour (Benboudjema et al., 2007) une partie du fluage de dessiccation est expliqué par l'effet de microfissuration. En effet, une éprouvette soumise au séchage et à une compression mécanique a une fissuration moins prononcée comparée à une éprouvette jumelle libre. Par ailleurs pour (Bazant, 1985), l'influence du séchage sur les mécanismes intrinsèques de fluage s'explique par une contrainte induite par le retrait. Cette théorie suggère que le séchage et le chargement simultané cause une microdiffusion

des molécules d'eau entre les micropores et les pores capillaires, ce qui augmente la rupture des liaisons dans le gel de ciment et résulte en une déformation de fluage de dessiccation intrinsèque. (Benboudjema et al., 2007) considèrent en plus une interaction entre le squelette du matériau et le mécanisme de rupture des liaisons atomiques transverses dans les micropores pendant le fluage.

Par ailleurs, (Bazant et al., 1997a) étendent l'idée proposée dans (Bazant, 1985) sur la contrainte induite par le retrait à la variation de la microprécontrainte avec le séchage. Selon (Bazant et al., 1997a), l'influence de la contrainte normale sur le glissement de cisaillement vient du fait que la fréquence de rupture des liaisons est déterminée par l'énergie cinétique de vibrations thermiques aléatoires des atomes et de l'amplitude d'énergie d'activation. En effet, la contrainte de traction réduit la barrière de l'énergie d'activation. Ainsi la fréquence de rupture des liaisons augmente avec la contrainte de traction à travers le plan de glissement.

Nous retiendrons comme mécanismes pour l'effet Pickett :

1. ***Echelle des macropores , des mésopores et des micropores* : les mouvements des phases liquide, vapeur et adsorbée de l'eau dans le but de retrouver un équilibre thermodynamique. Les mouvements d'eau sont à l'origine de la variation de la microprécontrainte avec la pression de disjonction qui à son tour, varie avec la pression capillaire et les tensions de surfaces du fait de la variation du potentiel chimique (énergie libre de Gibbs par unité de masse) de l'eau porale à cause du séchage.**
2. ***Echelle des micropores* : les microglissements comme dans le cas du fluage propre ; puisque que le séchage engendre à l'échelle des micropores des contraintes de cisaillements du fait de la microstructure fortement hétérogène. De plus ces microglissements sont influencés par l'évolution de la microprécontrainte avec l'augmentation de la pression capillaire et des pressions de disjonction. Ainsi, la variation de la viscosité des microglissements avec la microprecontrainte lors du séchage et de l'humidification et la relaxation de la microprécontrainte (vieillissement long-terme) sont à l'origine d'une partie du retrait irréversible.**
3. ***Echelle de la pâte et du mortier/béton* : la réduction de la microfissuration en fluage séchant comparée au retrait séchant**

1.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté une étude bibliographique des phénomènes de retrait et de fluage du béton. Nous avons succinctement balayé les tendances expérimentales et les mécanismes élémentaires susceptibles de les expliquer, pour aboutir aux mécanismes que nous retenons comme base pour nos modélisations futures. Nous proposons dans cette conclusion de faire une synthèse des observations expérimentales et des mécanismes retenus.

1.5.1 Les tendances expérimentales

Le retrait

— La cinétique du retrait est similaire à celle du fluage avec une tendance asymptotique (Fig. 1.11).

— La cinétique du retrait dépend de la vitesse de séchage (Fig. 1.12).

— Il y a une hystérésis entre les cinétiques de retrait et de gonflement et une partie du retrait est irréversible, lors d'un cycle de séchage-humidification (Fig. 1.13).

— La fissuration de l'éprouvette réduit considérablement le retrait mesuré (Fig. 1.14).

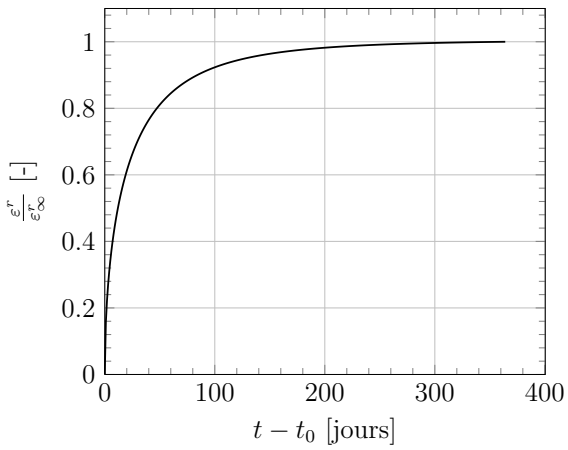


Fig 1.11 – Cinétique du retrait $\frac{\varepsilon^r}{\varepsilon^r_\infty}$ et retrait asymptotique ε^r_∞.

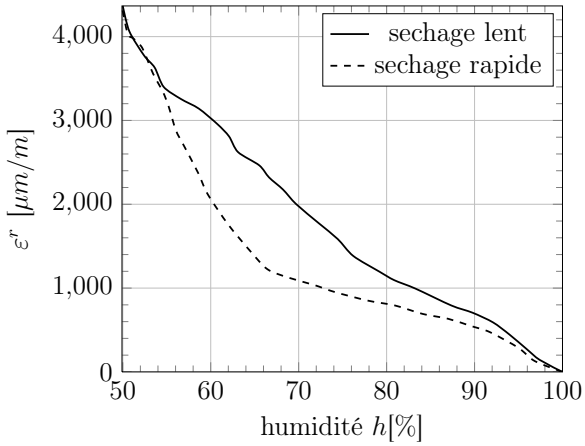


Fig 1.12 – Effet de la vitesse du séchage sur le retrait, Day et al. (1984).

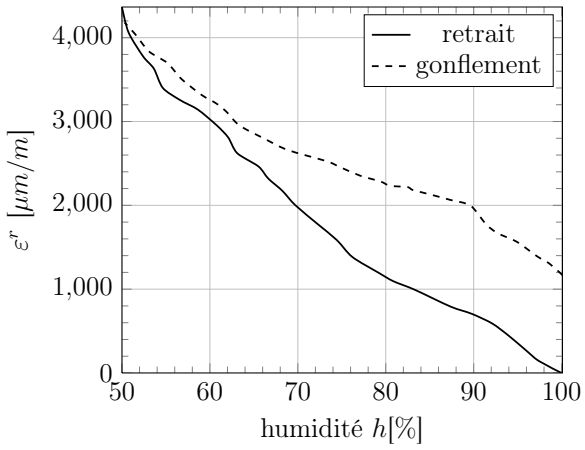


Fig 1.13 – Hysteresis entre retrait et gonflement pendant un cycle de séchage-humidification lent, Day et al. (1984).

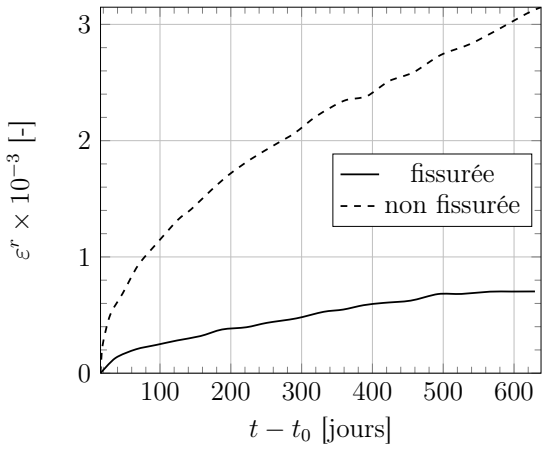


Fig 1.14 – Effet de la fissuration sur la mesure de la déformation de retrait.

Le fluage en absence d'échange hydrique

- La fluage a une double cinétique, à savoir celle à court terme et celle long terme (Fig. 1.15).
- Le fluage décroît significativement avec l'âge du chargement (Fig. 1.16).
- La recouvrance du fluage est partielle (Fig. 1.17).
- Plus l'humidité interne du matériau est grande, plus le fluage en absence d'échange hydrique est grand.

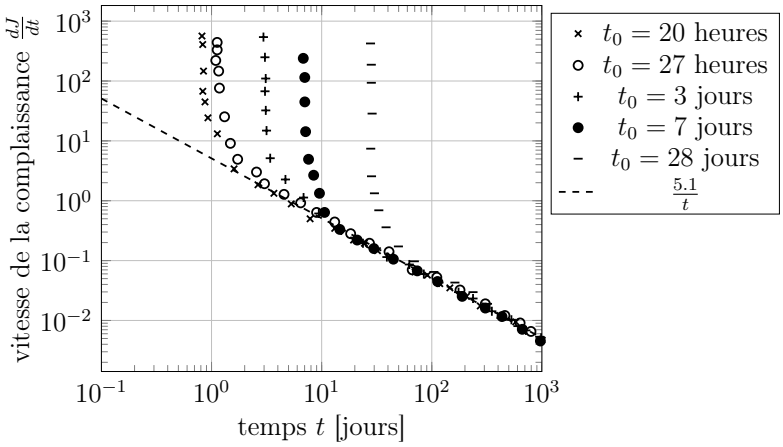


Fig 1.15 – Vitesse de la complaisance de fluage propre à différents âges t_0 du béton, (Ulm and Acker, 1988).

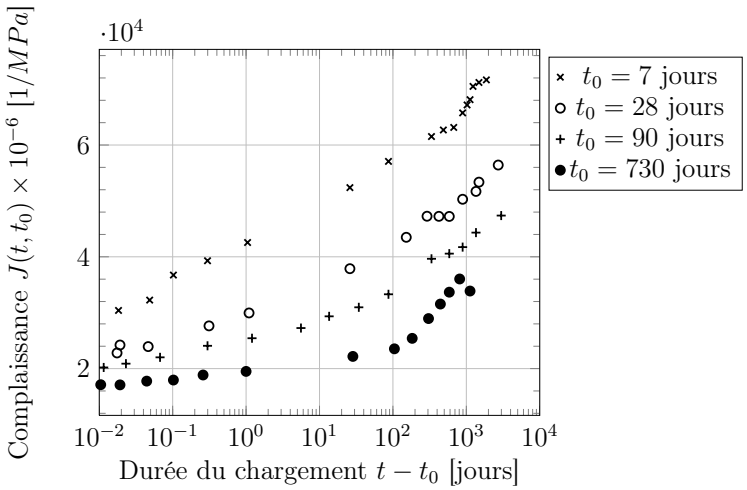


Fig 1.16 – Effet du vieillissement du béton sur son fluage propre, (L'Hermite et al., 1965, 1968).

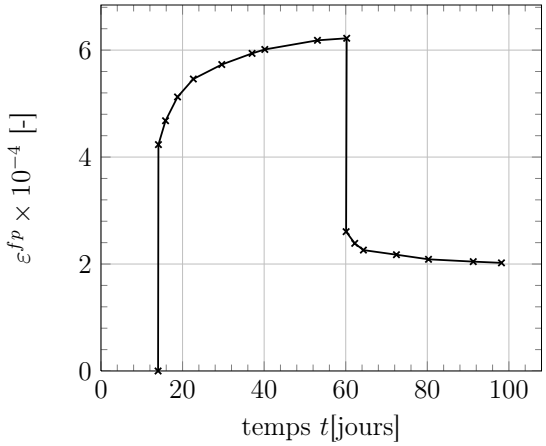


Fig 1.17 – Recouvrance de fluage propre et fluage irreversible, (Ross, 1958).

Le fluage en présence d'échange hydrique

— Lors d'un essais de fluage simultanément à un séchage et à faible humidité, le fluage est beaucoup plus grand comparé au fluage avec une plus grande humidité, (Fig. 1.18). Cet effet contradictoire avec l'idée du fluage propre plus faible à basse humidité est appelé effet Pickett ou fluage de dessication.

— L'effet Pickett ou déformation de fluage de dessiccation est aussi observée en humidification.

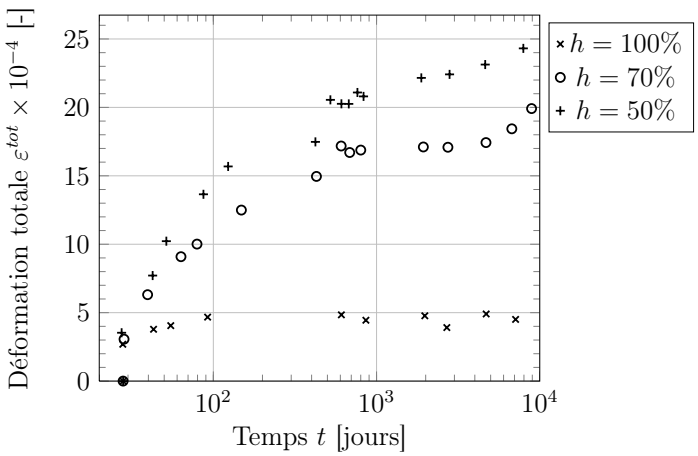


Fig 1.18 – L'effet du séchage sur la déformation de fluage, (Troxell et al., 1958).

1.5.2 Les mécanismes retenus

La décomposition entre les différents retraits et fluages est purement conventionnelle. Elle relève uniquement d'une démarche visant à décorréler les effets du séchage (chargement hydrique) des effets du chargement mécanique. Fluage et retrait sont intimement liés et doivent être expliqués par les mêmes mécanismes physiques. Cela nous conduit à proposer les mécanismes suivants comme étant à l'origine de la plupart des observations expérimentales précédentes.

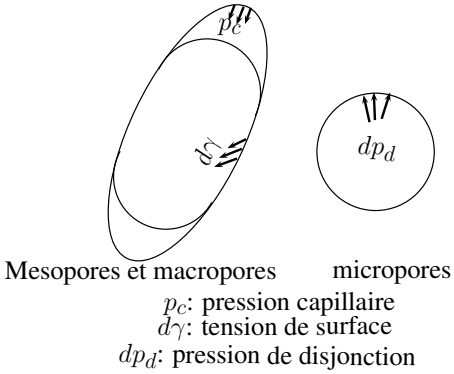


Fig 1.19 – Chargement hydrique : Dépression des mésopores et des macropres du fait de la pression capillaire et la tension de surface et mise en pression des micropores du fait de la pression de disjonction.

Le chargement hydrique à l'origine des déformations de retrait. Il s'agit de la pression capillaire, de la tension de surface dans les macropores et les mesopores, et de la pression de disjonction dans les micropores (Fig. 1.19).

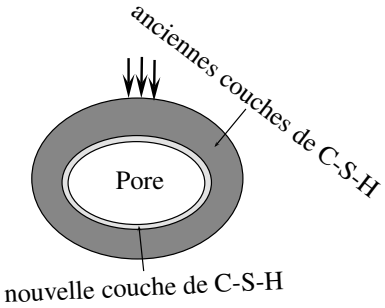


Fig 1.20 – Hydratation : accroissement de la fraction volumique du C-S-H où le mécanisme de fluage a lieu.

Le vieillissement du matériau à l'origine de la réduction du fluage avec l'âge du matériaux et de la part irréversible du fluage en recouvrance. Il s'agit du vieillissement chimique

se produisant à court terme, caractérisé par l'accroissement du volume des hydrates pendant l'hydratation (Fig. 1.20) et du vieillissement "hydrique" se produisant à court et à long terme, caractérisé par la relaxation de la microprécontrainte (Fig. 1.21).

Les microglissements de cisaillement du C-S-H à l'origine du comportement visqueux des matériaux cimentaires (pâte de ciment, mortier, beton). Les microglissements sont amplifiés en présence d'échanges hydriques, ce qui explique l'effet Pickett. Par ailleurs ils s'atténuent avec le temps en absence d'échanges hydriques, ce qui explique les effets de réduction du fluage même en fin d'hydratation. Ces effets se traduisent par la relaxation de la microprécontrainte en absence d'échange hydrique et par sa variation avec la variation de l'humidité dans les mesopores et les macropores du matériaux (Fig. 1.21).

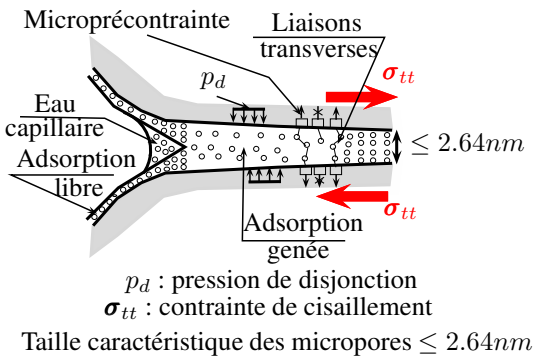


Fig 1.21 – Mécanismes de microglissement de cisaillement, relaxation de la microprécontrainte et variation de la microprecontrainte avec l'humidité des pores adjacents.

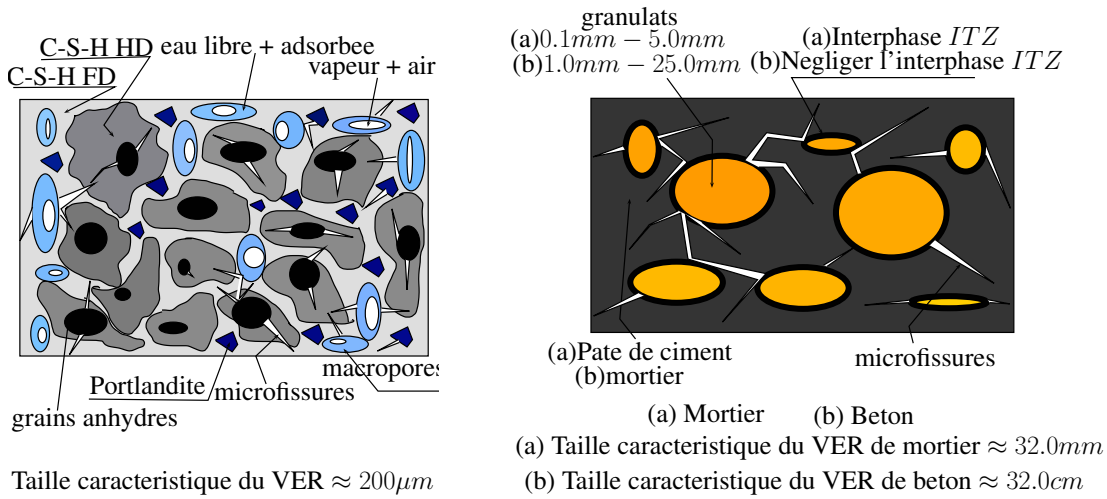


Fig 1.22 – Mécanisme de microfissurations aux échelles des microstructures de pâte de ciment, de mortier et de béton.

Les microfissurations à l'origine des effets d'échelle et d'une partie du fluage de dessication ou effet Pickett. Elles se produisent probablement aux échelles des matrices, inclusions et pores, à savoir celle de la microstructure de la pâte de ciment et celle de la microstructure du mortier et du béton (Fig. 1.22).

Un modèle physique unifié pour le retrait et le fluage du béton serait donc celui qui prendrait en compte tous ces mécanismes et ceux aux échelles pertinentes. Dans la suite de cette thèse nous nous intéresserons en particulier à la modélisation du chargement hydrique à l'échelle du réseau poreux et à l'introduction du mécanisme de microglissement de cisaillement. Sur la base d'une telle modélisation nous espérons avoir une meilleure compréhension du couplage entre fluage et retrait dans le but de proposer un modèle macroscopique apparent unifié.

Deuxième partie

Une approche de modélisation multi physique des microstructures poreuses basée sur la méthode des éléments finis et la méthode de Boltzmann sur réseau : méthodologie

Chapitre 2

Écoulements isothermes d'un fluide monophasique à l'échelle de l' espace poreux par la méthode de Boltzmann sur réseau

Sommaire

2.1 Introduction **43**

2.2 Théorie **43**

2.2.1 Description d'un système fluide à différentes échelles 43

2.2.1.1 Description microscopique : dynamique moléculaire 43

2.2.1.2 Description mésoscopique : théorie cinétique 44

2.2.1.3 Description macroscopique : théorie phénoménologique 45

2.2.2 Équation de Boltzmann 46

2.2.2.1 De Liouville à Boltzmann 46

2.2.2.2 Invariants de collision et distribution d'équilibre 48

2.2.2.3 Approximation BGK 49

2.2.3 De Boltzmann à l'hydrodynamique 50

2.2.3.1 Définition des quantités macroscopiques 50

2.2.3.2 Lois de conservation 52

2.2.3.3 Equations constitutives 54

2.3 Implémentation numérique **58**

2.3.1 Discrétisation de l'espace des quantités de mouvement 58

2.3.2 Discrétisation en espace et en temps 63

2.3.3 De LBM à Navier-Stokes : la procédure de Chapmann-Enskog 64

2.3.4 Conditions initiales et aux limites 65

2.3.5 Algorithme 68

2.4 Exemples numériques **69**

2.4.1 Écoulement de Poiseuille 70

2.4.2 Écoulement dans une cavité à couvercle entraîné 74

2.4.3 Écoulement laminaire cisaillant de Taylor 76

2.4.4 Estimation de la perméabilité 79

2.5 Conclusion 83

2.1 Introduction

Physiquement, tous les fluides dont l'eau et l'air se composent d'un grand nombre d'atomes ou molécules qui entrent en collision les unes, les autres et se déplacent aléatoirement. Nous qualifions de description macroscopique, le fluide perçu comme un milieu continu et de description microscopique le fluide perçu comme un ensemble de N molécules en interactions dans un volume Ω^f. La dynamique macroscopique d'un fluide peut donc être vue comme le comportement moyen homogène et continue de la dynamique microscopique qui est fortement hétérogène et fluctuante.

Ce chapitre est un rappel bibliographique fournissant les bases de la méthode de Boltzmann sur réseau (Lattice Boltzmann Method, LBM) pour la modélisation d'un fluide monophasique. L'objectif est de réaliser une première phase de validation d'un code développé durant cette thèse utilisant la méthode de Lattice Botlzmann, et qui sera utilisée dans les chapitres suivants pour modéliser explicitement les effets de l'eau capillaire dans les microstructures de béton à l'échelle de l'espace poreux. Dans ce chapitre, les effets de la tension de surface et les changements de phase ne sont pas abordés, ils le seront dans le chapitre 3. Nous faisons premièrement un rappel théorique des équations et de la discrétisation utilisée dans la méthode de Lattice Botlzmann. Nous validons ensuite le code développé à l'aide de tests possédant des solutions analytiques. Les exemple numériques présentés ont été réalisés dans un code Python développé durant la thèse au MSME et intégré par EDF R&D à la plateforme logicielle MAP (Materials ageing platform) dédiée au calcul sur les matériaux.

2.2 Théorie

2.2.1 Description d'un système fluide à différentes échelles

2.2.1.1 Description microscopique : dynamique moléculaire

L'***espace des phases*** est un espace dans lequel l'étude des systèmes thermodynamiques est approprié. Pour un fluide vu à l'échelle microscopique, l'espace des phases est engendré par l'ensemble des coordonnées $\mathbf{x}_i \equiv (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})$ et des quantités de mouvement $m_i\boldsymbol{\xi}_i \equiv (m_i\xi_{i1}, m_i\xi_{i2}, m_i\xi_{i3})$ des particules du fluide (m_i, $\boldsymbol{\xi}_i$ sont respectivement la masse et la vitesse de la particule i). Notons que chaque point de cet espace représente un état microscopique du système fluide considéré. Nous le désignons par ***point représentatif***. Nous appellerons le sous-espace des positions $\mathbf{x}_i$ de l'espace des phases, l'***espace des configurations*** et le sous-espace des quantités de mouvement $m_i\boldsymbol{\xi}_i$, l'***espace des quantités de mouvement***.

Dans l'espace des phases, l'évolution du système est alors régie par les équations de la dynamique microscopique, ici écrite sous leur forme Hamiltonienne. Dans la suite sans perdre en généralité nous considérons un fluide constitué de particules homogènes avec une masse molaire m. Notons par $H(\mathbf{x})$ l'Hamiltonien du système fluide à N particules à l'instant t et $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$, $\mathbf{x} \equiv (\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N)$ et $\boldsymbol{\xi} \equiv (\boldsymbol{\xi}_1, \cdots, \boldsymbol{\xi}_N)$. Les équations de mouvement pour ce système

sont données par :

$$\begin{cases} m\dot{\mathbf{x}}_i = \nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} H & (i = 1 \cdots N), \\ \\ m\dot{\boldsymbol{\xi}}_i = -\nabla_{\mathbf{x}_i} H & (i = 1 \cdots N). \end{cases} \tag{2.1}$$

Pour un tel fluide soumis à un champ de forces extérieures $\mathbf{f}_i = m\mathbf{g}_i = m\mathbf{g}(\mathbf{x}_i, t)$ et un champ de force d'interactions particulaires $\mathbf{k}_{ij} = m\mathbf{a}_{ij} = m\mathbf{a}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, t)$, ou les accélérations $\mathbf{g}$ et $\mathbf{a}$ dérivent du potentiel par unité de masse $\Phi_i = \Phi(\mathbf{x}_i, t)$ et du potentiel d'interactions par unité de masse $V_{ij} = V_{ji} = V(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|, t)$, respectivement. Toutes les particules ayant la même masse, nous avons :

$$\begin{cases} \mathbf{g}_i = -\nabla_{\mathbf{x}_i} \Phi_i, \\ \mathbf{a}_{ij} = -\nabla_{\mathbf{x}_i} V_{ij}. \end{cases} \tag{2.2}$$

L'Hamiltonien s'écrit sous la forme :

$$H(\mathbf{x}, t) = E_c + E_p, \tag{2.3}$$

où E_c et E_p sont respectivement l'énergie cinétique et l'énergie potentiel total du système fluide à N particules, telles que :

$$E_c = \frac{1}{2} m \sum_{i=1}^{N} \xi_i^2 \text{ avec } \xi_i^2 = \boldsymbol{\xi}_i \cdot \boldsymbol{\xi}_i, \tag{2.4}$$

$$E_p = m \sum_{i=1}^{N} \Phi_i + \frac{m}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N} V_{ij}. \tag{2.5}$$

Pour les systèmes de type fluide de taille macroscopique, N est de l'ordre du nombre d'Avogadro $N_A \simeq 6,02 \,.\, 10^{23}$. La résolution d'un tel système est donc hors de portée avec les calculateurs actuels du fait du nombre gigantesque de degrés de liberté ($6N$ en dimension 3).

2.2.1.2 Description mésoscopique : théorie cinétique

Dans cette section nous présenterons une description intermédiaire du fluide. Il s'agit de sa description mésoscopique. Cette description, issue du point de vue de la physique statistique (***théorie cinétique***), a l'avantage de considérablement réduire le nombre de degré de liberté. Il s'agit d'une description grossière du système à N particules par des ***fonctions de distribution à N particules*** f^N dans l'espace des phases.

Il est évident qu'un grand nombre d'états microscopiques du fluide ou de points représentatifs dans l'espace des phases correspond à un état macroscopique $(\rho, \mathbf{v}, T)$ donné du fluide ($\rho, \mathbf{v}$ et T représentent respectivement la densité, la vitesse et la température macroscopique du fluide). Appelons ***ensemble de Gibbs*** la collection infinie de systèmes microscopiques différents correspondant à un état macroscopique donné. Un tel ensemble est géométriquement représenté

par une distribution continu de points représentatifs dans l'espace des phases. Il est alors possible de définir une fonction de distribution à N particules f^N telle que,

$$f^N(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\mathbf{x} d\boldsymbol{\xi} \tag{2.6}$$

représente la probabilité de trouver à l'instant t, le point représentatif de l'état microscopique du fluide dans un volume infinitésimal $d\mathbf{x}d\boldsymbol{\xi}$ de l'espace des phases noté $\boldsymbol{\Gamma}$ centré sur $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})$. Cette fonction de distribution doit être normalisée :

$$\int_{\boldsymbol{\Gamma}} f^N(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\mathbf{x} d\boldsymbol{\xi} = 1, \forall t. \tag{2.7}$$

Pour $f^N(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ donné à tout instant t, son évolution est déterminée par la dynamique microscopique du fluide. Selon le théorème de Liouville, si l'on considère l'évolution d'un ensemble de points représentatifs contenus dans un volume de l'espace des phases sous les équations d'Hamilton, on montre que pour les systèmes conservatifs, ce volume est conservé au cours du temps (Annexe A.1.1)(Huang, 1987).

Théorème 1 (Liouville). *La fonction de distribution à N particules reste constante le long de n'importe quelle trajectoire de l'espace phase :*

$$\frac{\partial f^N}{\partial t} + \sum_{i=1}^{N} (\nabla_{\mathbf{x}_i} f^N \cdot \dot{\mathbf{x}}_i + \nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} f^N \cdot \dot{\boldsymbol{\xi}}_i) = 0. \tag{2.8}$$

2.2.1.3 Description macroscopique : théorie phénoménologique

A l'échelle macroscopique, un fluide est traité comme un milieu continu sans description fine de structure et de ses interactions moléculaires. Le fluide est considéré comme étant continûment distribué dans le domaine d'intérêt, en ayant ses propres propriétés telles que, sa masse volumique $\rho(\mathbf{x}, t)$, sa vitesse $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ et sa température $T(\mathbf{x}, t)$ ($\mathbf{x}$ est le vecteur position dans la description macroscopique et t l'instant). Les propriétés moléculaires du fluide se reflètent dans ses coefficients de transport, tels que sa viscosité et sa conductivité thermique par exemple. Dans la théorie continue, le mouvement d'un fluide est décrit par les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \tag{2.9}$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = \rho \mathbf{g} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \ , \tag{2.10}$$

$$\frac{\partial (\rho e)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v} e) = -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{q} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \tag{2.11}$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur d'ordre 2 de contrainte, $\mathbf{q}$ est le flux de chaleur et e est l'énergie interne du fluide. Ce système d'équations n'est pas fermé puisque les variables $\boldsymbol{\sigma}$, $\mathbf{q}$ sont inconnues et

doivent être décrites par des équations constitutives. L'équation constitutive de la contrainte est généralement donnée sous la forme suivante :

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{1} + \boldsymbol{\sigma}^d \tag{2.12}$$

où p et $\boldsymbol{\sigma}^d$ sont respectivement la pression du fluide et le tenseur des contraintes visqueuses. La pression est définie en fonction la contrainte par $p = -\frac{1}{3}\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma})$. La pression peut être modélisée par une équation d'état, c'est à dire $p = p(e)$, avec e l'énergie interne du fluide, tandis que le tenseur des contraintes visqueuses peut être modélisé par une équation constitutive entre ces contraintes et la vitesse de déformation,

$$\boldsymbol{\sigma}^d = 2\eta\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \eta'(\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v})\mathbf{1} = 2\eta\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^d + (\eta' + \frac{2}{3}\eta)(\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v})\mathbf{1} \tag{2.13}$$

où η et η' sont la première et la seconde viscosité dynamique, $\mathbf{1}$ le tenseur d'identité d'ordre 2, et $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ le tenseur d'ordre 2 des vitesses de déformation défini par $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{2}(\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{v} + (\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{v}))^T$. Le coefficient $\eta^v = (\eta' + \frac{2}{3}\eta)$ de viscosité volumique, est souvent supposé nul $\eta^v = 0$ selon l'hypothèse de Stokes. aussi la première viscosité dynamique est égale à la viscosité déviatorique du fluide $\eta = \eta^d$ et ainsi le tenseur des contraintes visqueuses devient purement déviatorique.

Le flux de chaleur est habituellement lié au gradient de température selon la loi de Fourier,

$$\mathbf{q} = -\Lambda\nabla_{\mathbf{x}}T, \tag{2.14}$$

avec Λ la conductivité thermique. L'ensemble des précédentes équations sont largement utilisées sous l'appellation équations de '"Navier-Stokes-Fourier".

2.2.2 Équation de Boltzmann

2.2.2.1 De Liouville à Boltzmann

On peut définir à partir de f^N les fonctions de distribution réduites f^s, qui donnent la probabilité de trouver $s < N$ particules dans une configuration $(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_s)$ et avec des quantités de mouvement $(\boldsymbol{\xi}_1, \cdots, \boldsymbol{\xi}_s)$ à un instant donné t. Nous nous intéressons en particulier au calcul de la fonction de distribution f^1 qui donne donc la probabilité de trouver une particule à une position $\mathbf{x}_1$ et avec une quantité de mouvement $\boldsymbol{\xi}_1$ à un instant donné t, à partir de laquelle nous définirons les quantités macroscopiques (ρ, $\mathbf{v}$, T, $\boldsymbol{\sigma}$) du fluide. La hiérarchie *BBGKY (Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon)* (Bogoliubov, 1946) est l'ensemble des équations qui montrent que pour trouver f^1, nous avons besoin de connaître f^2, qui à son tour dépend de f^3 ainsi de suite jusqu'à la fonction de distribution f^N. La fonction de distribution réduite à s-particules est définie par :

$$f^s(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_s, \boldsymbol{\xi}_1, \cdots, \boldsymbol{\xi}_s, t) = \frac{N!}{(N-s)!}\int f^N d\mathbf{x}_{s+1} \cdots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_{s+1} \cdots d\boldsymbol{\xi}_N. \tag{2.15}$$

Le facteur combinatoire $\frac{N!}{(N-s)!}$ vient du fait qu'on néglige la repartition des particules en terme de position $\mathbf{x}_i$ et de quantité de mouvement $\boldsymbol{\xi}_i$. Les deux premières équations de la hiérarchie donnent (Annexe A.1.2) :

$$(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_1} + \mathbf{g}_1 \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1}) f^1 = -\int \mathbf{a}_{12} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} f^2 d\mathbf{x}_2 d\boldsymbol{\xi}_2 \tag{2.16}$$

$$\begin{aligned} &[\tfrac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_1} + \boldsymbol{\xi}_2 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_2} + \mathbf{g}_1 \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} + \mathbf{g}_2 \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_2} + \tfrac{1}{2}\mathbf{a}_{12} \cdot (\nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} - \nabla_{\boldsymbol{\xi}_2})] f^2 \quad = \\ &- \textstyle\int (\mathbf{a}_{13} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} + \mathbf{a}_{23} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_2}) f^3 d\mathbf{x}_3 d\boldsymbol{\xi}_3, \end{aligned} \tag{2.17}$$

où $\mathbf{g}_i = \frac{\mathbf{f}_i}{m}$ et $\mathbf{a}_{ij} = \frac{\mathbf{k}_{ij}}{m}$ représentent les accélérations dues aux champs de forces $\mathbf{f}_i$ et $\mathbf{k}_{ij}$, respectivement. Les différentes échelles de temps impliquées dans les termes des Eq. (2.16) et (2.17) sont :

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} &\sim \tfrac{1}{\tau_c}, \\ \mathbf{g} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} &\sim \tfrac{1}{\tau_e}, \\ \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} &\sim \tfrac{1}{\tau_s}, \end{aligned} \tag{2.18}$$

où τ_c est la durée de collision, τ_e est la durée que prend une molécule pour traverser une distance caractéristique sur laquelle le potentiel externe varie significativement, et τ_s est le temps qu'il faut à une molécule pour traverser une distance sur laquelle la fonction de distribution varie significativement. Comme l'intégrale de collision donne le temps d'échelle de f^1 et que ce sont les termes de propagation qui donnent le temps d'échelle pour f^2 (et les fonctions de distribution d'ordre supérieur), la hiérarchie est tronquée à f^2 et le terme de collision de l'Eq. (2.17) est négligé (seules des collisions binaires sont possibles) :

$$(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_1} + \mathbf{g}_1 \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1}) f^1(\mathbf{x}_1, t) = -\int_{r_0} \mathbf{a}_{12} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} f^2 d\mathbf{x}_2 d\boldsymbol{\xi}_2 \equiv \frac{\partial f^1}{\partial t}|_{coll}, \tag{2.19}$$

$$[\tfrac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_1} + \boldsymbol{\xi}_2 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_2} + \mathbf{g}_1 \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} + \mathbf{g}_2 \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_2} + \tfrac{1}{2}\mathbf{a}_{12} \cdot (\nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} - \nabla_{\boldsymbol{\xi}_2})] f^2 = 0. \tag{2.20}$$

Hypothèse 1 (Dérivation de l'équation de Boltzmann).

- *Puisque f^2 a un temps d'échelle de variation plus court que f^1, alors f^2 atteint l'équilibre plus tôt soit $\frac{\partial (f^2)}{\partial t} = 0$.*
- *Les vitesses de deux particules fluide 1 et 2 séparées d'une distance $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\| \gg r_0$ qui entrent en collision sont a priori non corrélées et indépendantes de leur position, soit $f^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) \underset{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\| \gg r_0}{\longrightarrow} f^1(\mathbf{x}_1, t) f^1(\mathbf{x}_2, t)$.*
- *La portée r_0 des forces d'interactions $\mathbf{k}_{ij}$ est presque nulle du point de vue de f^1, cela s'exprime par le fait que juste avant et juste après la collision on a $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2 = \mathbf{x}$.*

À partir des hypothèses (1) et en ignorant les accélérations $\mathbf{g}_i$, nous pouvons évaluer le terme de collision (Annexe A.1.3) :

$$\tfrac{\partial f^1}{\partial t}|_{coll} \quad = \quad \textstyle\int |\boldsymbol{\xi}_1 - \boldsymbol{\xi}_2| (\frac{d\sigma}{d\Omega}) [f^1(\boldsymbol{\xi}_1') f^1(\boldsymbol{\xi}_2') - f^1(\boldsymbol{\xi}_1) f^1(\boldsymbol{\xi}_2)] \, d\Omega \, d\boldsymbol{\xi}_2, \tag{2.21}$$

où σ, Ω, $\boldsymbol{\xi}_i$ et $\boldsymbol{\xi}'_i$ sont respectivement la section transversale différentielle, l'angle solide et les quantités de mouvement avant et après la collision de la particule i. Cependant, habituellement l'équation de Boltzmann est introduite sous une forme différente, dans laquelle la fonction inconnue est la fonction distribution de masse f relié à f^1, par la simple relation :

$$f = mf^1, \tag{2.22}$$

où m est la masse de la particule et M est la masse totale du système de masse. A partir de la condition de normalisation(Eq. (2.7)) de f^1, nous avons :

$$\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\mathbf{x} d\boldsymbol{\xi} = M, \forall t. \tag{2.23}$$

Il est ensuite très simple de déduire l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{g} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f = \int |\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}_\star| (\frac{d\sigma}{d\Omega})[f(\boldsymbol{\xi}')f(\boldsymbol{\xi}'_\star) - f(\boldsymbol{\xi})f(\boldsymbol{\xi}_\star)]\, d\Omega\, d\boldsymbol{\xi}_\star. \tag{2.24}$$

où $\boldsymbol{\xi}_\star$ et $\boldsymbol{\xi}'_\star$ sont respectivement, les vitesses microscopiques de la particule voisine avant et après la collision. Dans la suite nous ferons référence à l'Eq. (2.24) comme l'équation de Boltzmann et l'intégrale correspondant à son terme de droite comme le terme de collision ou intégrale collision. Pour simplifier la notation le terme de collision sera noté $\frac{\partial f}{\partial t}|_{coll}$.

2.2.2.2 Invariants de collision et distribution d'équilibre

L'intégrale de collision de l'Eq. (2.24) satisfait des propriétés qui ont un sens physique clair et sont utiles à la détermination des équations macroscopiques. On appelle ***invariant de collision*** une fonction $\varphi(\boldsymbol{\xi})$ qui satisfait l'équation suivante :

$$\int \frac{\partial f^{eq}}{\partial t}|_{coll}\, \varphi(\boldsymbol{\xi})\, d\boldsymbol{\xi} = 0. \tag{2.25}$$

On montre (Cercignani, 1988), que toutes les fonctions $\varphi(\boldsymbol{\xi})$ qui vérifient l'Eq. (2.25) vérifient aussi l'égalité suivante :

$$\varphi(\boldsymbol{\xi}) + \varphi(\boldsymbol{\xi}_\star) = \varphi(\boldsymbol{\xi}') + \varphi(\boldsymbol{\xi}'_\star). \tag{2.26}$$

Ainsi, l'interprétation des invariants de collision est claire : il s'agit de toutes les fonctions $\varphi(\boldsymbol{\xi})$ qui sont conservées pendant une collision élastique.

Il peut être montré (Cercignani, 1988), que la forme générale d'un invariant de collision est une combinaison linéaire des quantités physiques conservées par une collision élastique, à savoir, la masse, la quantité de mouvement et l'énergie :

$$\varphi(\boldsymbol{\xi}) = a + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\xi} + c\,\xi^2, \tag{2.27}$$

où a et c sont des constantes et $\mathbf{b}$ un vecteur constant. Ainsi, les fonctions $\varphi_0 = 1, (\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) = \boldsymbol{\xi}, \varphi_4 = \xi^2$ sont linéairement indépendantes, et représentent une base pour l'espace des invariants de collision $\varphi(\boldsymbol{\xi})$.

Définissons maintenant la fonction de distribution d'équilibre f^{eq} comme étant la solution de l'Eq. (2.24) de Boltzmann qui est indépendante du temps, $\frac{\partial f^{eq}}{\partial t} = 0$. Nous verrons aussi que c'est la forme limite de la fonction de distribution f quand le temps tend vers l'infini. Supposons l'absence de forces extérieures soit $\mathbf{g} = \mathbf{0}$, il est alors cohérent de considérer en plus que la fonction de distribution à l'équilibre est indépendante de $\mathbf{x}$, $\nabla_{\mathbf{x}} f^{eq} = 0$. Ainsi, la fonction de distribution d'équilibre s'obtient par :

$$\frac{\partial f^{eq}}{\partial t}|_{coll} = 0. \tag{2.28}$$

Une condition suffisante (Huang, 1987) pour que f^{eq} vérifie l'Eq. (2.28) est :

$$f^{eq}(\boldsymbol{\xi}')f^{eq}(\boldsymbol{\xi}'_\star) - f^{eq}(\boldsymbol{\xi})f^{eq}(\boldsymbol{\xi}_\star) = 0. \tag{2.29}$$

Pour trouver f^{eq} considérons le logarithme à l'Eq. (2.29) :

$$lnf^{eq}(\boldsymbol{\xi}') + lnf^{eq}(\boldsymbol{\xi}'_\star) = lnf^{eq}(\boldsymbol{\xi}) + lnf^{eq}(\boldsymbol{\xi}_\star). \tag{2.30}$$

Dans cette condition, lnf^{eq} correspond parfaitement à la définition d'un invariant de collision. En utilisant l'Eq. (2.27), nous obtenons la forme générale de la fonction distribution d'équilibre :

$$f^{eq}(\boldsymbol{\xi}) = exp(a + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\xi} + c\,\xi^2). \tag{2.31}$$

2.2.2.3 Approximation BGK

Le principal obstacle dans la résolution de l'Eq. (2.24) de Boltzmann est la forme compliquée de l'intégrale de collision. Pour cette raison des approximations de l'opérateur de collision $\frac{\partial f}{\partial t}|_{coll}$ ont été proposées. L'idée de base des modèles est qu'un modèle de collision doit satisfaire deux propriétés fondamentales pour retrouver le même comportement que l'intégrale de collision (Cercignani, 1988) :

— les invariants de collision doivent rester les mêmes,

— le terme de collision $\frac{\partial f^{eq}}{\partial t}|_{coll}$ doit satisfaire :

$$\int lnf \frac{\partial f}{\partial t}|_{coll} \leq 0, \tag{2.32}$$

où l'égalité est vérifiée si $f = f^{eq}$.

Le modèle de collision le plus simple et le plus utilisé est l'opérateur BGK (*Bhatnagar, Gross, et Krook*) (Bhatnagar et al., 1954), selon lequel l'effet de la collision est proportionnel à l'écart entre la fonction de distribution f et la fonction de distribution d'équilibre f^{eq} :

$$\frac{\partial f}{\partial t}|_{coll} \simeq -\frac{f - f^{eq}}{\tau_c}, \tag{2.33}$$

Nous obtenons ainsi l'équation de Boltzmann-BGK :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{g} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f = -\frac{f - f^{eq}}{\tau_c}, \tag{2.34}$$

avec τ_c la durée de la collision.

2.2.3 De Boltzmann à l'hydrodynamique

2.2.3.1 Définition des quantités macroscopiques

L'état macroscopique $(\rho, \mathbf{v}, T)$ du fluide peut être déterminé en effectuant des moyennes appropriées de la fonction de distribution 1-particule f^1. Rappelons à partir de l'Eq. (2.6) que $f^1(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t)\, d\mathbf{x}_1\, d\boldsymbol{\xi}_1$ est la probabilité de trouver une particule à l'instant t dans une position et une vitesse au voisinage infinitésimal de $\mathbf{x}_1$ et $\boldsymbol{\xi}_1$. Alors on peut en déduire (Martin, 2012) que, $f^1(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t)\, d\boldsymbol{\xi}_1$ est la probabilité de trouver une particule à l'instant t dans une position au voisinage infinitésimal de $\mathbf{x}_1$ et ce, quel que soit $\boldsymbol{\xi}_1$. A partir de cette définition la masse infinitésimale $dM(\mathbf{x}, t)$ en $\mathbf{x}$ à l'instant t est donnée par :

$$dM = m\, d\mathbf{x} \int f^1\, d\boldsymbol{\xi}_1. \tag{2.35}$$

Ainsi, la définition de la densité d'un point de vue statistique est :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int f\, d\boldsymbol{\xi}, \tag{2.36}$$

où $\mathbf{x}$ est la variable position macroscopique associée à la position microscopique $\mathbf{x}_1$ et dans un soucis de simplification de l'écriture $\boldsymbol{\xi} \equiv \boldsymbol{\xi}_1$. À partir des mêmes considérations, nous pouvons déterminer l'expression de la densité de quantité de mouvement :

$$\rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \int \boldsymbol{\xi} f\, d\boldsymbol{\xi}. \tag{2.37}$$

À partir d'ici, il est utile de décomposer la vitesse microscopique $\boldsymbol{\xi}$ comme étant la vitesse macroscopique $\mathbf{v}$ plus une pertubation $\mathbf{c}$ et pour simplifier les expressions nous omettrons les arguments des fonctions :

$$\boldsymbol{\xi} = \mathbf{v} + \mathbf{c}. \tag{2.38}$$

Soit le tenseur flux de quantité de mouvement $\mathbf{P}$ dont la composante P_{ij} représente la projection la quantité de mouvement selon la direction i sur la surface de normale orientée selon j. Son expression est donnée par :

$$P_{ij} = \int \xi_i\, \xi_j\, f d\boldsymbol{\xi}. \tag{2.39}$$

Ainsi, le tenseur $\mathbf{P}$, composé de tous les flux de quantité de mouvement possibles, est un tenseur symétrique de second ordre. L'utilisation de l'Eq. (2.38), nous donne :

$$P_{ij} = \rho v_i v_j + \int c_i\, c_j\, f d\boldsymbol{\xi}. \tag{2.40}$$

À partir de l'Eq. (2.40), nous pouvons voir que le tenseur flux se décompose en une partie associée à la vitesse macroscopique, et une autre partie engendrée par la composante fluctuante **c** de la vitesse microscopique. Cette dernière partie n'est rien d'autre que l'opposé du ***"tenseur de contraintes"*** dans une description macroscopique du fluide, ainsi nous constatons que le tenseur flux de quantité de mouvement associé aux vitesses microscopiques aléatoires est la cause des forces de surface :

$$\sigma_{ij} = -\int c_i\, c_j\, f d\boldsymbol{\xi}. \tag{2.41}$$

À partir de l'Eq. (2.41), on retrouve immédiatement la symétrie du tenseur de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$. La même procédure appliquée à la densité d'énergie E nous obtenons :

$$\begin{aligned} E &= \tfrac{1}{2}\textstyle\int \xi^2\, f d\boldsymbol{\xi}, \\ &= \tfrac{1}{2}\rho v^2 + \tfrac{1}{2}\textstyle\int c_i c_i\, f d\boldsymbol{\xi}, \\ &= \tfrac{1}{2}\rho v^2 - \tfrac{1}{2}\sigma_{ii}. \end{aligned} \tag{2.42}$$

La convention de sommation d'Einstein est utilisée pour répéter les indices dans la notation des composantes, c'est à dire $c^2 = c_i c_i \equiv \sum_i c_i^2$ et $\sigma_{ii} \equiv \sum_i \sigma_{ii} = \mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma})$. Nous constatons encore que l'énergie est décomposée, en une énergie cinétique macroscopique et un terme causé par les perturbations sur la vitesse microscopique. Ce dernier terme représente l'***energie interne***, que nous définissons alors comme suit :

$$\rho e = \frac{1}{2}\int c_i\, c_i\, f d\boldsymbol{\xi}. \tag{2.43}$$

Comme la pression p est définie comme la partie isotrope du tenseur de contrainte $p = -\frac{\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma})}{3}$, nous avons :

$$p = \frac{2}{3}\rho e. \tag{2.44}$$

L'Eq. (2.44), représente l'équation d'état du fluide. Dans le cas isotherme, nous pouvons souligner une relation linéaire entre pression p et la densité ρ puisque l'énergie interne est constante. Dans ce cas, selon le théorème de l'équipartition (Diu et al., 1996) l'énergie interne moyenne est :

$$e = \frac{3}{2}RT, \tag{2.45}$$

où T est la température absolue et $R = \frac{k_b}{m}$ est la constante des gaz parfait avec k_b la constante de Boltzmann et m la masse de la molaire du fluide. A partir des Eq. (2.44) et (2.45) on retrouve l'équation d'état des gaz parfaits :

$$p = \rho RT. \tag{2.46}$$

Pour le vecteur flux d'énergie $\mathbf{Q}$ où la composante Q_i est le flux d'énergie sur une surface de normale selon l'axe x_i, nous avons :

$$\begin{aligned} Q_i &= \tfrac{1}{2}\int \xi_i \xi^2 f d\boldsymbol{\xi}, \\ &= v_i(\tfrac{1}{2}\rho v^2 + e) - v_i\sigma_{ij} + \tfrac{1}{2}\int c_i c_j c_j f d\boldsymbol{\xi}. \end{aligned} \tag{2.47}$$

De même que précédemment le flux d'énergie peut être scindé en trois parties, écoulement macroscopique de l'énergie cinétique et de l'énergie interne, le travail des contraintes par unité de temps, et un dernier terme correspondant à la perturbation sur la vitesse microscopique. Ce terme représente le ***flux de chaleur*** q_i :

$$q_i = \frac{1}{2}\int c_i c_j c_j f d\boldsymbol{\xi}. \tag{2.48}$$

Enfin, à partir des définitions de la densité ρ (Eq. (2.36)), la quantité de mouvement $\rho\mathbf{v}$ (Eq. (2.37)) et de l'énergie interne ρe (Eq. (2.43)) nous pouvons identifier les constantes de la forme générale de la fonction d'équilibre f^{eq}, nous obtenons :

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi e_T)^{\frac{D}{2}}} exp[-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})^2}{2e_T}], \tag{2.49}$$

où D est la dimension de l'espace des positions et $e_T = RT$, e_T peut être interprétée comme l'***énergie thermique*** par unité de masse et $\sqrt{e_T}$ comme une vitesse microscopique caractéristique. La forme finale de f^{eq} est bien connue sous le nom de ***distribution de Maxwell-Boltzmann***, et à partir de l'Eq. (2.49) on constate que, la fonction de distribution de l'équilibre, et l'état d'équilibre, sont déterminés de manière univoque par ρ, $\mathbf{v}$, et e :

$$\rho = \int f^{eq} d\boldsymbol{\xi}, \tag{2.50}$$

$$\rho\mathbf{v} = \int \boldsymbol{\xi} f^{eq} d\boldsymbol{\xi}, \tag{2.51}$$

$$\rho e = \frac{1}{2}\int c_i c_i f^{eq} d\boldsymbol{\xi}. \tag{2.52}$$

2.2.3.2 Lois de conservation

Définissons la valeur moyenne relative d'une quantité $\mathcal{A}$ par :

$$\langle \mathcal{A} \rangle \equiv \frac{\int \mathcal{A} f d\boldsymbol{\xi}}{\int f d\boldsymbol{\xi}} = \frac{1}{\rho}\int \mathcal{A} f d\boldsymbol{\xi}. \tag{2.53}$$

À partir de la définition des invariants $\varphi(\boldsymbol{\xi})$ de collision donnée en Eq. (2.25) et de l'Eq. (2.24) de Boltzmann, nous avons :

$$\int (\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{g} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f)\, \varphi d\boldsymbol{\xi} = 0. \tag{2.54}$$

Nous pouvons en déduire le ***théorème de conservation*** suivant :

Théorème 2 (Conservation).

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle \rho\, \varphi\rangle + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \rho\, \boldsymbol{\xi}\, \varphi\rangle - \rho\langle \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(\varphi)\rangle - \rho\langle \mathbf{g} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}}(\varphi)\rangle - \rho\langle \nabla_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{g})\, \varphi\rangle = 0. \tag{2.55}$$

Conservation de masse Pour $\varphi = 1$, nous obtenons grâce au théorème (2) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \tag{2.56}$$

Conservation de la quantité de mouvement Pour $\varphi = \boldsymbol{\xi}$, nous obtenons grâce au théorème (2) :

$$\frac{\partial(\rho\, \boldsymbol{\xi})}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \rho\, \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi}\rangle = \rho \mathbf{g}. \tag{2.57}$$

Comme nous connaissons l'expression du tenseur de contrainte donné par l'Eq. (2.41) :

$$\boldsymbol{\sigma} = -\int \mathbf{c} \otimes \mathbf{c}\, f d\boldsymbol{\xi},\ \mathbf{c} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}$$

nous pouvons réécrire l'Eq. (2.57) sous la forme :

$$\frac{\partial(\rho\, \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho\, \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \rho \mathbf{g}. \tag{2.58}$$

En rappelant que la pression p est définie comme la partie isotrope du tenseur de contrainte, nous pouvons écrire le tenseur de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ sous la forme :

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{1} + \boldsymbol{\sigma}^d, \tag{2.59}$$

où $\mathbf{1}$ et $\boldsymbol{\sigma}^d$ représentent respectivement le tenseur identité d'ordre 2 et le tenseur d'ordre 2 de contrainte déviatorique, qui est de trace nulle. L'Eq. (2.58) devient :

$$\frac{\partial(\rho\, \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho\, \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla_{\mathbf{x}}\, p + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}^d + \rho \mathbf{g}. \tag{2.60}$$

Dans l'Eq. (2.60), $-\nabla_{\mathbf{x}}\, p + \rho \mathbf{g}$ et $\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}^d$ représentent respectivement la pression motrice et la dissipation visqueuse.

Conservation de l'énergie Pour $\varphi = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}\|^2 = \frac{c^2}{2}$, nous obtenons grâce au théorème (2) :

$$\frac{1}{2}\frac{\partial(\rho\, c^2)}{\partial t} + \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \rho\, \boldsymbol{\xi}\, c^2\rangle - \frac{1}{2}\rho\langle \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(c^2)\rangle = 0. \tag{2.61}$$

À partir des définitions de l'énergie interne et du flux de chaleur données aux Eq. (2.43) et (2.48) nous avons :

$$e = \frac{1}{2}\langle c^2\rangle, \tag{2.62}$$

$$\mathbf{q} = \frac{1}{2}\rho\langle \mathbf{c}\, c^2\rangle. \tag{2.63}$$

Aussi nous avons :

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{2}\rho\langle \boldsymbol{\xi}\, c^2\rangle &= \tfrac{1}{2}\rho\langle \mathbf{c}\, c^2\rangle + \tfrac{1}{2}\rho \mathbf{v}\langle c^2\rangle \\ &= \mathbf{q} + \rho \mathbf{v} e \end{aligned} \tag{2.64}$$

et à partir de l'Eq. (2.41) nous avons :

$$\rho\langle \boldsymbol{\xi}\, \mathbf{c}\rangle = \rho\langle \mathbf{c}\otimes\mathbf{c}\rangle + \rho\mathbf{v}\otimes\langle\mathbf{c}\rangle = -\boldsymbol{\sigma}. \tag{2.65}$$

En remplaçant les Eq. de (2.62) à (2.65) dans l'Eq. (2.61) nous obtenons :

$$\frac{\partial(\rho\, e)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}}\cdot(\rho\mathbf{v}e) + \nabla_{\mathbf{x}}\cdot\mathbf{q} - \boldsymbol{\sigma} : \nabla_{\mathbf{x}}(\mathbf{v}) = 0. \tag{2.66}$$

Puisque $\boldsymbol{\sigma}$ est symétrique ($\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$) nous avons :

$$\boldsymbol{\sigma} : \nabla_{\mathbf{x}}(\mathbf{v}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} : [\nabla_{\mathbf{x}}^T(\mathbf{v}) + \nabla_{\mathbf{x}}(\mathbf{v})]. \tag{2.67}$$

Appelons $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ le tenseur d'ordre 2 des vitesses de déformation, on a $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{2}[\nabla_{\mathbf{x}}^T(\mathbf{v}) + \nabla_{\mathbf{x}}(\mathbf{v})]$
La forme finale de la conservation de l'énergie interne est donnée par :

$$\frac{\partial(\rho\, e)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}}\cdot(\rho\mathbf{v}e) = -\nabla_{\mathbf{x}}\cdot\mathbf{q} + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}. \tag{2.68}$$

Les Eqs. (2.56), (2.60) et (2.68) de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie sont insuffisantes pour la résolution du système d'équations qu'elles forment car le nombre d'inconnues (ρ, e, les 3 composants de $\mathbf{v}$, les 3 composantes de $\mathbf{q}$, et les 6 composantes du tenseur $\boldsymbol{\sigma}$) est largement supérieur au nombre d'équations disponibles. Dans une approche macroscopique des lois de comportement de $\boldsymbol{\sigma}$ et de $\mathbf{q}$ seraient donc nécessaires pour la résolution du système. Dans l'approche de la théorie cinétique nous n'avons pas besoin de ces lois de comportement car toute l'information sur le comportement est stockée dans la fonction de distribution de masse f.

2.2.3.3 Equations constitutives

Comme cela a précédemment été souligné, pour donner un sens physique aux équations de conservations (2.56), (2.60) et (2.68), nous pouvons construire $\boldsymbol{\sigma}$ et $\mathbf{q}$ à partir de la fonction de distribution f. Pour ce faire il faut donc déterminer une forme pertinente de f et en déduire $\boldsymbol{\sigma}$ et $\mathbf{q}$ à partir des Eq. (2.41) et (2.48). Pour construire f nous adoptons l'approche proposée par (Chapman and Cowling, 1970), qui est une méthode multi échelle particulière qui lorsqu'elle est appliquée à l'équation de Boltzmann donne les équations de conservations et, en plus, nous permet d'identifier les coefficients de transport. Ici nous nous intéressons aux approximations de $\boldsymbol{\sigma}$ et $\mathbf{q}$ par la méthode de Chapmann et Enskog.

Rappelons d'abord que le comportement hydrodynamique d'un fluide nécessite la séparation des échelles micro/macro. Cette séparation, est caractérisée par un très petit nombre appelé nombre de Knudsen ($K_n = \frac{\lambda}{L_0} << 1$)($\lambda$ et L_0 sont respectivement le libre parcours moyen définit comme la distance libre parcourue par une particule entre deux collisions et la longueur caractéristique macroscopique). Cela implique que le fluide soit toujours très proche de l'équilibre thermodynamique local.

Pour de tels systèmes, proches de l'équilibre, il est naturel d'utiliser la théorie des perturbations. Ainsi, dans le ***développement de Chapmann-Enskog***, la fonction de distribution

f est construite comme un développement perturbatif autour de l'équilibre local f^{eq}. Le petit paramètre ϵ utilisé dans le développement devant refléter la ***séparation d'échelle***, est assimilé au nombre de Knudsen. On écrira donc f sous la forme suivante :

$$f \simeq f^{(0)} + \epsilon f^{(1)},\ f^{(0)} \equiv f^{eq},\ \epsilon \equiv K_n \tag{2.69}$$

A l'ordre 0 nous avons à partir de l'Eq. (2.49) :

$$f^{(0)} = \frac{\rho}{(2\pi e_T)^{\frac{3}{2}}} exp[-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})^2}{2e_T}],\ D = 3 \tag{2.70}$$

Calculons à partir des Eq. (2.41) et (2.48) les contraintes $\boldsymbol{\sigma}^{(0)}$ et $\mathbf{q}^{(0)}$ à l'ordre 0. Pour ce faire posons :

$$A(\mathbf{x}, t) = \frac{\rho}{(2\pi e_T)^{\frac{3}{2}}} \tag{2.71}$$

$$B(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2e_T} \tag{2.72}$$

alors nous avons :

$$\mathbf{q}^{(0)} = \frac{1}{2} \int \mathbf{c}\, c^2 A(\mathbf{x}, t) exp[-B(\mathbf{x}, t)c^2] d\boldsymbol{\xi} = 0 \tag{2.73}$$

et

$$\boldsymbol{\sigma}^{(0)} = -\int \mathbf{c} \otimes \mathbf{c} A(\mathbf{x}, t) exp[-B(\mathbf{x}, t)c^2] d\boldsymbol{\xi} = -p\mathbf{1} \tag{2.74}$$

avec $\mathbf{1}$ le tenseur unité d'ordre 2 et :

$$p = \int c^2 A(\mathbf{x}, t) exp[-B(\mathbf{x}, t)c^2] d\boldsymbol{\xi} = \rho e_T \tag{2.75}$$

Ainsi en substituant $\boldsymbol{\sigma}^{(0)}$ et $\mathbf{q}^{(0)}$ dans les équations de ((2.60)) et ((2.68)) nous obtenons les équations d'Euler :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v}) & = & 0 \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v} & = & -\frac{1}{\rho} \nabla_{\mathbf{x}} p + \mathbf{g} \\ \frac{\partial e_T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} e_T + \frac{1}{C_V} e_T \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} & = & 0 \end{cases} \tag{2.76}$$

avec $C_V = \frac{3}{2}$ la capacité de chaleur à volume constant et $p = \rho e_T$. A l'ordre 0 nous retrouvons donc les équations d'Euler qui caractérisent l'écoulement d'un fluide de viscosité nulle et décrivant un écoulement stationnaire.

A l'ordre 1 Nous allons estimer l'erreur d'approximation commise à l'ordre 0 en utilisant :

$$\epsilon f^{(1)} = f^{neq} = f - f^{eq}, \tag{2.77}$$

et comme à partir de l'Eq. (2.34) de Boltzmann-BGK nous avons :

$$f^{neq} \simeq -\tau_c(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + \mathbf{g} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}}) f^{eq}, \tag{2.78}$$

soit $\epsilon \boldsymbol{\sigma}^{(1)} = \boldsymbol{\sigma}^{neq}$ et $\epsilon \mathbf{q}^{(1)} = \mathbf{q}^{neq}$. Notons que pour calculer f^{neq}, f^{eq} dépend de $\mathbf{x}$ et de t seulement à travers ρ, e_T et $\mathbf{v}$. Ainsi nous avons :

$$\begin{cases} \frac{\partial f^{eq}}{\partial \rho} & = & \frac{f^{eq}}{\rho}, \\ \frac{\partial f^{eq}}{\partial e_T} & = & \frac{1}{e_T}(\frac{c^2}{2e_T} - \frac{3}{2}) f^{eq}, \\ \nabla_{\mathbf{v}} f^{eq} & = & \frac{\mathbf{c}}{2e_T} f^{eq}, \\ \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f^{eq} & = & -\frac{\mathbf{c}}{2e_T} f^{eq}, \\ \mathbf{c} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}, \end{cases} \tag{2.79}$$

alors nous pouvons écrire f^{neq} sous la forme :

$$f^{neq} \simeq -\tau_c[\frac{1}{\rho} D(\rho) + \frac{1}{e_T}(\frac{c^2}{2e_T} - \frac{3}{2}) D(e_T) + \frac{\mathbf{c}}{e_T} \cdot D(\mathbf{v}) - \frac{1}{e_T} \mathbf{v} \cdot \mathbf{c}] f^{eq}, \tag{2.80}$$

$$D(X) \equiv (\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}) X. \tag{2.81}$$

En utilisant les Eqs. (2.76) de l'hydrodynamique à l'ordre 0, nous pouvons voir que :

$$\begin{aligned} D(\rho) &= -\rho \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{c} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \rho, \\ D(e_T) &= -\tfrac{2}{3} e_T \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{c} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} e_T, \\ D(\mathbf{v}) &= -\tfrac{1}{\rho} \nabla_{\mathbf{x}} p + \mathbf{g} + \mathbf{c} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v}, \ p = \rho e_T. \end{aligned} \tag{2.82}$$

En remplaçant les valeurs de $D(X)$ de l'Eq (2.82) dans l'Eq. (2.80) nous pouvons mettre f^{neq} sous la forme :

$$f^{neq} \simeq -\tau_c[\frac{1}{e_T} \mathbf{c} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} e_T (\frac{1}{2e_T} c^2 - \frac{5}{2}) + \frac{1}{e_T} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} : (\mathbf{c} \otimes \mathbf{c} - \frac{1}{3} c^2 \mathbf{1})] f^{eq}, \tag{2.83}$$

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{2}[\nabla_{\mathbf{x}}^T(\mathbf{v}) + \nabla_{\mathbf{x}}(\mathbf{v})]. \tag{2.84}$$

Nous pouvons maintenant effectuer le calcul de $\boldsymbol{\sigma}^{neq}$ et $\mathbf{q}^{neq}$ en fonction des Eq. (2.41) et (2.48). Pour le flux de chaleur $\mathbf{q}^{neq}$ seulement le premier de terme de f^{neq} dans l'Eq. (2.83) contribue à l'intégrale :

$$\begin{aligned} \mathbf{q}^{neq} &= \tfrac{1}{2} \int \mathbf{c}\, c^2 f^{neq} d\boldsymbol{\xi}, \\ &= -\tfrac{\tau}{2} \int \mathbf{c}\, c^2 \tfrac{1}{e_T} \mathbf{c} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} e_T (\tfrac{1}{2e_T} c^2 - \tfrac{5}{2}) f^{eq} d\mathbf{c}, \\ &= -\Lambda \nabla_{\mathbf{x}} e_T, \end{aligned} \tag{2.85}$$

où :

$$\Lambda = \frac{\tau}{6e_T} \int \mathbf{c}^4 (\frac{1}{2e_T} c^2 - \frac{5}{2}) f^{eq} d\mathbf{c} = \frac{5}{2} \tau_c \rho e_T, \tag{2.86}$$

est la conductivité thermique du fluide. Pour la contrainte $\boldsymbol{\sigma}^{neq}$ seulement, le second terme de f^{neq} dans l'Eq. (2.83) contribue à l'intégrale :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}^{neq} &= -\int \mathbf{c} \otimes \mathbf{c} f^{neq} d\boldsymbol{\xi}, \\ &= \tfrac{\tau_c \rho}{e_T} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} : \int \mathbf{c} \otimes \mathbf{c} \otimes (\mathbf{c} \otimes \mathbf{c} - \tfrac{1}{3} c^2 \mathbf{1}) f^{eq} d\mathbf{c}. \end{aligned} \tag{2.87}$$

Pour calculer $\boldsymbol{\sigma}^{neq}$, rappelons que $\boldsymbol{\sigma}^{neq}$ est un tenseur symétrique d'ordre 2 de trace nulle ($\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}^{neq}) = 0$), et dépend linéairement du tenseur symétrique $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$. Alors $\boldsymbol{\sigma}^{neq}$ doit avoir la forme suivante :

$$\boldsymbol{\sigma}^{neq} = 2\eta(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{1}{3}\mathbf{1}\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}) \tag{2.88}$$

où $\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}$ n'est rien d'autre que la trace de $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$:

$$\mathrm{Tr}(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{ii} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} \tag{2.89}$$

et η une constante. Pour calculer cette constante η il suffit de calculer une seule composante non nulle de $\sigma_{ij}^{neq}, i \neq j$ de $\boldsymbol{\sigma}^{neq}$:

$$\sigma_{ij}^{neq} = 2\frac{\tau_c}{e_T}\dot{\varepsilon}_{ij} \int c_i^2\, c_j^2 f^{eq} d\mathbf{c} \tag{2.90}$$

Nous pouvons en déduire donc que η est :

$$\eta = \frac{\tau_c}{e_T} \int c_i^2\, c_j^2 f^{eq} d\mathbf{c} = \tau_c \rho e_T \tag{2.91}$$

Enfin en remplaçant $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^{(0)} + \epsilon\boldsymbol{\sigma}^{(1)}$ et $\mathbf{q} = \mathbf{q}^{(0)} + \epsilon\mathbf{q}^{(1)}$ dans les équations de conservation (2.56), (2.60) et (2.68) nous aboutissons aux équations de Navier-Stokes-Fourier avec les lois de comportement suivantes :

$$\begin{cases} p = \rho e_T \\ \boldsymbol{\sigma}^d = 2\eta\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^d \\ \mathbf{q} = -\Lambda e_T \\ \frac{\Lambda}{C_V \eta} = \frac{5}{3} \end{cases} \tag{2.92}$$

Rappelons que p, $\boldsymbol{\sigma}^d$ et $\mathbf{q}$ sont la pression, le tenseur de contrainte visqueux (déviatorique) et le vecteur flux de chaleur. On retrouve ici un fluide Newtonien avec une équation d'état d'un gaz parfait et obéissant à la loi de Fourier mais avec une relation linéaire entre ses coefficients de transport Λ, C_V et η.

Remarque 1. *On constate que la viscosité dynamique de cisaillement η, la diffusivité thermique Λ et la capacité de chaleur C_V ont une dépendance linéaire. On retrouve bien l'hypothèse de Stokes pour les fluides Newtoniens dans laquelle la viscosité volumique est nulle $\eta^v = \eta' + \frac{2}{3}\eta = 0$. Cependant, la condition de linéarité entre les coefficients de transport constitue la limite d'application de l'Eq. (2.34) de Boltzmann-BGK pour retrouver les équations générales compressibles de Navier-Stokes-Fourier. Cela est dû au terme de collision simplifié à un seul temps de relaxation τ_c utilisé dans l'équation de Boltzmann-BGK.*

Dans notre cas, nous nous intéressons à des fluides Newtoniens à équation d'état de gaz parfait puis à équation d'état de gaz réel en condition isotherme. Avec une telle simplification nous retrouvons les équations de Navier-Stokes pour un fluide à équation d'état de gaz parfait à partir de l'équation de Boltzmann-BGK :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \\ \\ \frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla_{\mathbf{x}} p + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}^d + \rho \mathbf{g} \\ \\ p = \rho R T \\ \\ \boldsymbol{\sigma}^d = 2\eta \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^d \end{cases} \tag{2.93}$$

On verra par la suite que la discrétisation de l'équation de Boltzmann-BGK limitera d'avantage son application aux cas des fluides faiblement compressible. Enfin, nous montrerons au chapitre 3 que nous pouvons étendre l'équation d'état du fluide à celle des gaz réels permettant des transitions de phase liquide-gaz.

2.3 Implémentation numérique

La méthode de Boltzmann sur réseau standard est une résolution numérique de l'Eq. (2.34) de Boltzmann-BGK. Pour ce faire nous devons procéder à la discrétisation de cette équation dans l'espace des quantités de mouvement, dans l'espace des configurations et dans le temps. La discrétisation dans l'espace des quantités de mouvement peut se faire en discrétisant la fonction de distribution f sur une base de cet espace. La méthode de (Grad, 1949a) et (Grad, 1949b) propose une projection de la fonction de distribution f sur la base des polynômes d'Hermite dans l'espace des quantités de mouvement. Cette démarche de discrétisation a été proposée par (Shan and He, 1998), pour la construction des **LBM** ***(Lattice Boltzmann Method)*** en discrétisant l'équation de Boltzmann-BGK sur la base des polynômes d'Hermite et en calculant les moments de la fonction de distribution f par quadrature de Gauss-Hermite. Il est montré en particulier que les LBM classiques D_2Q_9 et D_3Q_{19} (D représente la dimension de l'espace des configurations et Q celui de l'espace des quantités de mouvement discrètes) s'obtiennent en développant la fonction de distribution d'équilibre jusqu'à l'ordre 2 sur la base des polynômes d'Hermite.

2.3.1 Discrétisation de l'espace des quantités de mouvement

Une description plus complète des polynômes de Hermite et de la méthode de quadrature de Gauss-Hermite est donnée en Annexe A.2. Pour ce faire partons de l'Eq. (2.34) de Boltzmann-BGK et de celle de la distribution d'équilibre $f^{(0)}$ écrite sous la forme :

$$f^{(0)} = \frac{\rho}{(\sqrt{e_T})^D}\omega(\frac{\boldsymbol{\xi}-\mathbf{v}}{\sqrt{e_T}}) \tag{2.94}$$

où $\omega(\boldsymbol{\xi})$ est définie comme la fonction poids suivante :

$$\omega(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} exp(\frac{-\xi^2}{2}) \tag{2.95}$$

avec $\xi^2 = \boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\xi}$. Rappelons aussi que les quantités macroscopiques ont été exprimées comme étant des moments de f à partir des 5 premiers invariants de collision $\int f\varphi(\boldsymbol{\xi})d\boldsymbol{\xi}$. Selon (Grad, 1949a), si $w^{-\frac{1}{2}}f$ est de carré intégrable alors nous pouvons l'écrire comme une série d'Hermite :

$$f(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi},t) = \omega(\boldsymbol{\xi})\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}a_{\boldsymbol{i}}^{(n)}(\mathbf{x},t)\mathcal{H}_{\boldsymbol{i}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}), \tag{2.96}$$

où $\boldsymbol{\mathcal{H}}^{(n)}$ est le polynôme d'Hermite d'ordre n et $\mathbf{a}^{(n)}$ les coefficients de la projection, ces 2 quantités sont des tenseurs symétriques d'ordre n. L'indice $\boldsymbol{i}$ est une abréviation pour les multiples indices $\{i_1,\cdots,i_n\}$ et le produit représente la contraction sur tous les n indices. Les polynômes d'Hermite sont définis comme suit :

$$\mathcal{H}_{\boldsymbol{i}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{(-1)^n}{\omega(\boldsymbol{\xi})}\nabla_{\boldsymbol{\xi_i}}^{(n)}\omega(\boldsymbol{\xi}) = \frac{(-1)^n}{\omega(\boldsymbol{\xi})}\frac{\partial^n\omega(\boldsymbol{\xi})}{\partial_{\xi_{i_1}}\cdots\partial_{\xi_{i_n}}}. \tag{2.97}$$

Ils présentent la relation d'orthogonalité suivante :

$$\int \omega\mathcal{H}_{\boldsymbol{i}}^{(n)}\mathcal{H}_{\boldsymbol{j}}^{(m)}d\boldsymbol{\xi} = \delta_{mn}\delta_{\boldsymbol{ij}}^{n}, \tag{2.98}$$

où $\delta_{\boldsymbol{ij}}^{n} = 1$ si $\boldsymbol{i} = \{i_1,\cdots,i_n\}$ est une permutation de $\boldsymbol{j} = \{j_1,\cdots,j_m\}$ et $\delta_{\boldsymbol{ij}}^{n} = 0$ ailleurs. Á partir de cette relation d'orthogonalité on montre que pour toute fonction f le n^{ieme} coefficient de Hermite est obtenu par :

$$\mathbf{a}^{(n)}(\mathbf{x},t) = \int f(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi},t)\boldsymbol{\mathcal{H}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi})d\boldsymbol{\xi}. \tag{2.99}$$

Á partir de l'Eq. (2.99), nous pouvons constater que tous les coefficients du développement de f en série d'Hermite sont des combinaisons linéaires des moments des quantités de mouvement de f. En particulier, en remplaçant les expressions explicites des polynômes d'Hermite (voir Eq. (A.20)-(A.23)) dans l'Eq. (2.99), les premières valeurs des coefficients sont directement identifiés par les variables hydrodynamiques familières :

$$a^{(0)} = \int f d\boldsymbol{\xi} = \rho \tag{2.100}$$

$$a_i^{(1)} = \int f\xi_i d\boldsymbol{\xi} = \rho v_i \tag{2.101}$$

$$a_{ij}^{(2)} = \int f(\xi_i\xi_j - \delta_{ij})d\boldsymbol{\xi} = -\sigma_{ij} + \rho(v_iv_j - \delta_{ij}) \tag{2.102}$$

où on a $\boldsymbol{\sigma} = -\int(\boldsymbol{\xi}-\mathbf{v})\otimes(\boldsymbol{\xi}-\mathbf{v})fd\boldsymbol{\xi}$. Puisque le développement en série d'Hermite a la particularité de déterminer de manière unique les moments de f jusqu'à un ordre donné par

les coefficients $\mathbf{a}^{(n)}$ du développement jusqu'à ce même ordre et sont inchangés par troncature, une approximation de l'équation de Boltzmann-BGK peut être faite en cherchant une solution approchée de cette forme :

$$\tilde{f}(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi},t) = \omega(\boldsymbol{\xi}) \sum_{n=0}^{N} \frac{1}{n!} a_{\boldsymbol{i}}^{(n)}(\mathbf{x},t)\mathcal{H}_{\boldsymbol{i}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}). \tag{2.103}$$

Comme nous souhaitons retrouver les équations de Navier-Stokes et que l'équation de conservation de la quantité de mouvement implique explicitement les moments de f jusqu'à l'ordre 2, il faut que $N \geq 2$. Dans cette approximation il est considéré que la fonction de distribution f se trouve entièrement dans le sous-espace engendré par les polynômes d'Hermite jusqu'à l'ordre N et que $\mathbf{a}^{(n)} \equiv 0$ si $n > N$. Puisque le polynôme $\tilde{f}\boldsymbol{\mathcal{H}}^{(n)}/\omega$ est un polynôme de degré $q \leq 2N$ si $n \leq N$, les coefficients d'Hermite de $\tilde{f}$ peuvent être calculés par une quadrature de Gauss-Hermite :

$$\mathbf{a}^{(n)}(\mathbf{x},t) = \int \omega(\boldsymbol{\xi}) \frac{\tilde{f}(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi},t)}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \boldsymbol{\mathcal{H}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \simeq \sum_{k=0}^{q-1} \frac{w_k \tilde{f}(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi}_k,t)\boldsymbol{\mathcal{H}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_k)}{\omega(\boldsymbol{\xi}_k)} \tag{2.104}$$

où $\boldsymbol{\xi}_k$ et w_k, $k = 0, \cdots, q-1$ sont les nœuds (vecteurs des vitesses microscopiques discrètes) et poids de la quadrature de degré $2N$. Posons ensuite $f_k(\mathbf{x},t) = w_k \tilde{f}(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi}_k,t)/\omega(\boldsymbol{\xi}_k)$ nous avons :

$$\rho = \sum_{k=0}^{q-1} f_k, \tag{2.105}$$

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\rho} \sum_{k=0}^{q-1} f_k \boldsymbol{\xi}_k, \tag{2.106}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} - \sum_{k=0}^{q-1} f_k \boldsymbol{\xi}_k \otimes \boldsymbol{\xi}_k. \tag{2.107}$$

L'équation d'évolution de f_k s'obtient en projetant l'Eq. (2.34) sur une base d'Hermite tronquée à l'ordre N et évaluée en $\boldsymbol{\xi}_k$. Cela doit être réalisé terme par terme. Commençons par la fonction de distribution d'équilibre f^{eq} de Maxwell-Boltzmann. Soit $\mathbf{a}_{(0)}^{(n)}$ le n-ième coefficient d'Hermite de $f^{(0)}$. En utilisant l'Eq. (2.99) nous avons :

$$\mathbf{a}_0^{(n)}(\mathbf{x},t) = \int f^{(0)}(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi},t)\boldsymbol{\mathcal{H}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}. \tag{2.108}$$

En remplaçant les expressions explicites des polynômes d'Hermite (voir Eq. (A.20)-(A.23)) comme précédemment dans l'Eq. (2.108), nous obtenons :

$$a_0^{(0)} = \rho, \tag{2.109}$$

$$\mathbf{a}_0^{(1)} = \rho \mathbf{v}, \tag{2.110}$$

$$\mathbf{a}_0^{(2)} = \rho(\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) + (e_T - 1)\mathbf{1}. \tag{2.111}$$

Alors la forme explicite de l'approximation $\tilde{f}^{(0)}$ à l'ordre $N = 2$ de la distribution d'équilibre est donnée par :

$$\tilde{f}^{(0)} = \omega(\boldsymbol{\xi}) \sum_{n=0}^{2} \frac{1}{n!} a_{0,\boldsymbol{i}}^{(n)} \mathcal{H}_{\boldsymbol{i}}^{(n)} \tag{2.112}$$

$$= \rho\omega(\boldsymbol{\xi}) \left\{ 1 + \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2} \left[(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{v})^2 - v^2 + (e_T - 1)(\xi^2 - D) \right] \right\}. \tag{2.113}$$

Notons que tous les termes proportionnels à $e_T - 1$ s'annulent pour un système isotherme dans lequel $e_T = 1$. Maintenant, donnons l'approximation du terme de force externe $\mathbf{s} = -\mathbf{g} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f$. Ce terme implique la dérivée de la fonction de distribution f par rapport à $\boldsymbol{\xi}$. Cette dérivée peut être mise sous la forme d'une série d'Hermite en utilisant les Eq. (2.96) et (A.19) :

$$\nabla_{\boldsymbol{\xi}} f = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{\boldsymbol{i}}^{(n)} \nabla_{\boldsymbol{\xi}} (\omega \mathcal{H}_{\boldsymbol{i}}^{(n)}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} a_{\boldsymbol{i}}^{(n)} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^{(n+1)} \omega \tag{2.114}$$

$$= -\omega \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{\boldsymbol{i}}^{(n)} \mathcal{H}_{\boldsymbol{i}}^{(n+1)} = -\omega \sum_{n=1}^{\infty} n \frac{1}{n!} a_{\boldsymbol{i}}^{(n-1)} \mathcal{H}_{\boldsymbol{i}}^{(n)} \tag{2.115}$$

Alors le terme de force est donné par

$$\mathbf{s} = \omega \mathbf{g} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} n \frac{1}{n!} a_{\boldsymbol{i}}^{(n-1)} \mathcal{H}_{\boldsymbol{i}}^{(n)}. \tag{2.116}$$

L'expression de l'approximation $\tilde{\mathbf{s}}$ du terme de force à l'ordre $N = 2$ est donnée par :

$$\tilde{\mathbf{s}}(\boldsymbol{\xi}) = \rho\omega(\boldsymbol{\xi}) \left[\mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\xi} + (\mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\xi})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi}) - \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \right]. \tag{2.117}$$

Finalement en utilisant $f_k^{(0)}(\mathbf{x}, t) = w_k \tilde{f}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}_k)/\omega(\boldsymbol{\xi}_k)$ et $s_k = w_k \tilde{s}(\boldsymbol{\xi}_k)/\omega(\boldsymbol{\xi}_k)$, nous obtenons l'équation d'évolution suivante pour f_k :

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_k \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_k = -\frac{1}{\tau_c} (f_k - f_k^{(0)}) + s_k, \tag{2.118}$$

$$f_k^{(0)} = \rho w_k \left[1 + \boldsymbol{\xi}_k \cdot \mathbf{v} + \frac{(\boldsymbol{\xi}_k \cdot \mathbf{v})^2}{2} - \frac{v^2}{2} \right], \tag{2.119}$$

$$s_k = \rho w_k \left[\mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\xi}_k + (\mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\xi}_k)(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi}_k) - \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \right]. \tag{2.120}$$

Il est plus intéressant d'absorber le terme de force s_k dans $f_k^{(0)}$ pour construire une distribution d'équilibre effective $f_k^{eq} \equiv f_k^{(0)} + \tau_c s_k$. En notant par $\mathbf{v}' = \mathbf{v} + \tau_c \mathbf{g}$ la vitesse post-collision, nous avons :

$$f_k^{eq} = w_k \sum_{n=0}^{2} \frac{1}{n!} a_{eq,\boldsymbol{i}}^{(n)} \mathcal{H}_{\boldsymbol{i}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_k) \tag{2.121}$$

avec

$$a_{eq}^{(0)} = \rho, \tag{2.122}$$

$$\mathbf{a}_{eq}^{(1)} = \rho \mathbf{v}', \tag{2.123}$$

$$\mathbf{a}_{eq}^{(2)} = \rho[\mathbf{v}' \otimes \mathbf{v}' + (e_T - 1)\mathbf{1}] - \rho\tau_c^2 \mathbf{g} \otimes \mathbf{g}. \tag{2.124}$$

Finalement, nous obtenons la forme de l'équation de Boltzmann discrétisée dans l'espace des quantités de mouvement microscopiques :

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_k \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_k = -\frac{1}{\tau_c}(f_k - f_k^{eq}), \tag{2.125}$$

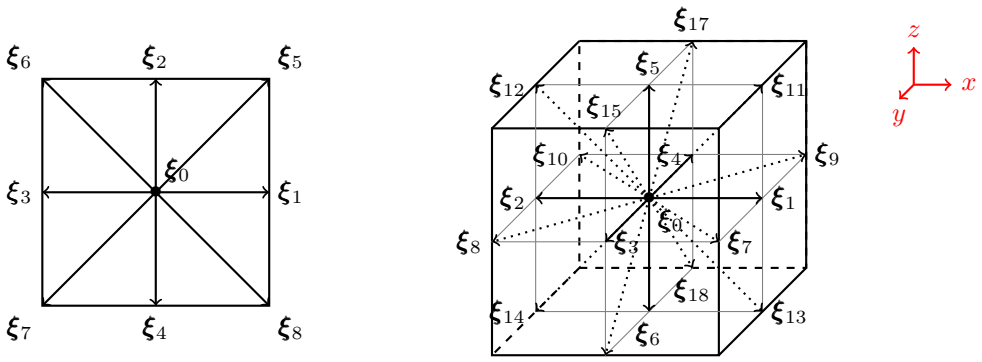
$$f_k^{eq} = \rho w_k \left[1 + \frac{\boldsymbol{\xi}_k \cdot \mathbf{v}'}{c_s^2} + \frac{(\boldsymbol{\xi}_k \cdot \mathbf{v}')^2}{2c_s^4} - \frac{v'^2}{2c_s^2}\right] + f_k', \tag{2.126}$$

avec,

$$f_k' = \rho w_k \tau_c^2 \left[-\frac{(\mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\xi}_k)^2}{c_s^4} + \frac{g^2}{c_s^2}\right], \tag{2.127}$$

où $c_s = \frac{\Delta x}{\sqrt{3}\Delta t}$ est un paramètre introduit pour mettre à l'échelle les variables $\boldsymbol{\xi}_k$, $\mathbf{v}$ et $\mathbf{g}$. Les paramètres Δx et Δt sont l'espacement de la grille et le pas de temps de calcul.

Les choix efficaces des quantités de mouvement discrètes seraient d'obtenir autant de précision que possible pour un nombre de vitesses microscopiques discrètes fixé ou pour une précision donnée d'aboutir à un nombre minimum de vitesses microscopiques discrètes possibles. Notons par $E_{D,m}^q$ les formules de quadrature, q est le nombre de nœuds de la quadrature ou nombre de vitesses microscopiques, D la dimension de l'espace et m la précision algébrique. Ainsi comme montré en Annexe A.2 en 2-D et en 3-D pour les formules $E_{2,5}^9$ et $E_{3,5}^{19}$ on retrouve les schémas classiques de LBM, D_2Q_9 et D_3Q_{19} (voir Fig. 2.1).



(a) D_2Q_9 (b) D_3Q_{19}

Fig 2.1 – Schémas de discrétisation de l'espace des quantités de mouvement (a) D_2Q_9 en 2-D et (b) D_3Q_{19} en 3-D

Pour le schéma D_2Q_9, nous avons :

$$\boldsymbol{\xi}_k = \frac{\Delta x}{\Delta t}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \tag{2.128}$$

avec

$$w_k = \begin{cases} 4/9 & k = 0 \\ 1/9 & k = 1, \cdots, 4 \\ 1/36 & k = 5, \cdots, 8. \end{cases} \tag{2.129}$$

Tandis que pour le schéma D_3Q_{19}, nous avons :

$$\boldsymbol{\xi}_k = \frac{\Delta x}{\Delta t} \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \tag{2.130}$$

avec

$$w_k = \begin{cases} 1/3 & k = 0 \\ 1/18 & k = 1, \cdots, 6 \\ 1/36 & k = 7, \cdots, 18. \end{cases} \tag{2.131}$$

2.3.2 Discrétisation en espace et en temps

Pour résoudre l'Eq. (2.125) nous la discrétisons en espace et en temps selon un développement en série de Taylor. En particulier, pour la discrétisation en espace, il faut que les impulsions discrètes $\boldsymbol{\xi}_k$ lient les nœuds de la grille. Réécrivons l'Eq. (2.125) de Boltzmann-BGK discrétisée dans l'espace des quantités de mouvement sous sa forme Lagrangienne :

$$\frac{df_k}{dt} + \frac{f_k}{\tau_c} = \frac{f_k^{eq}}{\tau_c}, \tag{2.132}$$

$\frac{df_k}{dt}$ représente donc la dérivée totale de f_k par rapport au temps t. L'Eq. (2.132) est une équation différentielle non-homogène d'ordre 1. Sa résolution nous donne (Coddington, 1998) :

$$f_k(t+\Delta t) = f_k(\mathbf{x}+\boldsymbol{\xi}_k\Delta t, t+\Delta t) = e^{-\frac{\Delta t}{\tau_c}} f_k(\mathbf{x},t) + \frac{1}{\tau_c} e^{-\frac{\Delta t}{\tau_c}} \int_0^{\Delta t} f_k^{eq}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\xi}_k t', t+t')dt'. \tag{2.133}$$

Le développement en série de Taylor jusqu'à l'ordre 1 donne :

$$e^{-\frac{\Delta t}{\tau_c}} = 1 - \frac{\Delta t}{\tau_c} + \mathcal{O}\left(\Delta t^2\right), \tag{2.134}$$

$$\frac{1}{\tau_c} e^{-\frac{\Delta t}{\tau_c}} \int_0^{\Delta t} f_k^{eq}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\xi}_k t', t+t')dt' = \frac{\Delta t}{\tau_c} f^{eq} + \mathcal{O}\left(\Delta t^2\right). \tag{2.135}$$

Nous aboutissons donc à la forme discrétisée en espace et en temps de l'équation de Boltzmann-BGK ou équation de LBM-BGK :

$$\underbrace{f_k(\mathbf{x}+\boldsymbol{\xi}_k\Delta t, t+\Delta t)}_{Propagation} = \underbrace{f_k(\mathbf{x},t) - \frac{\Delta t}{\tau_c}[f_k(\mathbf{x},t) - f_k^{eq}(\mathbf{x},t)]}_{Collision}, \tag{2.136}$$

$$f_k^{eq} = \rho w_k \left[1 + \frac{\boldsymbol{\xi}_k \cdot \mathbf{v}'}{c_s^2} + \frac{(\boldsymbol{\xi}_k \cdot \mathbf{v}')^2}{2c_s^4} - \frac{v'^2}{2c_s^2}\right], \tag{2.137}$$

où le terme f_k' de f_k^{eq} donné à l'Eq. (2.127) est négligé puisqu'il est un $\mathcal{O}(\tau_c^2)$ qui est du même ordre de grandeur que $\mathcal{O}(\Delta t^2)$.

2.3.3 De LBM à Navier-Stokes : la procédure de Chapmann-Enskog

Après discrétisation de l'équation continue de Boltzmann-BGK pour obtenir l'équation de LBM, il est nécessaire de refaire la procédure de Chapmann-Enskog qui consiste en un développement multi échelle de la fonction de distribution de masse f_k dans le but de retrouver les équations macroscopiques, dans notre cas les équations de Navier-Stokes. Cette méthode nous permettra d'analyser la précision avec laquelle nous approchons les équations de Navier-Stokes d'une part et d'autre part nous permettra d'établir une relation entre la viscosité cinématique de cisaillement η du fluide, la durée de collision τ_c, l'espacement de la grille Δx et le pas de temps Δt. Introduisons le nombre de Mach défini comme le rapport de la vitesse macroscopique caractéristique du fluide V sur le paramètre c_s représentant la vitesse de propagation du son dans le fluide :

$$M_a = \frac{V}{c_s} \tag{2.138}$$

Introduisons aussi les développements suivants :

$$f_k = f_k^{(0)} + \epsilon f_k^{(1)} + \epsilon^2 f_k^{(2)} + \cdots \tag{2.139}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \epsilon \frac{\partial}{\partial t_0} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_1} \tag{2.140}$$

et

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \epsilon \frac{\partial}{\partial x_{0i}} \tag{2.141}$$

où nous rappelons que ϵ est un petit nombre proportionnel à K_n(nombre de Knudsen). Dans ce développement t_0 est une échelle de temps de convection rapide tandis que t_1 est une échelle lente de diffusion. Le développement jusqu'à l'ordre 2 en série de Taylor de l'Eq. (2.136) conduit à :

$$D_k f_k + \frac{\Delta t}{2} D_k^2 f_k = -\frac{1}{\tau_c}(f_k - f_k^{eq}) + \mathcal{O}\left(\Delta t^2\right) \tag{2.142}$$

où $D_k \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_k \cdot \nabla_{\mathbf{x}} = \frac{\partial}{\partial t} + \xi_{ki}\frac{\partial}{\partial x_i}$ nous rappelons que la règle de sommation de Einstein est utilisée ici. En substituant les équations (2.139), (2.140) et (2.141) dans l'Eq. (2.142) nous obtenons :

$$\epsilon^0 \quad : \quad f_k^{(0)} = f_k^{eq} \tag{2.143}$$

$$\epsilon^1 \quad : \quad D_k^{(0)} f_k^{(0)} = -\frac{1}{\tau_c} f_k^{(1)} \tag{2.144}$$

$$\epsilon^2 \quad : \quad \frac{\partial f_k^{(0)}}{\partial t_1} + D_k^{(0)} f_k^{(1)} + \frac{\Delta t}{2}[D_k^{(0)}]^2 f_k^{(1)} = -\frac{1}{\tau_c} f_k^{(2)} \tag{2.145}$$

où $D_k^{(0)} \equiv \frac{\partial}{\partial t_0} + \boldsymbol{\xi}_k \cdot \nabla_{\mathbf{x}}^{(0)}$. Aussi on montre que :

$$\sum_k f_k^{(\alpha)} = 0, \sum_k \boldsymbol{\xi}_k f_k^{(\alpha)} = 0, \forall \alpha > 0. \tag{2.146}$$

En multipliant l'équation correspondant à l'ordre ϵ^1 par 1 et $\boldsymbol{\xi}_k$, respectivement, et en faisant la somme sur k, nous obtenons les équations de conservation à l'ordre ϵ^1,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t_0} + \nabla_{\mathbf{x}}^{(0)} \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \tag{2.147}$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t_0} + \nabla_{\mathbf{x}}^{(0)} \cdot (\boldsymbol{P}^{(0)}) - \rho \mathbf{g} = 0, \tag{2.148}$$

où $P_{ij}^{(0)} = \sum_k \xi_{ki}\xi_{kj} f_k^{(0)}(\mathbf{v}) = \rho v_i v_j + p\delta_{ij}$ (on rappelle que δ_{ij} est le symbole de Kronecker) est le tenseur flux de quantité de mouvement à l'ordre 0, avec $p = c_s^2 \rho$.

A l'ordre ϵ^2 nous avons :

$$\frac{\partial f_k^{(0)}}{\partial t_1} + (1 - \frac{\Delta t}{2\tau_c}) D_k^{(0)} f_k^{(1)} = -\frac{1}{\tau_c} f_k^{(2)}. \tag{2.149}$$

De même, les moments d'ordre 0 et d'ordre 1 de l'Eq. (2.149) conduisent aux équations de conservations à l'ordre ϵ^2 :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t_1} = 0, \tag{2.150}$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t_1} + (1 - \frac{\Delta t}{2\tau_c}) \nabla_{\mathbf{x}}^{(0)} \cdot (\boldsymbol{P}^{(1)}) = 0, \tag{2.151}$$

où $P_{ij}^{(1)} = \sum_k \xi_{ki}\xi_{kj} f_k^{(1)}$. Pour l'évaluation de $P_{ij}^{(1)}$, multiplions l'Eq. (2.143) d'ordre ϵ^1 par $\xi_{ki}\xi_{kj}$ et faisons la sommation sur k :

$$-\frac{\Delta t}{\tau_c} \sum_k \xi_{ki}\xi_{kj} f_k^{(1)} = c_s^2 \rho [\frac{\partial v_j}{\partial x_{0i}} + \frac{\partial v_i}{\partial x_{0j}}] + \mathcal{O}\left(M_a^3\right). \tag{2.152}$$

Enfin, en combinant les équations de conservation des deux échelles ϵ^1 et ϵ^2, nous pouvons obtenir les équations hydrodynamiques relatives au modèle LBM-BGK :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \tag{2.153}$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla_{\mathbf{x}} p + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (2\rho\eta\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}) + \rho \mathbf{g}, \tag{2.154}$$

où $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{2}(\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v} + \nabla_{\mathbf{x}}^T \mathbf{v})$la viscosité cinématique η est donnée par :

$$\eta = c_s^2 (\tau - \frac{1}{2}) \Delta t, \; \tau = \frac{\Delta t}{\tau_c}. \tag{2.155}$$

Dans la limite des faibles nombres de Mach (M_a), la densité ρ varie faiblement.

2.3.4 Conditions initiales et aux limites

Comme toutes les méthodes numériques les conditions initiales et aux limites jouent un rôle primordial pour la résolution des problèmes de la dynamique des fluides par la méthode de Lattice-Boltzmann. Cependant elles sont exprimées pour des écoulements isothermes par des pressions, et des vitesses imposées. le but de cette section est donc de présenter quelques manières de construire des conditions initiales et aux limites en terme de fonctions de distribution de masse discrètes f_k à partir d'une pression ou d'une vitesse imposée au fluide.

Conditions initiales Le schéma d'équilibre est très souvent utilisé pour l'imposition des conditions initiales dans la méthode de Lattice-Boltzmann. Dans ce schéma les fonctions de distribution sont initialisées directement comme la fonction de distribution de l'équilibre local :

$$f_k(t_0) = f_k^{eq}(\rho_0, \mathbf{v}_0),\ k = 0, \cdots, q-1, \tag{2.156}$$

où ρ_0, et $\mathbf{v}_0$ sont respectivement la densité et la vitesse initiale.

Conditions aux limites En ce qui concerne les conditions aux limites nous nous limiterons à celles applicables dans le cas des milieux poreux. Il s'agit de la condition aux limites de rebond partiel pour modéliser le non-glissement sur les parois solides ($\mathbf{v} = \mathbf{0}$), de la condition de (Zou and He, 1997) pour l'application d'une pression imposée et de la condition de périodicité.

la condition de rebond partiel La modélisation de la condition de non-glissement ($\mathbf{v} = \mathbf{0}$ sur Γ^{sf}) à l'interface fluide-solide dans le cadre de la LBM est mise en œuvre par la méthode de rebond partiel (voir Fig. 2.2). Ce schéma considère que l'impulsion des particules du fluide est juste inversée après la collision avec la paroi solide et ce en supposant que celle-ci se situe à mi-parcours ($\frac{\mathbf{x}_f+\mathbf{x}_s}{2}$) de la distance entre les nœuds fluide $\mathbf{x}_f$ et solide $\mathbf{x}_s$. Les nœuds $\mathbf{x}_f$ et $\mathbf{x}_s$ sont voisins, c'est à dire $\mathbf{x}_f = \mathbf{x}_s - \boldsymbol{\xi}_k \Delta t$.

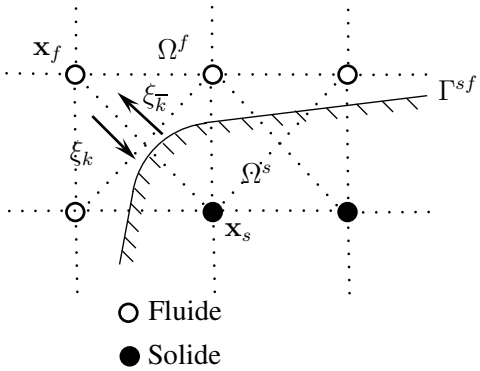


Fig 2.2 – Conditions aux limites à l'interface solide-fluide Γ^{sf}. La méthode de rebond partiel.

L'image physique de ce schéma est claire : les particules avec une impulsion $\boldsymbol{\xi}_k$ à la position $\mathbf{x}_f$ après la collision arrivent à la paroi solide après la durée $\frac{\Delta t}{2}$, et ensuite leur mouvement est inversé par rebond jusqu'à la position $\mathbf{x}_f$ avec une impulsion inversée $\boldsymbol{\xi}_{\overline{k}} = -\boldsymbol{\xi}_k$ après une durée de $\frac{\Delta t}{2}$, alors :

$$f_{\overline{k}}(\mathbf{x}_f, t + \Delta t) = f_k^{coll}(\mathbf{x}_f, t) \tag{2.157}$$

où $\boldsymbol{\xi}_{\overline{k}} = -\boldsymbol{\xi}_k$ et,

$$f_k^{coll}(\mathbf{x}_f, t) = f_k(\mathbf{x}_f, t) - \frac{\Delta t}{\tau_c}\Big[f_k(\mathbf{x}_f, t) - f_k^{eq}(\mathbf{x}_f, t)\Big]. \tag{2.158}$$

Comme la vitesse macroscopique est nulle à la paroi, ce schéma fonctionne pour une paroi stationnaire. Quand la paroi est en mouvement avec une vitesses $\mathbf{v}_s$, le schéma peut être modifié

pour inclure la contribution du mouvement de la paroi. En effet, ce schéma peut être modifié comme suit,

$$f_{\overline{k}}(\mathbf{x}_f, t+\Delta t) = f_k^{coll}(\mathbf{x}_f, t) - 2w_k\rho(\mathbf{x}_f)\frac{\boldsymbol{\xi}_k \cdot \mathbf{v}_s}{c_s^2}, \tag{2.159}$$

où w_k sont les poids apparaissant dans l'équation de LBM pour un modèle D_DQ_q, avec D la dimension de l'espace des positions et q la dimension de l'espace des quantités de mouvement discrètres.

Condition aux limites en pression Afin d'être en mesure d'imposer une pression aux limites extérieures $\partial\Omega^f$ du domaine fluide Ω^f nous proposons d'utiliser la méthode de (Zou and He, 1997). Selon cette méthode, la pression est prescrite en respectant les conditions suivantes,

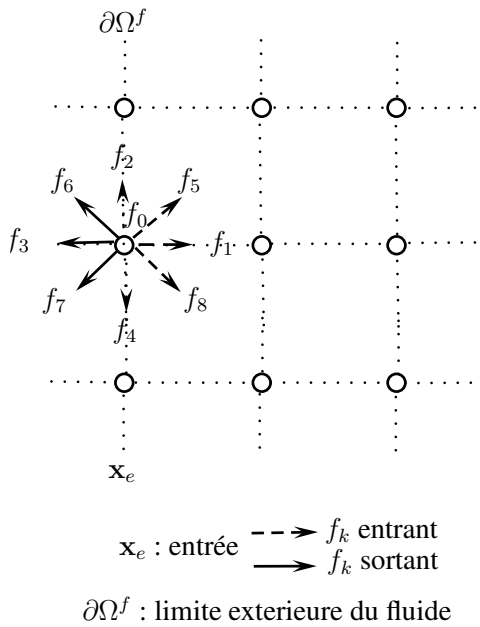


Fig 2.3 – Condition aux limites en pression (Zou and He, 1997). f_k sortant et entrant aux limites extérieures $\partial\Omega^f$ pour un schéma D_2Q_9.

$$\sum_{k=0}^{q-1} f_k = \rho_e, \tag{2.160}$$

$$\sum_{k=0}^{q-1} f_k\boldsymbol{\xi}_k = \rho_e\mathbf{v}_e, \tag{2.161}$$

$$\tag{2.162}$$

où ρ_e et $\mathbf{v}_e$ sont la densité et la vitesse à l'entrée. La densité est liée à la pression par $p_e = c_s^2\rho_e$ et $\mathbf{v}_e$ est une inconnue supplémentaire. Les inconnues de ce systèmes sont les f_k entrant dans le domaine Ω^f. Il y a plus d'inconnues que de conditions. Pour fermer le système d'équation

à résoudre pour déterminer les f_k inconnues, (Zou and He, 1997) proposent de rajouter une condition de rebond de la partie non-équilibrée de le fonction de distribution f_k^n entrante normale à la limite :

$$f_k^n - f_k^{eq,n} = f_{-k}^n - f_{-k}^{eq,n}, \tag{2.163}$$

où l'exposant n fait référence à inconnue normale. Comme illustré en Fig. 2.3, pour le modèle D_2Q_9 les distributions inconnues f_1, f_5 , f_8 et la vitesse $\mathbf{v}_e = (v_{ex}, 0)$ a l'entrée sont déterminées à partir des conditions suivantes :

$$f_1 + f_5 + f_8 = \rho_e - (f_0 + f_2 + f_4 + f_6 + f_7), \tag{2.164}$$

$$f_1\boldsymbol{\xi}_1 + f_5\boldsymbol{\xi}_5 + f_8\boldsymbol{\xi}_8 - \rho_e\mathbf{v}_e = -(f_2\boldsymbol{\xi}_2 + f_4\boldsymbol{\xi}_4 + f_6\boldsymbol{\xi}_6 + f_7\boldsymbol{\xi}_7), \tag{2.165}$$

$$f_1 - f_1^{eq} = f_3 - f_3^{eq}. \tag{2.166}$$

Condition de périodicité La condition aux limites de périodicité (voir Fig. 2.4) dans la LBM est exprimée par

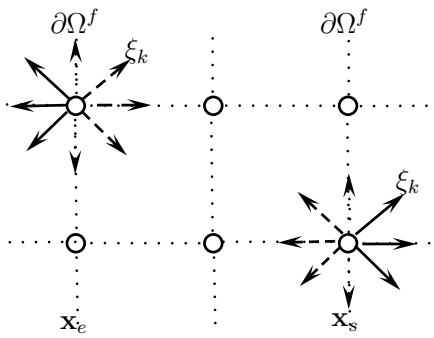


Fig 2.4 – Condition aux limites périodique.

$$f_k(\mathbf{x}_-, t + \Delta t) = f_k^{coll}(\mathbf{x}_+ - \boldsymbol{\xi}_k\Delta t, t), \tag{2.167}$$

$$f_k(\mathbf{x}_+, t + \Delta t) = f_k^{coll}(\mathbf{x}_- - \boldsymbol{\xi}_k\Delta t, t), \tag{2.168}$$

avec $\mathbf{x}_-$ et $\mathbf{x}_+$ les nœuds des parties opposées de la limite extérieure $\partial\Omega^f$.

2.3.5 Algorithme

Dans cet algorithme (Fig. 2.5), nous avons introduit la tolérance de convergence *tol* et l'erreur *erreur*. L'erreur est calculée comme suit,

$$erreur = \frac{\sqrt{\sum_{\mathbf{x}} \left[\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{v}(\mathbf{x}, t - t^f)\right]^2}}{\sqrt{\sum_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^2(\mathbf{x}, t)}} \tag{2.169}$$

où la sommation sur l'indice $\mathbf{x}$ représente la sommation sur tous les nœuds fluides du domaine Ω^f et t^f est une valeur définie par l'utilisateur ($t^f = 50$ a été choisi à partir de notre expérience d'utilisation du modèle).

ENTRÉES. $\rho_0(\mathbf{x})$, $\mathbf{v}_0(\mathbf{x})$, τ_c, Δt, Δx, $\mathbf{g}$, tol, les conditions aux limites

INITIALISATION. $erreur = erreur_0$

TANT QUE. $(erreur \leq tol)$, $\rho_i(\mathbf{x})$ et $\mathbf{v}_i(\mathbf{x})$ connus

(1) Étape de collision $f_k^i(\mathbf{x}) = f_k^i(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{\tau_c}\left[f_k^i(\mathbf{x}) - f_k^{i,eq}(\rho_i(\mathbf{x}), \mathbf{v}_i'(\mathbf{x}))\right]$

(2) Étape de propagation $f_k^i(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_k \Delta t) = f_k^i(\mathbf{x})$

(3) Conditions aux limites

(5) Mise jour des variables macroscopiques $\rho_{i+1}(\mathbf{x})$, $\mathbf{v}_{i+1}(\mathbf{x})$, $p_{i+1}(\mathbf{x})$

(6) Calcul de l'erreur $erreur$

(7) retourner (1)

SORTIES. $\rho(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ et $p(\mathbf{x}, t)$

Fig 2.5 – Algorithme global de la LBM standard.

Un algorithme type de la LBM standard est donné en Fig. 2.5. Les étapes de collision et de propagation sont illustrées dans la Fig. 2.6.

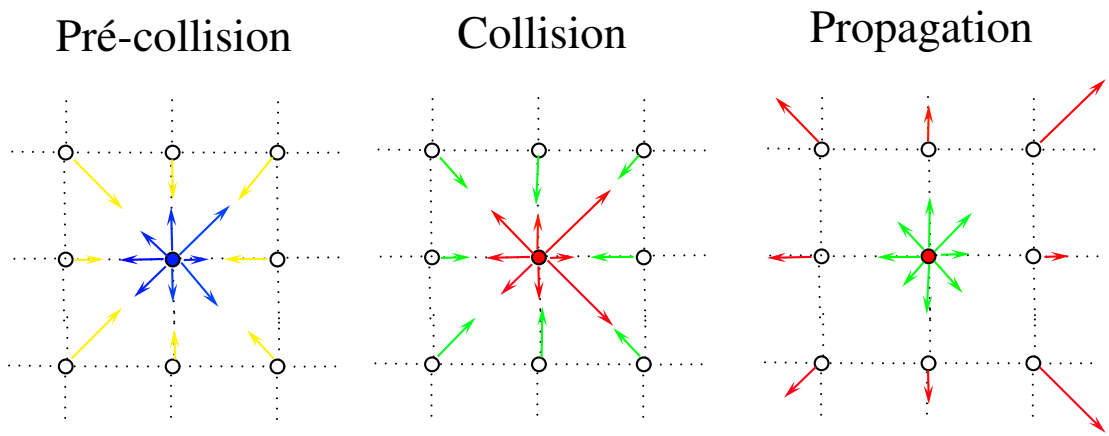


Fig 2.6 – Étapes de pré-collision, de collision et de propagation.

2.4 Exemples numériques

Le précédent algorithme de LBM a été implémenté dans un code Python développé au MSME et qui été intégré à la plateforme MAP (Materials ageing platform) de EDF R&D. Nous présentons des tests numériques visant à valider ce code pour l'algorithme LBM standard. Les résultats présentés dans cette section sont en unité de grille de Boltzmann et doivent être convertis dans le système d'unité internationale en multipliant les quantités par les constantes appropriées. En effet, la vitesse est donnée en lu/ts, la masse volumique en mu/lu^3, la pression

en $mu/(lu \cdot ts^2)$ et la viscosité en lu^2/ts. Ici lu est l'unité de longueur, mu est la masse unité et ts est l'unité de temps. La conversion en système d'unité internationale se fait en exprimant lu, mu et ts en m (mètre), en kg (kilogramme) et en s (seconde), respectivement. Ce système de conversion s'établit en fixant $lu = \Delta xm$, $\rho_0 mu/lu^3 = \overline{\rho} kg/m^3$ et $\eta lu^2/ts = \overline{\eta} m^2/s$. Par exemple, à $T = 20^{\circ}C$ on a, la masse volumique est $\overline{\rho} = 1000$ et la viscosité cinématique $\overline{\eta} = 1,007 \times 10^{-6}$. Tous les calculs de cette section on été réalisé en 2-D avec le modèle D_2Q_9. Pour s'assurer de notre implémentation des étapes de collision, de propagation et en particulier des conditions aux limites en présence d'interface solide-fluide, à forme droite ou courbe nous proposons de simuler :

— un écoulement de Poiseuille,
— un écoulement dans une cavité à couvercle entraîné,
— et un écoulement laminaire de Taylor.

Introduisons le nombre de Reynolds caractérisant la nature du régime d'écoulement,

$$R_e = \frac{V}{L\eta} \tag{2.170}$$

où V est la vitesse caractéristique du fluide, L la longueur caractéristique de l'écoulement et η la viscosité cinématique du fluide.

2.4.1 Écoulement de Poiseuille

L'écoulement de Poiseuille est un écoulement stationnaire d'un fluide incompressible entre deux plaques parallèles qui est produit par un gradient de pression, comme illustré dans la Fig. 2.7. Les conditions d'un tel écoulement dans notre cas sont, des pressions $p = p_e$ et $p = p_s$ prescrites à l'entrée et à la sortie de la conduite, et une condition de non-glissement $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ à l'interface solide-fluide. La pression à l'entrée est supérieure à la pression à la sortie $p_e > p_s$ de sorte que l'écoulement se fasse de l'entrée vers la sortie.

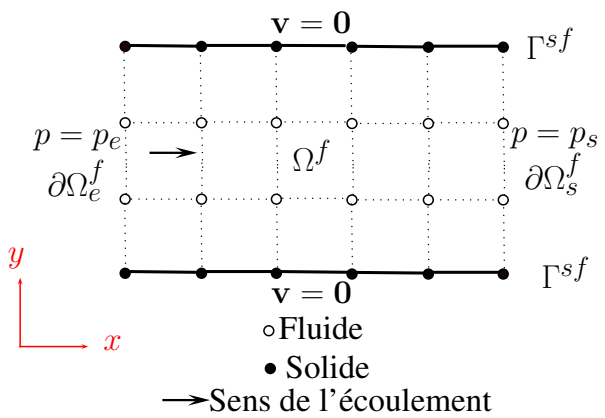


Fig 2.7 – Écoulement de Poiseuille.

Les conditions aux limites se résument par,

$$\begin{cases} p_s = c_s^2 \rho_0 \text{ sur } \partial\Omega_s \\ p_e = p_s + \frac{8L_x}{R_e} \text{ sur } \partial\Omega_e \\ \mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ sur } \Gamma^{sf} \\ v_y = 0 \text{ sur } \partial\Omega_s \cup \partial\Omega_e \end{cases} \tag{2.171}$$

avec ρ_0 la densité initiale homogène dans le domaine, L_x la longueur de la conduite, L_y sa largeur et $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$. Les simulations ont été réalisées avec les paramètres de la table 2.1.

Paramètres
$\rho_0 = 1$
$L_x = 4$
$L_y = 1$
$R_e = 10$
$\eta = 0.1$
$\Delta t = \Delta x^2$
$\tau = 0.8$
$c_s = 1/(\Delta x\sqrt{3})$

Tab 2.1 – Paramètres de simulation de l'écoulement de Poiseuille (adimensionnés).

Les résultats suivants ont été obtenus pour une grille $256 \times 64 lu^2$, soit $\Delta x = 1/64$. Les techniques de rebond partiel et de (Zou and He, 1997) ont été utilisées pour les conditions aux limites.

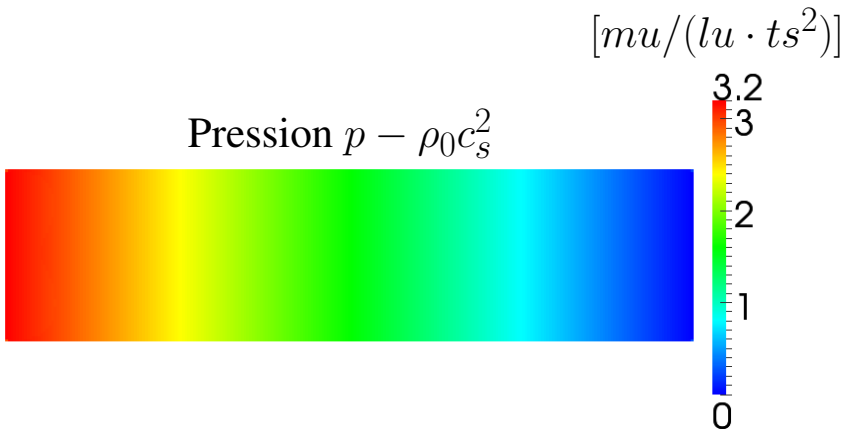


Fig 2.8 – Champ de pression d'un écoulement de Poiseuille pour un nombre de Reynold $Re = 10$.

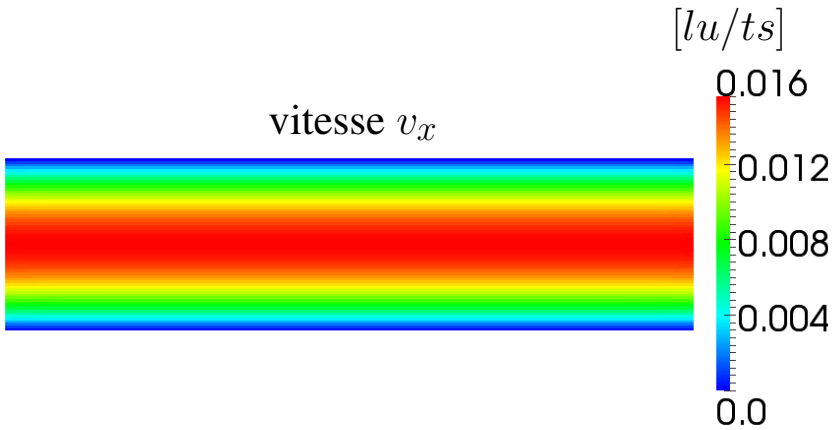


Fig 2.9 – Champ de la composante v_x de la vitesse d'un écoulement de Poiseuille pour un nombre de Reynold $Re = 10$.

La Fig. 2.8 montre le gradient de pression dans le fluide. Nous constatons bien une évolution linéaire selon x de la pression conforme aux conditions aux limites imposées. La Fig. 2.9 présente le champ de la composante v_x de la vitesse. Nous retrouvons dans sur cette figure le profil parabolique de cette composante de la vitesse.

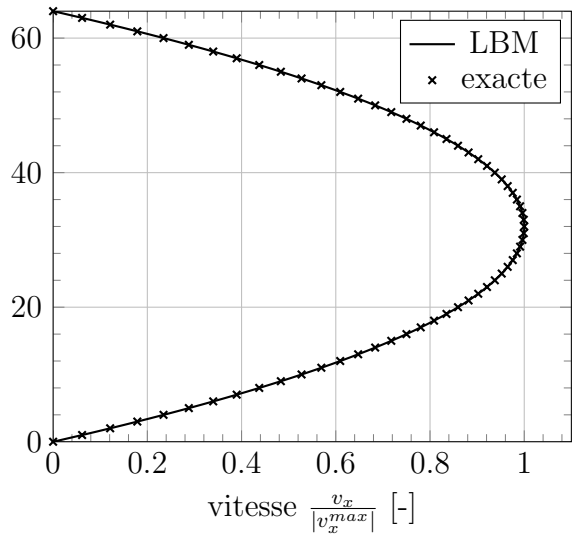


Fig 2.10 – Comparaison du profil de la composante v_x de la vitesse d'un écoulement de Poiseuille pour un nombre de Reynold $R_e = 10$ donnée par la LBM avec la solution analytique.

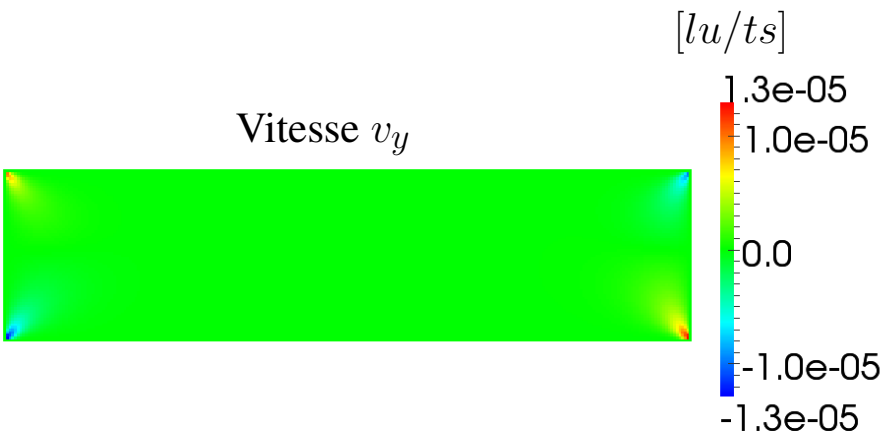


Fig 2.11 – Champ de la composante v_y de la vitesse d'un écoulement de Poiseuille pour un nombre de Reynold $Re = 10$.

La solution analytique pour un tel écoulement est donnée par,

$$\begin{cases} v_x(x,y) = \frac{dp}{dx}\frac{y}{2\rho\eta}(L_y - y) \\ v_x(x,y) = 0 \\ p(x,y) = -\frac{dp}{dx}x + p_e \\ \frac{dp}{dx} = \frac{p_e - p_s}{L_x} \end{cases} \tag{2.172}$$

La Fig. 2.10 montre une très bonne concordance entre la solution LBM et la solution analytique. Nous nous intéressons ensuite à l'appréciation de l'erreur faite par la LBM. Dans la Fig. 2.11 nous présentons la composante v_y de la vitesse. Dans cette figure nous constatons que l'erreur pour cette application est principalement localisée dans les coins car nous y constatons des vitesses non nulles mais qui restent négligeables. Cette erreur sur la composante v_y de la vitesse est due à la jonction entre la condition aux limites en pression et de non-glissement appliquées aux bords adjacents.

Fig 2.12 – Erreur entre solution LBM et solution analytique pour une norme L_2 , pour différents critères de convergence et différentes finesses de la grille dans le cas d'un écoulement de Poiseuille pour un nombre de Reynold $R_e = 10$. N_y est le nombre de pixels suivant y.

Enfin nous nous sommes intéressés à la variation de l'erreur E_2 d'une norme L_2 entre la solution donnée par la LBM et la solution analytique avec la finesse de la grille sur la Fig. 2.12.

$$E_2 = \frac{\sqrt{\sum_{\mathbf{x}}[\mathbf{v}(\mathbf{x}) - \mathbf{v}^{ref}(\mathbf{x})]^2}}{\sqrt{\sum_{\mathbf{x}}[\mathbf{v}^{ref}(\mathbf{x})]^2}}. \tag{2.173}$$

Les différents critères de convergence 10^{-4} , 10^{-6} et 10^{-8} et les différentes finisses de grille $32 \times 8lu^2$, $64 \times 16lu^2$, $128 \times 32lu^2$ et $256 \times 64lu^2$. Nous constatons :

— une diminution de l'erreur avec l'augmentation de la finesse de grille
— au-delà d'un critère de convergence de 10^{-6} la méthode pour cette application ne réduit pas considérablement l'erreur entre la solution LBM et la solution analytique mais prend plus de temps.
— Un critère de convergence de 10^{-6} nous donne donc une précision satisfaisante.

Nous avons à travers le cas test de l'écoulement de Poiseuille pu montrer la possibilité d'appliquer des conditions aux limites en pression et de non-glissement sur des bords droits avec suffisamment de précision.

2.4.2 Écoulement dans une cavité à couvercle entraîné

L'écoulement dans une cavité à couvercle entraîné est un écoulement stationnaire d'un fluide incompressible dans une cavité carrée de dimension $L \times L$ qui est conduit par une paroi supérieure ici appelée couvercle en mouvement. Ce problème est un problème industriel important et est habituellement utilisé comme cas test standard pour les méthodes numériques en mécanique des fluides. La configuration de ce problème est présentée en Fig. 2.13. Les conditions d'un tel écoulement sont, une vitesse prescrite au bord supérieur $v_x = v_0$, $v_y = 0$ et une condition de non-glissement $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ à l'interface solide-fluide.

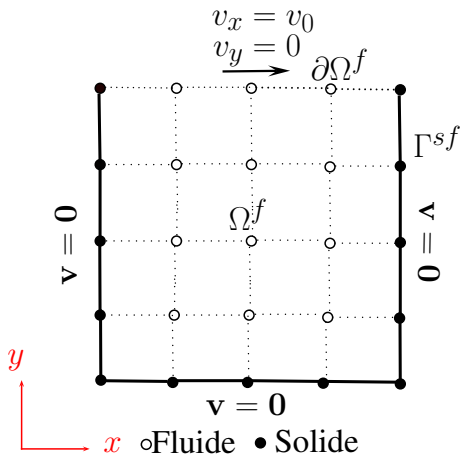


Fig 2.13 – Écoulement dans une cavité à couvercle entraîné.

Paramètres
$v_0 = 1$
$\rho_0 = 1$
$L = 1$
$R_e = 100$
$\eta = 0.01$
$\Delta t = \Delta x^2$
$\tau = 0.53$
$c_s = 1/(\Delta x\sqrt{3})$

Tab 2.2 – Paramètres adimensionnés de simulation de l'écoulement dans une cavité à couvercle entraîné.

Les conditions aux limites se résument par,

$$\begin{cases} v_x = v_0 \text{ sur } \partial\Omega_f \\ v_y = 0 \text{ sur } \partial\Omega_f \\ \mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ sur } \Gamma^{sf} \end{cases} \tag{2.174}$$

avec v_0 est la vitesse constante du couvercle en mouvement. La simulation a été réalisée sur une grille 128×128 ($\Delta x = 1/128$) avec les paramètres de la Table 2.2. Dans la Table 2.2, ρ_0 est la masse volumique initiale du fluide.

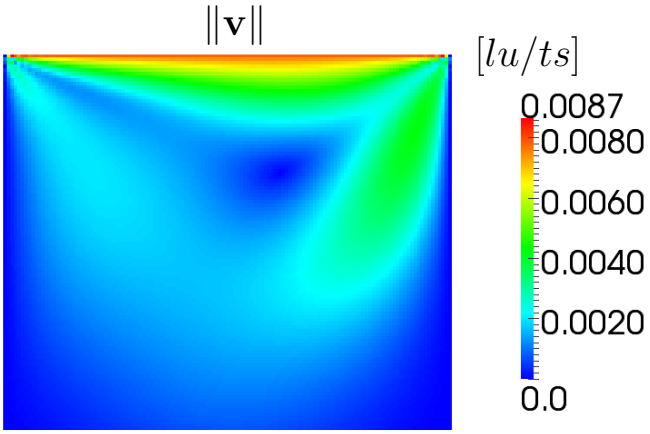
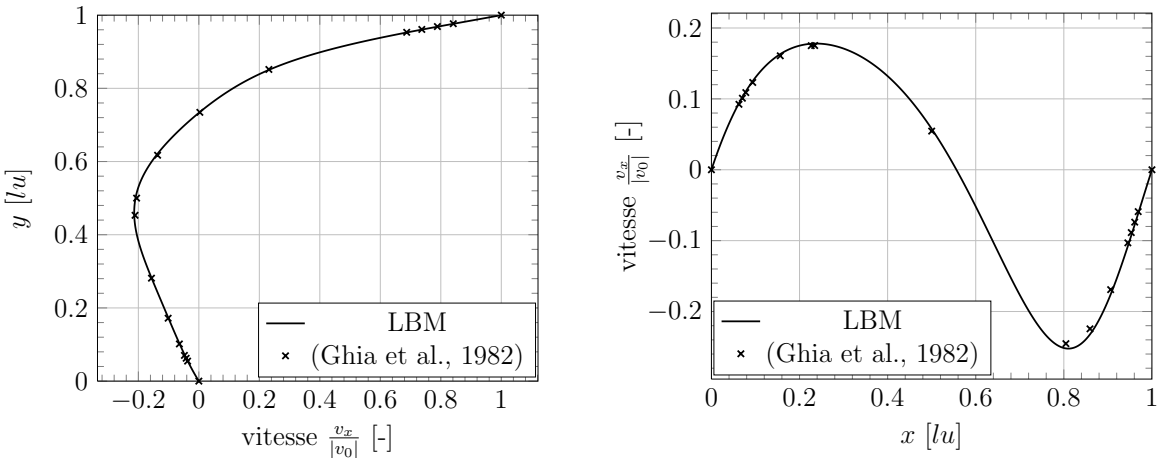


Fig 2.14 – Champ de la norme de la vitesse pour un un écoulement à couvercle entraîné $R_e = 100$.



(a) composante v_x (b) composante v_y

Fig 2.15 – Comparaison du profil passant par le centre géométrique de la cavité des composantes vx et vy de la vitesse donné par la LBM et (Ghia et al., 1982) pour un écoulement à couvercle entraîné avec $R_e = 100$.

La Fig. 2.14 montre la formation d'un tourbillon dans la cavité sous l'effet du cisaillement et des conditions de non-glissement à l'interface solide-fluide. Pour la validation d'un tel écoulement nous avons comparé les profils des composantes v_x et v_y, respectivement en fonction de y et de x à la solution donnée par (Ghia et al., 1982). Nous obtenons une très bonne concordance (Fig. 2.15). Ce test montre la possibilité de considérer comme condition aux limites, une paroi solide en mouvement par la méthode du rebond partiel avec suffisamment de précision dans le cadre de l'application de la LBM.

2.4.3 Écoulement laminaire cisaillant de Taylor

L'écoulement laminaire cisaillant de Taylor est un écoulement d'un fluide incompressible entre deux cylindres concentriques conduit par la rotation de vitesse angulaire constante $\mathbf{v} = v_0\mathbf{e}_\theta$ du cylindre de petit rayon r_1 pendant que le cylindre de grand rayon r_2 est au repos. La configuration pour un tel écoulement est présentée sur la Fig. 2.16.

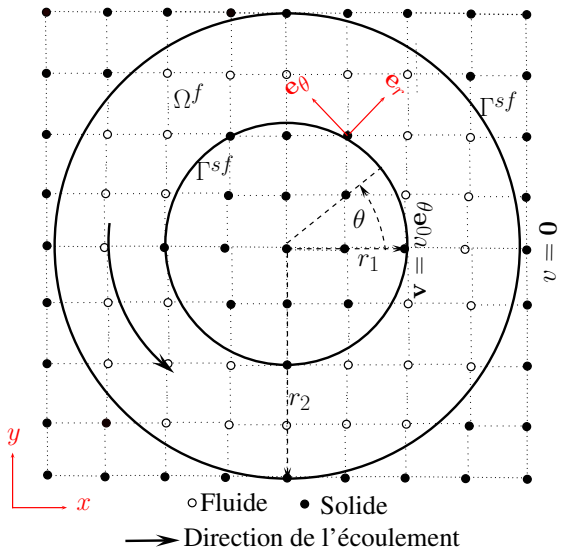
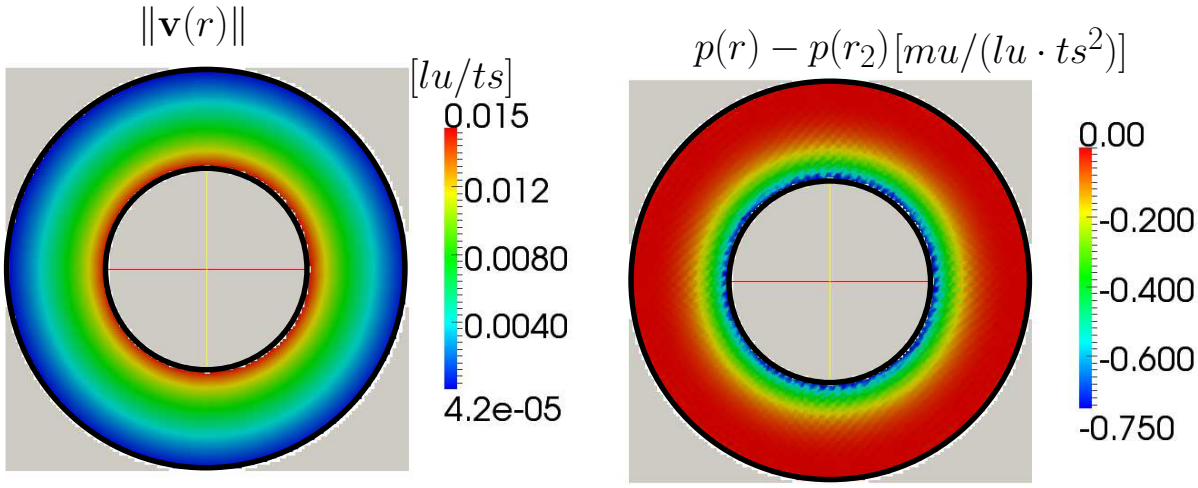


Fig 2.16 – Écoulement laminaire cisaillant de Taylor.

Paramètres
$v_0 = 1$
$\rho_0 = 1$
$r_1 = 0.5$
$r_2 = 1$
$R_e = 50$
$\eta = 0.01$
$\Delta t = \Delta x^2$
$\tau = 0.53$
$c_s = 1/(\Delta x\sqrt{3})$

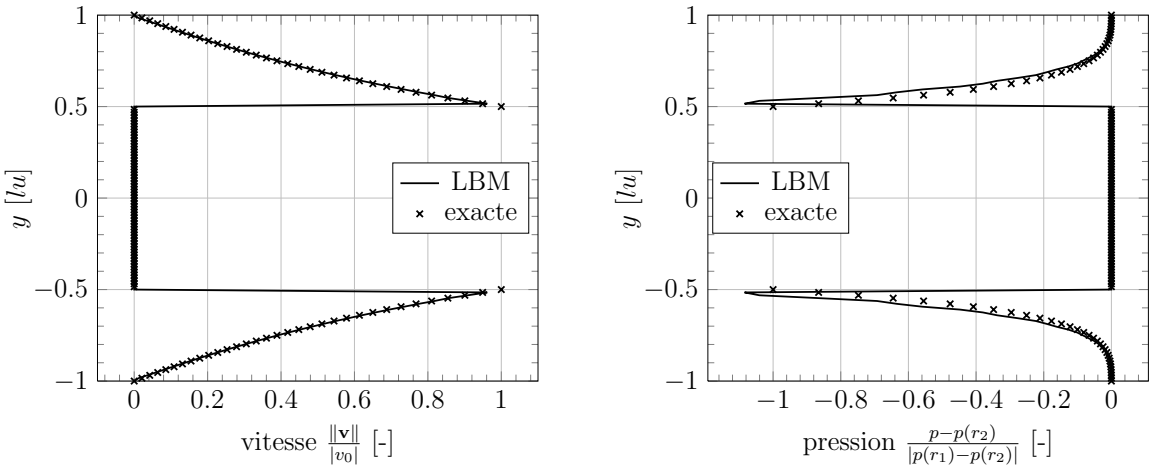
Tab 2.3 – Paramètres de simulation de l'écoulement laminaire cisaillant de Taylor.

Les conditions aux limites se résument par,



(a) vitesse (b) pression

Fig 2.17 – Champ (a) de la norme de la vitesse angulaire et (b) de la pression du fluide d'un écoulement laminaire cisaillant de Taylor.



(a) vitesse (b) pression

Fig 2.18 – Comparaison du profil passant par le centre géométrique des cylindres concentriques (a) de la vitesse et (b) de la pression, obtenus à partir de la LBM et de la solution analytique dans le cas d'un écoulement laminaire cisaillant de Taylor.

$$\begin{cases} \mathbf{v}(r_1) = v_0 \mathbf{e}_\theta \\ \mathbf{v}(r_2) = \mathbf{0} \end{cases} \tag{2.175}$$

avec v_0 est la vitesse angulaire constante du cylindre interne. La simulation ont été réalisée sur une grille 128×128 ($\Delta x = 1/128$) avec les paramètres du Tab. 2.3. Dans le Tab. 2.3, ρ_0 est masse volumique initiale du fluide.

Soit $\beta = \frac{r_1}{r_2}$, la solution analytique pour l'écoulement cisaillant laminaire de Taylor est donnée par :

$$\begin{cases} \mathbf{v}(r) &= \frac{v_0\beta}{1-\beta^2}(\frac{r_2}{r} - \frac{r}{r_2})\mathbf{e}_\theta, \\ p(r) &= \frac{\rho v_0^2}{2}(\frac{\beta}{1-\beta^2})[\frac{r^2}{r_2^2} - \frac{r_2^2}{r^2} - 4ln(\frac{r}{r_2})] + p(r_2). \end{cases} \tag{2.176}$$

La Fig.2.17 montre les champs de vitesse et de pression du fluide. La Fig. 2.18 souligne une bonne correspondance entre la solution en vitesse et en pression donnée par LBM comparée à la solution analytique. Ce cas test montre que la méthode de rebond partiel permet de simuler la condition aux limites en vitesse imposée pour une interface solide-fluide de morphologie quelconque. Nous constatons visuellement un léger décalage entre les courbes analytiques et celles données par la LBM, qui de notre point de vue est lié à l'erreur de discrétisation géométrique du domaine.

2.4.4 Estimation de la perméabilité

Considérons un milieu poreux périodique avec une porosité connectée, saturée d'un fluide visqueux Newtonien homogène de viscosité cinématique η et de densité ρ. La phase solide du milieu est considérée indéformable. Notons par Ω^f , Ω^s les domaines respectifs des phases fluide, solide et par Ω le domaine total du milieu. La paroi du solide en contact avec le fluide est notée Γ^{sf} et les contours extérieurs des phases solide et fluide du milieu poreux sont respectivement notés $\partial\Omega^s$ et $\partial\Omega^f$. On suppose que l'écoulement du fluide est en régime laminaire, en absence de force de gravité et que le fluide est incompressible. Dans un tel cas le calcul de la perméabilité intrinsèque du milieu peut être fait par :

$$K_{ij} = \frac{\eta\rho\overline{v}_i^f}{(\nabla\overline{p}^f)_j} \tag{2.177}$$

où $\mathbf{K}$, $\nabla\overline{p}^f$ et $\overline{\mathbf{v}}^f$ représentent respectivement, le tenseur de perméabilité (m^2), le gradient de pression macroscopique et la vitesse macroscopique apparente du fluide définie comme suit :

$$\overline{\mathbf{v}}^f = \frac{1}{|\Omega|}\int_{\Omega^f}\mathbf{v}(\mathbf{x})dV. \tag{2.178}$$

Dans les trois cas qui suivent la perméabilité est calculée suite à l'obtention du champ de la vitesse locale par la méthode de Boltzmann sur réseau. Ces calculs sont comparés à des valeurs de perméabilité de la littérature (Wang, 1996), (Wang, 2001) et (Sangani and Acrivos, 1982) dans le but de valider notre implémentation. Dans tous les cas présentés ci-dessous un gradient de pression suivant la direction horizontale x , une condition de périodicité suivant la direction verticale y et une condition de non glissement aux parois solide-fluide sont imposées. Le gradient de pression macroscopique imposé suivant x est,

$$\frac{d\overline{p}^f}{dx} = 8L_x/R_e. \tag{2.179}$$

Toutes les simulations sont faites avec les paramètres consignés dans le Tab. 2.4 suivant :

Paramètres
$\rho_0 = 1$
$L_x = 1$
$L_y = 1$
$R_e = 10$
$\eta = 0.1$
$\Delta t = \Delta x^2$
$\tau = 0.8$
$c_s = 1/(\Delta x\sqrt{3})$

Tab 2.4 – Paramètres utilisés pour l'estimation de la perméabilité.

Dans cette partie l'enjeu est d'une part la validation de notre implémentation en ce qui concerne la condition aux limites de périodicité et d'autre part l'application de la méthode pour l'estimation de la perméabilité en condition saturée d'une microstructure poreuse à morphologie quelconque.

Arrangement carré de cylindres de section circulaire La configuration de la microstructure et les conditions aux limites de l'écoulement local sont données en Fig. 2.19.

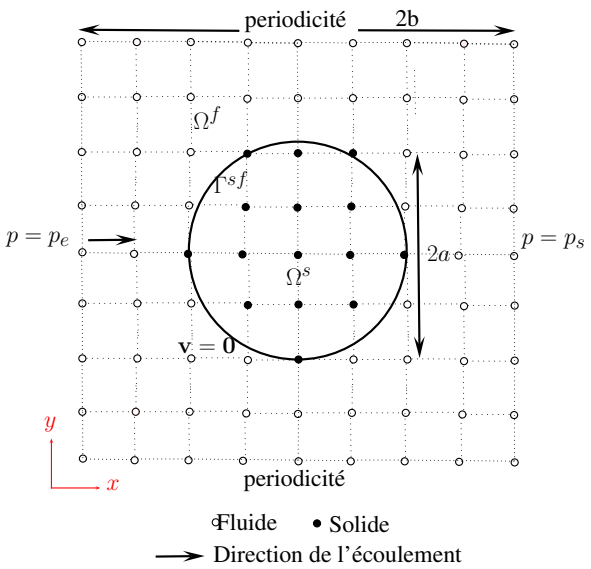


Fig 2.19 – Cellule élémentaire d'un arrangement carré de cylindres à section circulaire.

Le côté de la cellule élémentaire est $2b$ tandis que le diamètre de la section du cylindre est $2a$.

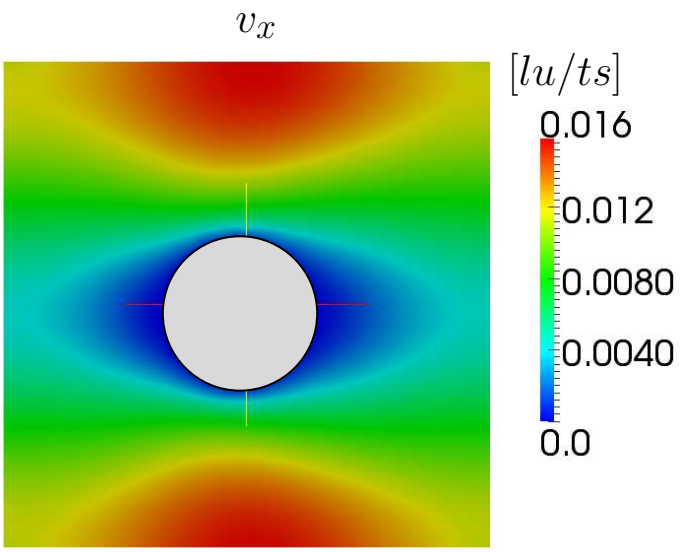


Fig 2.20 – Arrangement carré de cylindres à section circulaire : champ de la composante v_x de la vitesse pour un rapport $a/b = 0.3$.

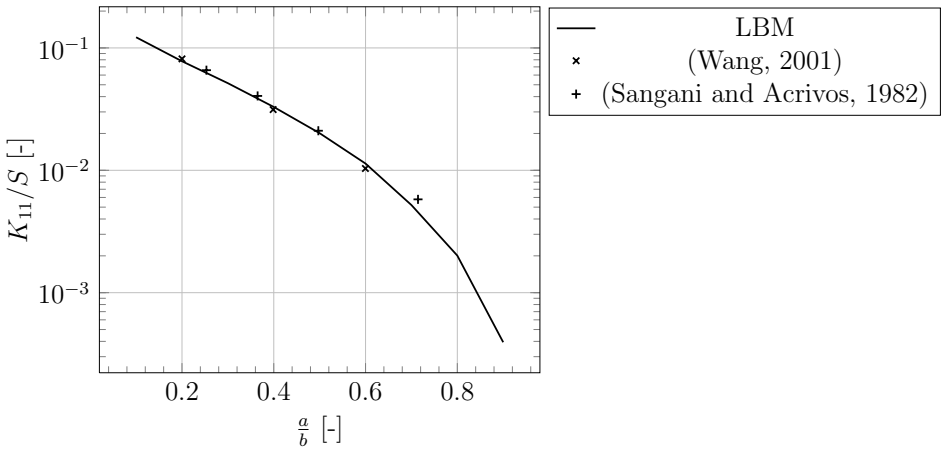


Fig 2.21 – Perméabilité normalisée K_{11}/S d'un écoulement suivant x à travers un reseau de cylindres à section circulaire. Comparaison de la perméabilité calculée par la LBM et les résultats de (Wang, 2001) et de (Sangani and Acrivos, 1982) dans le cas de l'arrangement carré.

La Fig. 2.20 montre un exemple de champ local de la composante v_x de la vitesse dans le cas de l'arrangement carré de cylindres à section circulaire. La Fig. 2.21 montre une comparaison entre la perméabilité obtenue par la LBM et celle donnée par (Wang, 2001) et (Sangani and Acrivos, 1982). Nous obtenons une concordance satisfaisante entre les résultats donnés par LBM avec les résultats de la littérature pour une discrétisation grossière $50 \times 50\, lu^2$.

Arrangement carré de cylindres de section carrée La configuration de la microstructure et les conditions aux limites de l'écoulement local sont rappelées en Fig. 2.22.

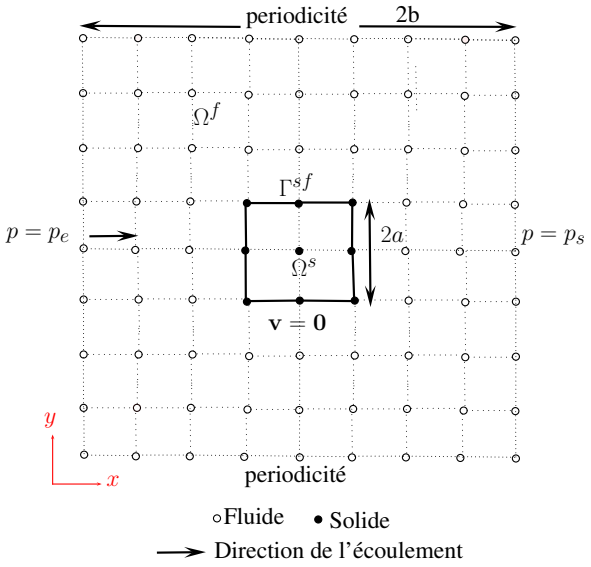


Fig 2.22 – Cellule élémentaire d'un arrangement carré de cylindres à section carrée.

La cellule élémentaire est définie par un carré de côté $2b$ et par une inclusion cylindrique à section carrée de côté $2a$.

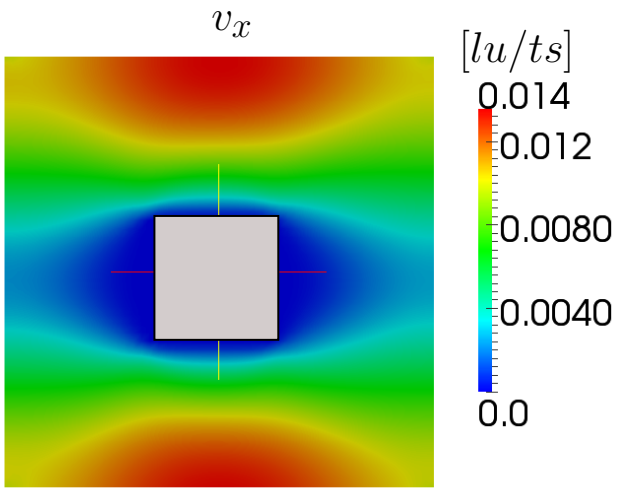


Fig 2.23 – Arrangement carré de cylindres à section carrée : champ de la composante v_x de la vitesse pour un rapport $a/b = 0.3$.

La Fig. 2.23 montre aussi un exemple de champ local de la composante v_x de la vitesse dans le cas de l'arrangement carré de cylindres à section carré. La Fig. 2.24 montre aussi une bonne concordance entre la perméabilité obtenue par la LBM et celle donnée par (Wang, 1996), et ce pour une grille de calcul grossière $50 \times 50\, lu^2$.

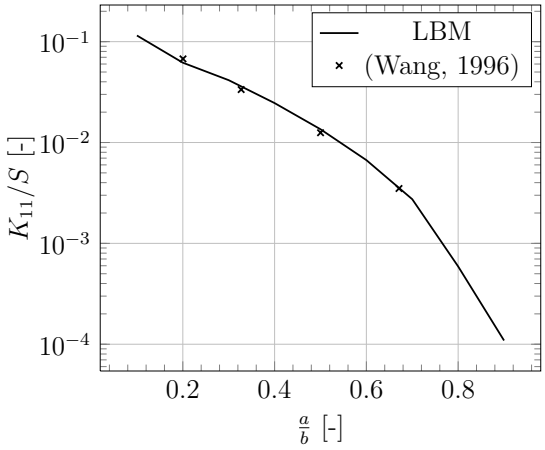


Fig 2.24 – Perméabilité normalisée K_{11}/S d'un écoulement suivant x à travers un reseau de cylindres à section carrée. Comparaison de la perméabilité calculée par la LBM et les résultats de (Wang, 1996) dans le cas de l'arrangement carré.

2.5 Conclusion

Nous avons dans ce chapitre rappelé les équations et les algorithmes de la méthode Boltzmann sur réseau (Lattice Botlzmann) permettant de résoudre les équations de Navier-Stokes à l'échelle du réseau poreux. Cet outil permet de comprendre le comportement d'un fluide monophasique dans un milieu poreux, par exemple en nous permettant d'estimer la perméabilité intrinsèque d'une microstructure. Nous nous sommes particulièrement intéressés à faire un rappel théorique de la méthode et ainsi de montrer ses limites dans l'approximation des équations de Navier-Stokes. Nous avons conclu que la méthode permet entre autre de correctement reproduire la condition de non glissement à l'interface solide-fluide, de pression imposée et de périodicité, ce qui nous parait indispensable lorsqu'on souhaite traiter un problème d'équilibre local d'une microstructure poreuse contenant un ou plusieurs fluides. Nous avons développé notre propre code LBM sous Python que nous avons validé avec plusieurs exemples issus de la littérature. Cette première phase de validation nous permet à présent de considérer les extensions liées à la prise en compte de changements de phase et de la tension capillaire, en vue de modéliser l'influence de l'humidité en décrivant explicitement la présence de l'eau capillaire dans les pores. Ces extensions feront l'objet du prochain chapitre.

Chapitre 3

Équilibre thermodynamique en condition isotherme d'un fluide diphasique à l'échelle du réseau poreux par la méthode de Boltzmann sur réseau

Sommaire

3.1 Introduction **87**

3.2 Théorie **87**

3.2.1 Équation de Boltzmann en présence d'interactions non locales 87

3.2.1.1 La Hiérarchie BBGKY 87

3.2.1.2 Définition des quantités macroscopiques 89

3.2.1.3 Les moments de l'opérateur de Collision 89

3.2.2 De Boltzmann aux équations de Navier-Stokes 90

3.2.2.1 Les lois de conservation 90

3.2.2.2 L'opérateur de collision BGK modifié 92

3.3 Implémentation numérique **92**

3.3.1 Discrétisation de l'équation de Boltzmann-BGK modifiée 93

3.3.2 Conditions aux limites 95

3.3.3 Algorithme 96

3.3.4 D'une description continue vers une description discontinue des interfaces . 97

3.4 Exemples numériques **100**

3.4.1 Séparation en phase liquide et vapeur 100

3.4.2 Coexistence thermodynamique des phases liquides et gazeuses 102

3.4.3 La loi de Laplace 103

3.4.4 La loi de Young 104

3.4.5 Courbe capillaire d'un pore de forme ellipsoïdale allongée 106

3.4.6 Microstructures à morphologie complexe 108

3.4.6.1 Morphologie cubique centrée 108

3.4.6.2 Morphologie du type du gel de C-S-H 111

3.5 Conclusion 114

3.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons seulement considéré l'écoulement d'un fluide monophasique dans un milieu poreux et avons introduit les principaux concepts et quantités qui nous permettent de modéliser ce genre de phénomènes par la méthode de Boltzmann sur réseau. Cependant, puisque nous sommes intéressés par la modélisation des états d'équilibre d'un fluide tel que l'eau à l'échelle de l'espace poreux lors d'un processus de séchage/humidification, nous nous intéressons à présent à la méthode de Boltzmann sur réseau pour les fluides multiphasiques. Dans ce chapitre, nous présentons une partie de rappels théorique dans laquelle nous partons de l'équation de Boltzmann modifiée prenant en compte un potentiel d'interaction entre les particules et nous montrons que cela conduit aux équations de Navier-Stokes. En particulier, le tenseur de contraintes peut être décomposé en une partie issue de l'énergie cinétique des particules, et une partie provenant des interactions entre les particules du fluide. Aussi, nous aboutissons à une équation d'état des gaz rare de type van der Waals incorporant les effets du potentiel d'interaction. La méthode de Boltzmann sur réseau multiphasique proposé par (Shan and Chen, 1993, 1994) est présentée comme étant une version discrète de la théorie précédente, et est modifiée en incorporant l'équation d'état des gaz rare (Carnahan and Starling, 1969) pour définir le potentiel d'interaction discret. Nous utilisons ensuite le modèle SC LBM (Shan-Chen Lattice Boltzmann Method) pour réaliser des simulations de séparation en phase liquide et vapeur, avec coexistence thermodynamique. Le modèle numérique est validé pour les lois de Laplace et Young. Enfin, le modèle SC LBM est implémenté pour réaliser des simulations à masse totale de fluide fixée afin de déterminer la répartition des phases liquide et vapeur à l'échelle du réseau poreux dans des microstructures complexes.

3.2 Théorie

3.2.1 Équation de Boltzmann en présence d'interactions non locales

3.2.1.1 La Hiérarchie BBGKY

Pour décrire la méthode de Boltzmann sur réseau permettant la modélisation d'un fluide diphasique utilisée dans cette thèse, il est intéressant de repartir du formalisme de la hiérarchie BBGKY (Bogoliubov, 1946), et de ne pas négliger les forces d'interactions entre les molécules fluide-fluide et les molécules fluide-solide à l'origine des phénomènes apparents de capillarité et de mouillabilité des phases du fluide aux interfaces fluide-fluide et solide-fluide. Ainsi, nous repartons de la première équation de la hiérarchie, (Annexe A.1.2) :

$$(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_1} + \mathbf{g}_1 \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1}) f^1 = \frac{\partial f^1}{\partial t}|_{coll} \tag{3.1}$$

où $\mathbf{g}_i$ et $\mathbf{a}_{ij} = -\nabla_{\mathbf{x}_i} V_{ij}$ les accélérations dues aux champs de forces $\mathbf{f}_i = m\mathbf{g}_i$ et $\mathbf{k}_{ij} = m\mathbf{a}_{ij}$, respectivement. Le potentiel d'interaction V_{ij} par unité de masse est donnée par $V_{ij} = V(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|)$ et l'opérateur de collision est donné par :

$$\frac{\partial f^1}{\partial t}|_{coll} = \int \nabla_{\mathbf{x}_i} V_{ij} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} f^2 d\mathbf{x}_2 d\boldsymbol{\xi}_2. \tag{3.2}$$

Une simple manière de ne plus faire dépendre l'équation d'ordre 1 des fonctions de distribution d'ordre supérieur à 2 est d'utiliser l'hypothèse de chaos moléculaire de Boltzmann comme au chapitre 2, c'est à dire de négliger la corrélation entre les positions et les quantités de mouvement des molécules (Cercignani, 1991). Dans un cas moins restrictif, où seulement la corrélation entre les quantités de mouvement des molécules est négligée, nous pouvons ré-écrire f^2 comme :

$$f^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, t) = f^1(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t) f^1(\mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_2, t) C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) \tag{3.3}$$

avec $C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$ la fonction de corrélation entre deux molécules, dépendant seulement de leurs positions respectives $\mathbf{x}_1$ et $\mathbf{x}_2$. Introduisons, la fonction de distribution de masse f reliée à f^1 , par la simple relation :

$$f = m f^1, \tag{3.4}$$

où m est la masse de la particule. L'équation de Boltzmann est alors donnée par,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{g} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f = \frac{\partial f}{\partial t}|_{coll} \tag{3.5}$$

avec l'opérateur collision,

$$\frac{\partial f}{\partial t}|_{coll} = \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f \cdot \int \rho(\mathbf{x}_2, t) C(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2, t) \nabla_{\mathbf{x}} V(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_2\|) d\mathbf{x}_2 \tag{3.6}$$

où la définition de la densité locale a été utilisée (Eq. (3.11)). Soit $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x} + \mathbf{r}$ où le vecteur $\mathbf{r}$ définit la plage d'interaction des forces intermoléculaires. Le potentiel d'interaction dépend de la plage d'interaction seulement,

$$V(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_2\|) = V(r), \; r = \|\mathbf{r}\| = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_2\| \tag{3.7}$$

tel que,

$$\nabla_{\mathbf{x}} V(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_2\|) = -\frac{\mathbf{r}}{r} \frac{dV}{dr}. \tag{3.8}$$

La densité $\rho(\mathbf{x}_2)$ peut être développé en série de Taylor par rapport à $\mathbf{r}$,

$$\rho(\mathbf{x}_2) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left\{ \mathbf{r} \left[1 - \frac{1}{2} \mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + \cdots + \frac{1}{n!} (-\mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{x}})^{n-1} + \cdots \right] \rho(\mathbf{x}) \right\}. \tag{3.9}$$

Ainsi, nous avons :

$$\begin{aligned} \int \boldsymbol{\xi} \frac{\partial f}{\partial t}|_{coll} \, d\boldsymbol{\xi} = -\nabla_{\boldsymbol{\xi}} f \cdot \int \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{dV}{dr} C(\mathbf{x}, \mathbf{r}) \\ \times \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left\{ \left[1 - \frac{1}{2} \mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + \cdots + \frac{1}{n!} (-\mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{x}})^{n-1} + \cdots \right] \rho(\mathbf{x}) \right\} d\mathbf{r}. \end{aligned} \tag{3.10}$$

Dans ce chapitre nous ferons référence à l'Eq. (3.5) comme l'équation de Boltzmann et le terme de droite de l'intégrale dans (3.10) comme l'opérateur de collision ou intégrale collision.

3.2.1.2 Définition des quantités macroscopiques

Nous rappelons les expressions des masses volumiques et de la quantité de mouvement en fonction de f :

$$\rho(\mathbf{x},t) = \int f(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi},t)d\boldsymbol{\xi}, \tag{3.11}$$

$$\rho(\mathbf{x},t)\mathbf{v}(\mathbf{x},t) = \int \boldsymbol{\xi} f(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi},t)d\boldsymbol{\xi}. \tag{3.12}$$

Il y a aucune difficulté pour les densités, de la masse volumique et de la quantité de mouvement. Pour la densité d'énergie nous la définissons à partir des définitions de ses différentes contributions, ρe_c pour la densité de l'énergie cinétique et ρe_p pour celle de l'énergie potentielle, tel que :

$$\rho(\mathbf{x},t)e(\mathbf{x},t) = \rho(\mathbf{x},t)e_c(\mathbf{x},t) + \rho(\mathbf{x},t)e_p(\mathbf{x},t). \tag{3.13}$$

La densité d'énergie cinétique est ainsi donnée par,

$$\rho(\mathbf{x},t)e_c(\mathbf{x},t) = \frac{1}{2}\int \xi^2 f(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi},t)d\boldsymbol{\xi}. \tag{3.14}$$

La densité d'énergie potentielle quant à elle est sous la forme suivante :

$$\rho(\mathbf{x},t)e_p(\mathbf{x},t) = \rho(\mathbf{x},t)e_p^{\Phi}(\mathbf{x},t) + \rho(\mathbf{x},t)e_p^{V}(\mathbf{x},t). \tag{3.15}$$

La partie ρe_p^{Φ} de la densité d'énergie potentielle est localisée en $\mathbf{x}$, telle que :

$$\rho(\mathbf{x},t)e_p^{\Phi}(\mathbf{x},t) = \rho(\mathbf{x},t)\Phi(\mathbf{x}). \tag{3.16}$$

L'accélération $\mathbf{g}$ induit par la force externe $\mathbf{f} = \rho\mathbf{g}$ dérive du potentiel local Φ de sorte que,

$$\mathbf{g} = -\nabla_{\mathbf{x}}\Phi(\mathbf{x}). \tag{3.17}$$

Enfin, le potentiel d'interaction intermoléculaires $V_{ij} = V(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|)$ dépend des positions $\mathbf{x}_i$ et $\mathbf{x}_j$, et n'est donc pas naturellement localisé. Néanmoins, on peut faire l'hypothèse qu'il est local dans le cadre des applications macroscopiques introduit de la façon suivante :

$$\rho(\mathbf{x},t)e_p^{V}(\mathbf{x},t) = \frac{1}{2}\rho(\mathbf{x},t)V(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|). \tag{3.18}$$

3.2.1.3 Les moments de l'opérateur de Collision

Considérons les ***moments*** $\varphi(\boldsymbol{\xi})$ de l'opérateur de collision $\frac{\partial f}{\partial t}|_{coll}$, tels que :

$$\int \frac{\partial f}{\partial t}|_{coll}\, \varphi(\boldsymbol{\xi})\, d\boldsymbol{\xi} = -\int f(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi}) \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \varphi(\boldsymbol{\xi}) \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{dV}{dr} C(\mathbf{x},\mathbf{r}) \times \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left\{ \left[1 - \frac{1}{2}\mathbf{r}\cdot\nabla_{\mathbf{x}} + \cdots + \frac{1}{n!}(-\mathbf{r}\cdot\nabla_{\mathbf{x}})^{n-1} + \cdots \right] \rho(\mathbf{x}) \right\} d\mathbf{r} d\boldsymbol{\xi}. \quad (3.19)$$

Nous avons utilisé une intégration par partie et avons fait l'hypothèse que $\lim_{\boldsymbol{\xi}\to\pm\infty} \varphi f = 0$. Pour $\varphi = 1$, nous avons, $\int \frac{\partial f}{\partial t}|_{coll}\, \varphi(\boldsymbol{\xi})\, d\boldsymbol{\xi} = 0$ ce qui correspond à la conservation de la masse. Pour la quantité de mouvement $\varphi = \boldsymbol{\xi}$, nous avons :

$$\int \boldsymbol{\xi} \frac{\partial f}{\partial t}|_{coll}\, d\boldsymbol{\xi} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left\{ \rho^2(\mathbf{x}) \int \frac{\mathbf{r}\otimes\mathbf{r}}{r} \frac{dV}{dr} C(\mathbf{x},\mathbf{r}) \times \left[1 - \frac{1}{2}\mathbf{r}\cdot\nabla_{\mathbf{x}} + \cdots + \frac{1}{n!}(-\mathbf{r}\cdot\nabla_{\mathbf{x}})^{n-1} + \cdots \right] d\mathbf{r}. \quad (3.20)$$

Nous nous limiterons au moment associé à la quantité de mouvement puisque nous nous intéressons aux équations de Navier-Stokes et en particulier à la définition du tenseur de contraintes en présence d'interactions non locales. Pour une discussion plus exhaustive, le lecteur est invité à consulter (Irving and Kirkwood, 1950; Martys, 1999). Dans le cas où les interactions intermoléculaires non locales ne sont pas négligées, la quantité de mouvement et l'énergie ne sont pas localement conservées (en $\mathbf{x}$), en réponse aux forces provenant des positions voisines. Cependant, elles sont globalement conservées pour un système fluide fermé. L' Eq. (3.20) , représente la variation de la quantité de mouvement en $\mathbf{x}$ engendré par un champ moyen des forces intermoléculaires effectives.

3.2.2 De Boltzmann aux équations de Navier-Stokes

3.2.2.1 Les lois de conservation

De même qu'au chapitre 2, nous définissons à partir de l'équation de Boltzmann et de la définition des moments de collision φ le théorème de conservation, suivant :

Théorème 3 (Conservation).

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle \rho\, \varphi \rangle + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \rho\, \boldsymbol{\xi}\, \varphi \rangle - \rho \langle \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(\varphi) \rangle - \rho \langle \mathbf{g} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}}(\varphi) \rangle - \rho \langle \nabla_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{g})\, \varphi \rangle = \int \frac{\partial f}{\partial t}|_{coll}\, \varphi\, d\boldsymbol{\xi}, \quad (3.21)$$

où la moyenne relative d'une quantité $\langle \mathcal{A} \rangle$ est donnée par,

$$\langle \mathcal{A} \rangle \equiv \frac{\int \mathcal{A} f d\boldsymbol{\xi}}{\int f d\boldsymbol{\xi}} = \frac{1}{\rho} \int \mathcal{A} f d\boldsymbol{\xi}. \quad (3.22)$$

Conservation de la masse Pour $\varphi = 1$, nous obtenons grâce au théorème (3) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (3.23)$$

Conservation de la quantité de mouvement Pour $\varphi = \boldsymbol{\xi}$, nous obtenons grâce au théorème (3) :

$$\frac{\partial(\rho\boldsymbol{\xi})}{\partial t} = -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \rho\boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi} \rangle + \rho\mathbf{g} + \int \frac{\partial f}{\partial t}|_{coll}\, \boldsymbol{\xi}\, d\boldsymbol{\xi}. \tag{3.24}$$

Le premier terme de gauche dans l'Eq. (3.24), peut être ré-écrit en notant que,

$$\langle \rho\,(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}) \otimes (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}) \rangle = \langle \rho\boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi} \rangle - \rho\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}. \tag{3.25}$$

A partir des Eqs. (3.20) et (3.25), nous pouvons par comparaison avec l'équation de conservation de la quantité de mouvement donnée par l'Eq. (2.10) (chapitre 2), nous sommes en mesure de définir le tenseur de contraintes de Cauchy ;

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \boldsymbol{\sigma}^c(\mathbf{x}, t) + \boldsymbol{\sigma}^V(\mathbf{x}, t). \tag{3.26}$$

De plus, nous définissions :

$$\boldsymbol{\sigma}^c(\mathbf{x}, t) = -\int (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}) \otimes (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}) f d\boldsymbol{\xi}, \tag{3.27}$$

et

$$\boldsymbol{\sigma}^V(\mathbf{x}, t) \;=\; \rho^2(\mathbf{x}) \int \frac{\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}}{r} \frac{dV}{dr} C(\mathbf{x}, \mathbf{r}) \left[1 - \frac{1}{2}\mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + \cdots + \frac{1}{n!}(-\mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{x}})^{n-1} + \cdots \right] d\mathbf{r}, \tag{3.28}$$

où $\boldsymbol{\sigma}^c$ et $\boldsymbol{\sigma}^V$ sont respectivement les contributions du tenseur de contrainte, associées à l'énergie cinétique et à l'énergie potentielle liée aux interactions non locales. La pression p du fluide est définie comme la partie isotrope du tenseur de contrainte $p = -\frac{\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma})}{3}$. Dans le cas isotherme, à l'équilibre la partie de la pression correspondant à l'énergie cinétique, comme au chapitre 2, est donnée par ρRT, où T et R sont la température absolue et la constante des gaz parfaits. Tandis que, C et ρ sont indépendants de $\mathbf{x}$ dans les phases volumiques. L'équation d'état du fluide est alors donnée par,

$$p(\rho) \simeq \rho RT - \frac{4\pi}{3}\rho^2 \int r^2 \frac{dV}{dr} C(r) dr. \tag{3.29}$$

La détermination des équations constitutives liant le tenseur de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$, au tenseur des vitesses de déformations $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$, par le biais des propriétés matériaux (viscosité η) nécessiterait comme au chapitre 2, l'utilisation de la procédure de Chapmann-Enskog. Cependant, cela est hors du contexte de chapitre, et le lecteur intéressé pourra se référer à la section 2.2.3.3. Maintenant que nous connaissons les modifications apportées par les forces d'interactions notamment sur le tenseur de contrainte du fluide, intéressons-nous à la redéfinition de l'approximation BGK (Bhatnagar et al., 1954), qui nous permet de simplifier le terme de collision pour être à mesure de résoudre numériquement l'équation de Boltzmann.

3.2.2.2 L'opérateur de collision BGK modifié

Le principal obstacle dans la résolution de l'équation de Boltzmann Eq. (3.5), est la forme compliquée de l'opérateur de collision. Pour cette raison, des approximations de cet opérateur ont été proposées. Dans cette thèse, nous utilisons l'opérateur BGK (Bhatnagar et al., 1954) à temps de relaxation unique, selon lequel l'effet de la collision est proportionnel à la différence entre la fonction de distribution f et la fonction de distribution de l'équilibre f^{eq}. Avec la prise en compte des interactions non locales et la précédente définition des moments de collisions, une forme modifiée (Martys, 1999) de l'opérateur BGK est proposée :

$$\frac{\partial f}{\partial t}|_{coll} \simeq -\frac{1}{\tau_c}(f - f^{eq}), \tag{3.30}$$

où la distribution d'équilibre, f^{eq} a la forme d'une distribution de Maxwell-Boltzmann,

$$f^{eq} = \frac{\rho'}{(2\pi RT')^{D/2}} exp\left[\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}')^2}{2RT'}\right] \tag{3.31}$$

et où ρ', $\mathbf{v}'$ et T' sont déterminés à partir des équations des moments de collision. L'utilisation de l'opérateur de collision BGK dans l'Eq. (3.19), donne :

$$\rho' = \rho \tag{3.32}$$

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} + \frac{\tau_c}{\rho}\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}^V, \tag{3.33}$$

Si l'on considère des phénomènes isothermes, la température T' est choisie telle que $RT' = c_s^2$, où c_s est la vitesse du son. Dans la suite, nous proposons de présenter la forme discrète de l'équation Boltzmann-BGK modifiée.

3.3 Implémentation numérique

Dans les approches LBM (Lattice Boltzmann Method en anglais) pour les fluides diphasiques, les phases liquide et vapeur et l'interface entre elles sont décrites sans formellement suivre l'interface ou en les traitant comme deux fluides distincts. Il y a plusieurs modèles LBM multiphasiques populaires, on peut citer par exemple, le modèle (RK) à gradient de couleur proposé (color-gradient model en anglais) par (Gunstensen et al., 1991), basé sur le modèle de gaz immiscible sur réseau de (Rothman and Keller, 1988), Le modèle de Shan-Chen (SC) (Shan and Chen, 1993, 1994) qui est basé sur l'incorporation d'une force attractive ou repulsive à l'origine de la séparation de phase, le modèle à énergie libre (FE) proposé par (Swift et al., 1995) et le modèle He-Chen-Zhang (HCZ) (He et al., 1999). Dans cette thèse, nous avons développé et implémenté une version modifiée du modèle SC. D'abord, nous justifions ce choix par le fait que celui-ci offre un bon compromis entre facilité d'implémentation, temps de calculs acceptables en fonction de nos ressources informatiques, et précision du modèle. Ensuite, nous

justifions ce choix par le succès que le modèle SC a rencontré pendant la décennie passée pour la modélisation d'écoulements multiphasiques dans les milieux poreux (Martys and Chen, 1996; Pan et al., 2004; Sukop and Or, 2004). Le modèle original à pseudo-potentiel SC (Shan and Chen, 1993, 1994) est équivalent sur le plan théorique à l'approche décrite dans la section 3.2 avec l'hypothèse suivante,

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}^V(\mathbf{x},t) = \mathcal{G} \int_0^{s_{max}} ds \int \psi(\mathbf{x},t)\psi(\mathbf{x}+\hat{\boldsymbol{\xi}},t)\hat{\boldsymbol{\xi}} d\theta_v, \tag{3.34}$$

où le potentiel de champ moyen ψ dépend de la position $\mathbf{x}$ et de l'instant t seulement à travers la densité locale $\psi(\mathbf{x},t) = \psi(\rho(\mathbf{x},t))$. Dans cette équation, $d\theta_v$ est utilisé pour représenter la dépendance de l'intégration au vecteur unité où $\hat{\boldsymbol{\xi}}$, $|s_{max}|\hat{\boldsymbol{\xi}}$ représente la plage des interactions et $\mathcal{G}$ l'intensité de l'interaction. L'intensité $\mathcal{G}$ est une variable dont l'unité est l'inverse d'une température.

3.3.1 Discrétisation de l'équation de Boltzmann-BGK modifiée

A partir de la discrétisation de l'espace des quantités de mouvement en projetant l'équation de Boltzmann-BGK Eq. (3.5), (3.30) sur une base de polynômes d'Hermite (Grad, 1949a,b; Shan and He, 1998; Shan et al., 2006), de l'espace des positions et du temps en utilisant un developpement en série de Taylor comme en section 2.3, nous dérivons l'équation de Boltzmann sur réseau suivante :

$$\underbrace{f_k(\mathbf{x}+\boldsymbol{\xi}_k\Delta t, t+\Delta t)}_{streaming} = \underbrace{f_k(\mathbf{x},t) - \frac{\Delta t}{\tau_c}\Big\{ f_k(\mathbf{x},t) - f_k^{eq}\Big[\rho(\mathbf{x},t), \mathbf{v}'(\mathbf{x},t)\Big]\Big\}}_{collision} \tag{3.35}$$

où la formule de quadrature de la discrétisation de l'espace des quantités de mouvement ici en 3D, $E_{3,5}^{19}$ contient 19 nœuds avec une précision algébrique d'ordre 5. Ce qui correspond au schéma de discrétisation D_3Q_{19} (voir Fig. 3.1). Ici $\mathbf{x}$ représente un nœud du réseau, Δt est le pas de temps et $\boldsymbol{\xi}_k (k = 0, \cdots, 18)$ le vecteur des vitesses discrètres des molécules. La fonction f_k est la fonction de distribution de masse discrète liée aux directions k des vitesses discrètes des molécules, et $c_s = \frac{\Delta x}{\sqrt{3}\Delta t}$ avec Δx l'espace de la grille. Les vecteurs vitesses discrètes des molécules dans le schéma populaire, D_3Q_{19}, sont données par :

$$\boldsymbol{\xi}_k = \frac{\Delta x}{\Delta t}\begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix}. \tag{3.36}$$

Dans cette approche de discrétisation la fonction de distribution de l'équilibre est donnée par,

$$f_k^{eq}(\rho, \mathbf{v}') = w_k\rho\left[1 + \frac{\boldsymbol{\xi}_k \cdot \mathbf{v}'}{c_s^2} + \frac{(\boldsymbol{\xi}_k \cdot \mathbf{v}')^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{v}'^2}{2c_s^2}\right], \tag{3.37}$$

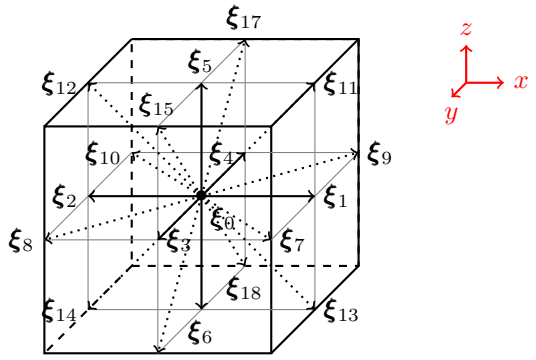


Fig 3.1 – D_3Q_{19} Schéma de discrétisation de l'espace des quantités de mouvement

où w_k le facteur poids associé à la k^{th} direction qui est donnée $w_k = 1/3(k = 0)$, $w_k = 1/18(k = 1, \cdots, 6)$ et $w_k = 1/36(k = 7, \cdots, 18)$. La densité locale du fluide et sa quantité de mouvement à chaque nœud de la grille sont liées à la fonction de distribution par,

$$\rho = \sum_{k=0}^{18} f_k \ , \ \mathbf{v} = \frac{1}{\rho} \sum_{k=0}^{18} f_k \boldsymbol{\xi}_k \ , \ \text{ et } \ \mathbf{v}' = \mathbf{v} + \frac{\tau_c \mathbf{f}^{tot}}{\rho}. \tag{3.38}$$

Il peut être montré que ces quantités évoluent selon les équations de Navier-Stokes pour la dynamique des fluides dans la limite des faibles nombre de Mach sous l'hypothèse d'incompressibilité, en utilisant la procédure de Chapmann-Enskog (Chapman and Cowling, 1970) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \tag{3.39}$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{P}^0 + \mathbf{f}^{tot} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left[\rho \eta (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v} + \nabla_{\mathbf{x}}^T \mathbf{v})\right] \tag{3.40}$$

Ci-dessus, $\mathbf{P}^0$ est le tenseur d'ordre 2 donné par l'équation d'état des gaz parfaits, $\mathbf{P}^0 = c_s^2 \rho \mathbf{1}$, avec $\mathbf{1}$ le tenseur unité d'ordre 2. Nous avons aussi introduit,

$$\mathbf{f}^{tot} = \mathbf{f}^{coh} + \mathbf{f}^{ads} + \mathbf{f}^{g}. \tag{3.41}$$

Le terme de force totale prenant en compte les forces d'interactions non locales. L'Eq. (3.34), modélise les effets de fluide dense ou de gaz rare. Plus précisement, $\mathbf{f}^{coh}$ est à l'origine de la séparation en phase liquide et vapeur du fluide ou du phénomène de capillarité, $\mathbf{f}^{ads}$ est à l'origine du phénomène de mouillabilité et $\mathbf{f}^{g} = \rho \mathbf{g}$ sont les autres forces externes possibles, telle que la force de gravité, une force externe électrique, etc. Les formes discrètes des forces d'interactions fluide-fluide $\mathbf{f}^{coh}$ et fluide-solide $\mathbf{f}^{ads}$ sont données par (Shan and Chen, 1993, 1994; Martys and Chen, 1996),

$$\mathbf{f}^{coh}(\mathbf{x}, t) = -\mathcal{G} \psi(\mathbf{x}, t) \sum_{k=1}^{18} \omega_k \psi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_k \Delta t, t) \chi^f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_k \Delta t) \boldsymbol{\xi}_k, \tag{3.42}$$

$$\mathbf{f}^{ads}(\mathbf{x},t) = -\mathcal{G}\psi(\mathbf{x},t)\sum_{k=1}^{18}\omega_k\psi(\rho^s)\chi^s(\mathbf{x}+\boldsymbol{\xi}_k\Delta t)\boldsymbol{\xi}_k, \tag{3.43}$$

où ρ^s represente une densité fictive de l'interface fluide-solide et χ^α est une fonction caractéristique associée au domaine Ω^α, $\alpha = s, f$ (où les exposants s et f font référence au solide et au fluide respectivement), telle que $\chi^\alpha(\mathbf{x}) = 1$ si $\mathbf{x} \in \Omega^\alpha$ et $\chi^\alpha(\mathbf{x}) = 0$ ailleurs. Au-dessus, $\psi(\mathbf{x},t)$ est la forme discrète ou la version réseau du potentiel de champ moyen précédemment décrit. Nous proposons de définir ce speudo-potentiel ψ en utilisant la méthode proposée par (Yuan and Schaefer, 2006) en incorporant l'équation d'état (Equation Of State, EOS) des gaz rares de (Carnahan and Starling, 1969),

$$\psi(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\mathcal{G}c_s^2\Delta t}\left[p(\rho) - \rho c_s^2\right]}, \tag{3.44}$$

$$p(\rho) = \rho RT\frac{1 + b\rho/4 + (b\rho/4)^2 - (b\rho/4)^3}{(1 - b\rho/4)^3}. \tag{3.45}$$

Ici a et b sont les constantes de l'équation d'état de Carnahan-Starling. La précédente procédure d'incorporation d'EOS permet de prendre en compte des EOS physiques de gaz rare, réduit certains inconvénients de la SC LBM originale, tels que les courants parasites, le faible rapport de densité entre les phases liquide et vapeur, et introduit explicitement la température dans le modèle SC LBM. Dans cette approche la séparation en phase liquide et vapeur se produit dès que la température absolue T est inférieure à la température critique T_{crit} du fluide. Le fluide commence alors à avoir deux phases liquide et vapeur coexistantes. A l'état critique où le fluide ne présente aucune distinction entre les phases liquide et vapeur ($\rho^l = \rho^v = \rho_{crit}$, les exposants l et v font référence à liquide et vapeur), on peut montrer que $a = 0.4963R^2T_{crit}^2/p_{crit}$ et $b = 0.18727RT_{crit}/p_{crit}$, avec p_{crit} la pression critique.

3.3.2 Conditions aux limites

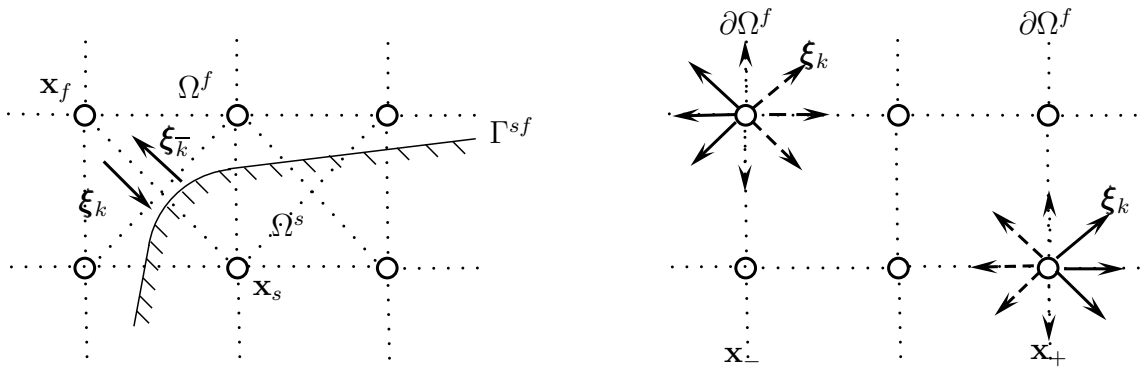


Fig 3.2 – Conditions aux limites intérieur et extérieur. (a) schéma de rebond partiel sur Γ^{sf} et (b) condition aux limites périodique sur $\partial\Omega^f$.

Une condition aux limites de rebond partiel pour le non-glissement a été implémentée à l'interface solide-fluide Γ^{sf} (Fig.3.2-a),

$$f_{\overline{k}}(\mathbf{x}_f, t+\Delta t) = f_k^{coll}(\mathbf{x}_f, t) \tag{3.46}$$

où $\boldsymbol{\xi}_{\overline{k}} = -\boldsymbol{\xi}_k$ et

$$f_k^{coll}(\mathbf{x}_f, t) = f_k(\mathbf{x}_f, t) - \frac{\Delta t}{\tau_c}\Big[f_k(\mathbf{x}_f, t) - f_k^{eq}(\mathbf{x}_f, t)\Big] \tag{3.47}$$

La condition de périodicité sur $\partial\Omega^f$ est assurée (Fig.2.2-b) par,

$$f_k(\mathbf{x}_-, t+\Delta t) = f_k^{coll}(\mathbf{x}_+ - \boldsymbol{\xi}_k\Delta t, t), \tag{3.48}$$

$$f_k(\mathbf{x}_+, t+\Delta t) = f_k^{coll}(\mathbf{x}_- - \boldsymbol{\xi}_k\Delta t, t), \tag{3.49}$$

avec $\mathbf{x}_-$ et $\mathbf{x}_+$ les nœuds des parties opposées de la limite extérieure $\partial\Omega^f$.

3.3.3 Algorithme

Un algorithme du modèle SC LBM présenté ci-dessus, est décrit dans la Fig. 3.3. Dans ce algorithme l'erreur *erreur* est calculée par,

$$erreur = \frac{\sqrt{\sum_{\mathbf{x}}\left[\mathbf{v}(\mathbf{x},t) - \mathbf{v}(\mathbf{x}, t-t^f)\right]^2}}{\sqrt{\sum_{\mathbf{x}}\mathbf{v}^2(\mathbf{x},t)}} \tag{3.50}$$

où la sommation sur l'indice $\mathbf{x}$ représente la sommation sur tous les nœuds fluides du domaines Ω^f. Dans cet algorithme nous mentionnons le calcul du tenseur de contrainte mais sans avoir proprement défini sa forme discrète. La détermination de sa forme discrète à l'équilibre thermodynamique fera l'objet de la prochaine section.

ENTRÉES. $\rho_0(\mathbf{x})$, $\mathbf{v}_0(\mathbf{x})$, τ_c, Δt, Δx, $\mathbf{g}$, T/T_{crit}, $\mathcal{G}$

INITIALISATION. $erreur = erreur_0$

TANT QUE. $error \leq tol$, $\rho_i(\mathbf{x})$ et $\mathbf{v}_i(\mathbf{x})$ connus

(1) Calcul des forces $\mathbf{f}_i^{tot}(\mathbf{x})$ et de la vitesse $\mathbf{v}_i'(\mathbf{x})$

(2) Étape de collision $f_k^i(\mathbf{x}) = f_k^i(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{\tau_c}\Big[f_k^i(\mathbf{x}) - f_k^{i,eq}(\rho_i(\mathbf{x}), \mathbf{v}_i'(\mathbf{x}))\Big]$

(3) Étape de propagation $f_k^i(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_k\Delta t) = f_k^i(\mathbf{x})$

(4) Conditions aux limites

(5) Mise à jour des variables macroscopiques $\rho_{i+1}(\mathbf{x})$, $\mathbf{v}_{i+1}(\mathbf{x})$, $p_{i+1}(\mathbf{x})$ $\boldsymbol{\sigma}_{i+1}(\mathbf{x})$

(6) Calcul de l'erreur *erreur*

(7) retourner à (1)

SORTIES. $\rho(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$, $p(\mathbf{x}, t)$ et $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t)$

Fig 3.3 – Algorithme de Boltzmann sur réseau de type Shan-Chen.

Cet algorithme a été implémenté dans le composant c_solver_multiphase_flow_lbm de la plateforme MAP (Materials Ageing Platform) à EDF R&D.

3.3.4 D'une description continue vers une description discontinue des interfaces

Par soucis de simplification de l'écriture nous adoptons $\nabla = \nabla_{\mathbf{x}}$ dans cette section. A partir du modèle SC LBM décrit au-dessus, nous pouvons déduire en absence de force externe du type de la gravité $\mathbf{f}^g = \mathbf{0}$, et à l'état d'équilibre thermodynamique le tenseur de contrainte locale du fluide $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$, en utilisant la condition :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = -\nabla \cdot \mathbf{P}^0(\mathbf{x}) + \mathbf{f}^{tot}(\mathbf{x}) \tag{3.51}$$

où $\mathbf{f}^{tot}(\mathbf{x}) = -\mathcal{G}\psi(\mathbf{x})\sum_{k=1}^{18}\omega_k\psi(\mathbf{x}+\boldsymbol{\xi}_k\Delta t)\boldsymbol{\xi}_k$ puisque $\mathbf{f}^{coh}$ et $\mathbf{f}^{ads}$ ont la même forme, avec $\psi(\mathbf{x}+\boldsymbol{\xi}_k\Delta t) = \psi(\rho^\alpha(\mathbf{x}+\boldsymbol{\xi}_k\Delta t))$ si $\mathbf{x}+\boldsymbol{\xi}_k\Delta t \in \Omega^\alpha,\ \alpha = s, f$. Nous rappelons que $\mathbf{P}^0(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x})c_s^2\mathbf{1}$. En dévéloppant la force $\mathbf{f}^{tot}$ totale d'interaction en série de Taylor jusqu'à l'ordre 2 et en intégrant la condition en Eq. (3.51), on obtient (Annexe B.1) :

$$\sigma_{ij}(\mathbf{x}) = -\Bigg[\underbrace{c_s^2\rho(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t}{2}c_s^2\mathcal{G}\psi^2(\mathbf{x})}_{\text{pression}} + \underbrace{\frac{\Delta t^3}{2}c_s^4\mathcal{G}\psi(\mathbf{x})\Delta\psi(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t^3}{4}c_s^4\mathcal{G}|\nabla\psi(\mathbf{x})|^2\Bigg]\delta_{ij} + \frac{\Delta t^3}{2}c_s^4\mathcal{G}\frac{\partial\psi(\mathbf{x})}{\partial x_i}\frac{\partial\psi(\mathbf{x})}{\partial x_j.}}_{\text{effet de la tension de surface}} \tag{3.52}$$

Á l'équilibre thermodynamique le champ de densité est homogène dans chacune des phases liquide, vapeur et évolue de façon continue le long d'une interface d'épaisseur finie ($\delta \neq 0$, où δ est l'épaisseur de l'interface) entre les deux phases. Ainsi, le tenseur de contrainte du fluide contient deux contributions principales à savoir la partie des pressions dans chacune des phases liquide, vapeur,

$$p(\rho) = c_s^2\rho + \frac{\Delta t}{2}c_s^2\mathcal{G}\psi^2(\rho) \tag{3.53}$$

et les effets d'interface liés à la présence des tensions de surface $\gamma^{\alpha\beta},\ \alpha,\beta = s, l, v$ entre les phases solide, le liquide et la vapeur. En effet, en absence de la partie liée à la pression, tous les autres termes dans la définition du tenseur de contrainte du fluide dans l'Eq. (3.52), décrivent le développement d'une interface d'épaisseur finie avec sa propre tension de surface où l'isotropie du tenseur de contrainte du fluide n'est pas assurée. En d'autres termes, le long de l'épaisseur de l'interface le tenseur de contrainte devient anisotrope avec un écart entre les composantes tangentes et la composante normale à l'interface du tenseur de contrainte (voir Fig. 3.4).

La finesse de la grille utilisée dans les applications de SC LBM n'est pas suffisante pour correctement décrire le tenseur de contrainte du fluide le long de l'épaisseur. Nous proposons

alors de remplacer les interfaces épaisses par un modèle d'interface imparfaite cohérente (voir Fig. 3.5) sans aucune épaisseur ($\delta \to 0$), en utilisant la définition quasi-thermodynamique des tensions de surface $\gamma^{\alpha\beta}$.

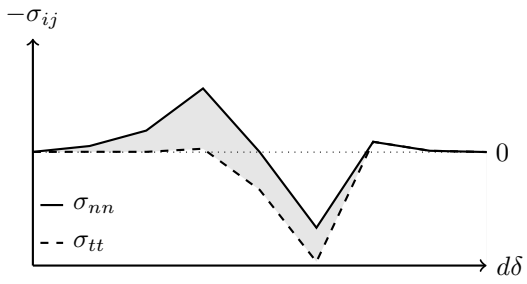


Fig 3.4 – Anisotropie du tenseur de contrainte du fluide le long de l'interface ($\delta \neq 0$). Ici δ est l'épaisseur de l'interface, $d\delta$ réprésente l'abscisse normale le long de l'épaisseur de l'interface, σ_{nn} et σ_{tt} sont les composantes normale et tangentielles de $\boldsymbol{\sigma}$.

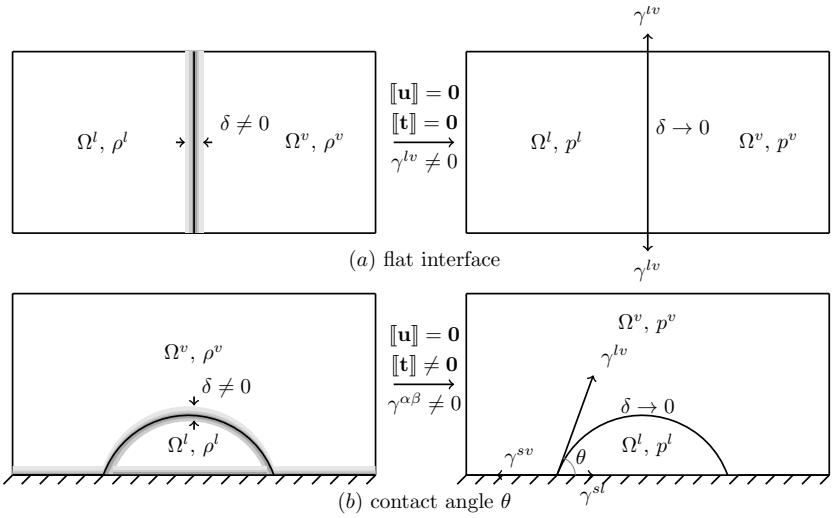


Fig 3.5 – Remplacement des interfaces solide, liquide et vapeur épaisses ($\delta \neq 0$) par des interfaces imparfaites cohérentes ($\delta \to 0$), équivalentes. Ici δ, $[\![\mathbf{t}]\!]$ et $[\![\mathbf{u}]\!]$ sont l'épaisseur des interfaces, le saut du vecteur contrainte et le saut du vecteur déplacement des interfaces, respectivement.

Selon (Rowlinson and Widom, 1982; Benzi et al., 2006), les tensions $\gamma^{\alpha\beta}$ $, \alpha\beta = s, l, v$ de surface du système à trois phases solide, liquide et vapeur sont définies comme l'intégrale le long de l'abscisse normale à l'interface de l'écart entre les composantes normale et tangentielle du tenseur de contrainte décrit ci-dessus (Annexe B.2). La tension de surface à l'interface $\Gamma^{\alpha\beta}$ est,

$$\gamma^{\alpha\beta} = -\int_{\Gamma^{\alpha\beta}} (\sigma_{nn} - \sigma_{tt}) d\delta, \tag{3.54}$$

$$cos(\theta) = \frac{\gamma^{sv} - \gamma^{sl}}{\gamma^{lv}}, \tag{3.55}$$

où $d\delta$ représente l'intégration le long de la coordonnée normale à l'interface et θ est l'angle de contact (Fig. 3.5-b). A partir du champ de densité, les domaines volumiques Ω^l, Ω^v et l'interface sans épaisseur entre eux Γ^{lv} sont déterminés par le seuil de densité moyenne $\rho_m = (\rho^l + \rho^v)/2$. Tandis que l'interface solide-fluide Γ^{sf} discontinue est choisie pour coïncider avec l'interface interne du domaine solide, il y a alors aussi un phénomène d'adsorption lié à l'excentrement de l'interface imparfaite Γ^{sf} par rapport à l'interface épaisse qui est négligé dans cette thèse.

La tension de surface $\gamma^{\alpha\beta}$ est uniformément distribuée sur l'interface $\Gamma^{\alpha\beta}$ et introduit un tenseur de contrainte de membrane de la forme,

$$\boldsymbol{\sigma}^m = \gamma^{\alpha\beta}\mathbf{1}_T \text{ sur } \Gamma^{\alpha\beta} \tag{3.56}$$

entre les phases α et β. A partir de la précédente définition de la tension de surface, nous pouvons réécrire le tenseur de contrainte sous cette forme,

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{\sigma}^\alpha = -p^\alpha \mathbf{1} \text{ dans } \Omega^\alpha,\ \alpha = l, v,\\
&\boldsymbol{\sigma}^m = \gamma^{\alpha\beta}\mathbf{1}_T \text{ sur } \Gamma^{\alpha\beta},\ \alpha\beta = sl, sv, lv,\\
&p^\alpha = c_s^2\rho^\alpha + \tfrac{\Delta t}{2}c_s^2\mathcal{G}\psi^2(\rho^\alpha),\\
&\gamma^{\alpha\beta} = -\tfrac{1}{2}c_s^2\mathcal{G}\textstyle\int_{\Gamma^{\alpha\beta}} |\frac{\partial\psi}{\partial\delta}|^2 d\delta,\\
&\gamma^{sv} - \gamma^{sl} = \gamma^{lv}cos(\theta),
\end{aligned} \tag{3.57}$$

où $\frac{\partial}{\partial\delta}$ représente la dérivée par rapport à la coordonnée normale à l'interface $\Gamma^{\alpha\beta}$. Selon le modèle d'interface imparfaite cohérente, la stabilité mécanique de l'interface $\Gamma^{\alpha\beta}$ stipule que le vecteur déplacement est continu $[\![\mathbf{u}]\!] = \mathbf{0}$ à l'interface tandis que le vecteur contrainte présente un saut de contrainte non nulle à la même interface $[\![\mathbf{t}]\!] \neq \mathbf{0}$,

$$\nabla_T \cdot \boldsymbol{\sigma}^m = -[\![\mathbf{t}]\!] = (\boldsymbol{\sigma}^\alpha - \boldsymbol{\sigma}^\beta) \cdot \mathbf{n}^\beta \text{ on } \Gamma^{\alpha\beta}, \tag{3.58}$$

où $\mathbf{n}^\beta$ représente la normale unitaire à $\Gamma^{\alpha\beta}$ orientée vers Ω^β et, $\nabla_T(\cdot)$ est l'opérateur gradient surfacique, qui pour tout tenseur $\mathbf{P}$ d'ordre 2 dérivable est donné par :

$$\nabla_T \cdot (\mathbf{P}) = \nabla(\mathbf{P}) : \mathbf{1}_T \tag{3.59}$$

avec $\mathbf{1}_T$, le tenseur identité de second ordre du plan T tangent à l'interface définit par,

$$\mathbf{1}_T = \mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \tag{3.60}$$

où $\mathbf{n}$ est la normale à l'interface, indépendamment de son orientation. En particulier l'opérateur de divergence surfacique appliqué au tenseur d'identité du plan tangent donne (Annexe B.3),

$$\nabla_T \cdot \mathbf{1}_T = -(\mathbf{1}_T : \nabla\mathbf{n})\mathbf{n} \tag{3.61}$$

qui représente la courbure moyenne locale signée. En utilisant, le fait que $\gamma^{\alpha\beta}$ est uniformément répartie sur l'interface $\Gamma^{\alpha\beta}$, on a :

$$(\boldsymbol{\sigma}^{\alpha} - \boldsymbol{\sigma}^{\beta}) \cdot \mathbf{n}^{\beta} = -\gamma^{\alpha\beta}(\mathbf{1}_T : \nabla \mathbf{n}^{\beta})\mathbf{n}^{\beta} \text{ sur } \Gamma^{\alpha\beta}. \tag{3.62}$$

Les Eq. (3.62) et (3.55) représentent la forme la plus générale de la loi de Young-Laplace. Par exemple, à l'interface liquide-vapeur Γ^{lv}, dans le cas d'une interface plane entre les phases il y a existence de la tension de surface mais il n'y a aucun saut du vecteur contrainte du fait de la courbure nulle (Fig. 3.5-a). Dans le cas d'une interface liquide-vapeur courbée, notamment pour un cas sphérique on retrouve la célèbre forme de la loi de Laplace,

$$p_c = p^v - p^l = \pm \frac{2\gamma^{lv}}{R} \tag{3.63}$$

où p_c et R sont respectivement la pression capillaire et le rayon de l'interface sphérique.

3.4 Exemples numériques

Comme dans la plupart des simulations basées sur la SC LBM, les unités dans ce chapitre sont en unité de la grille de Boltzmann, c'est à dire, que la vitesse est donnée en lu/ts, la densité est donnée en mu/lu^3, la pression est en $mu/(lu \cdot ts^2)$ et la tension de surface est en mu/ts^2, etc. Ici lu est l'unité de longueur, mu est l'unité de masse et ts est l'unité de temps. La conversion en système d'unité international se fait en utilisant le système suivant : $\mathbf{x}_{LBM} lu \rightarrow \mathbf{x}_p$ (m), $\rho_{LBM} mu/lu^3 \rightarrow \rho_p$ (kg/m^3), et $\gamma^{lv}_{LBM} mu/ts^2 \rightarrow \gamma^{lv}_p$ (kg/s^2).

Le système de conversion est totalement défini en fixant l'unité de longueur égale à l'espacement physique de la grille $lu = \Delta x m$ et en prescrivant la masse volumique de la phase liquide et la tension de surface liquide-vapeur. Par exemple à $20^{\circ}C$ de température nous avons $\rho^l_p = 1000 kg/m^3$ et $\gamma^{lv}_p = 72.8 \cdot 10^{-3} N/m$. Ici, toutes les simulations de cette section sont réalisées avec $\Delta t = 1ts$, $\Delta x = 1lu$ Pour maintenir la stabilité des simulations nous avons choisi $\tau_c = \Delta t$ et $\mathcal{G} = -1/3$.

3.4.1 Séparation en phase liquide et vapeur

Nous présentons des résultats de la simulation numérique d'une séparation en phase liquide et vapeur. On rappelle que l'état critique ($\frac{dp}{d\rho} = 0$ et $\frac{d^2p}{d\rho^2} = 0$) du fluide est donnée par $T_{crit} = 0.0943tu$, $\rho_{crit} = 0.1136 mu/lu^3$ et $p_{crit} = 0.0044 mu/(lu \cdot ts^2)$. En dessous de cette température critique il existe une plage de densité ρ pour laquelle $\frac{dp}{d\rho}$ est négatif, ce qui traduit l'initiation de la présence d'une transition en phase liquide et vapeur. Les simulations ont été réalisées sur une grille $128 \times 128 \times 4$ lu^3 voxels avec des conditions aux limites périodiques. La distribution initiale de densité est aléatoire mais avec une fraction volumique initiale $S_r = 4.32\%$ de densité liquide $\rho^l > \rho_{crit}$. La Fig. 3.6, récapitule l'évolution temporelle de la séparation en phase liquide et vapeur pour notre implémentation du modèle SC LBM. On peut voir dans cette situation

qu'au dela de $t = 30000\ ts$, on a atteint une configuration d'équilibre thermodynamique du système.

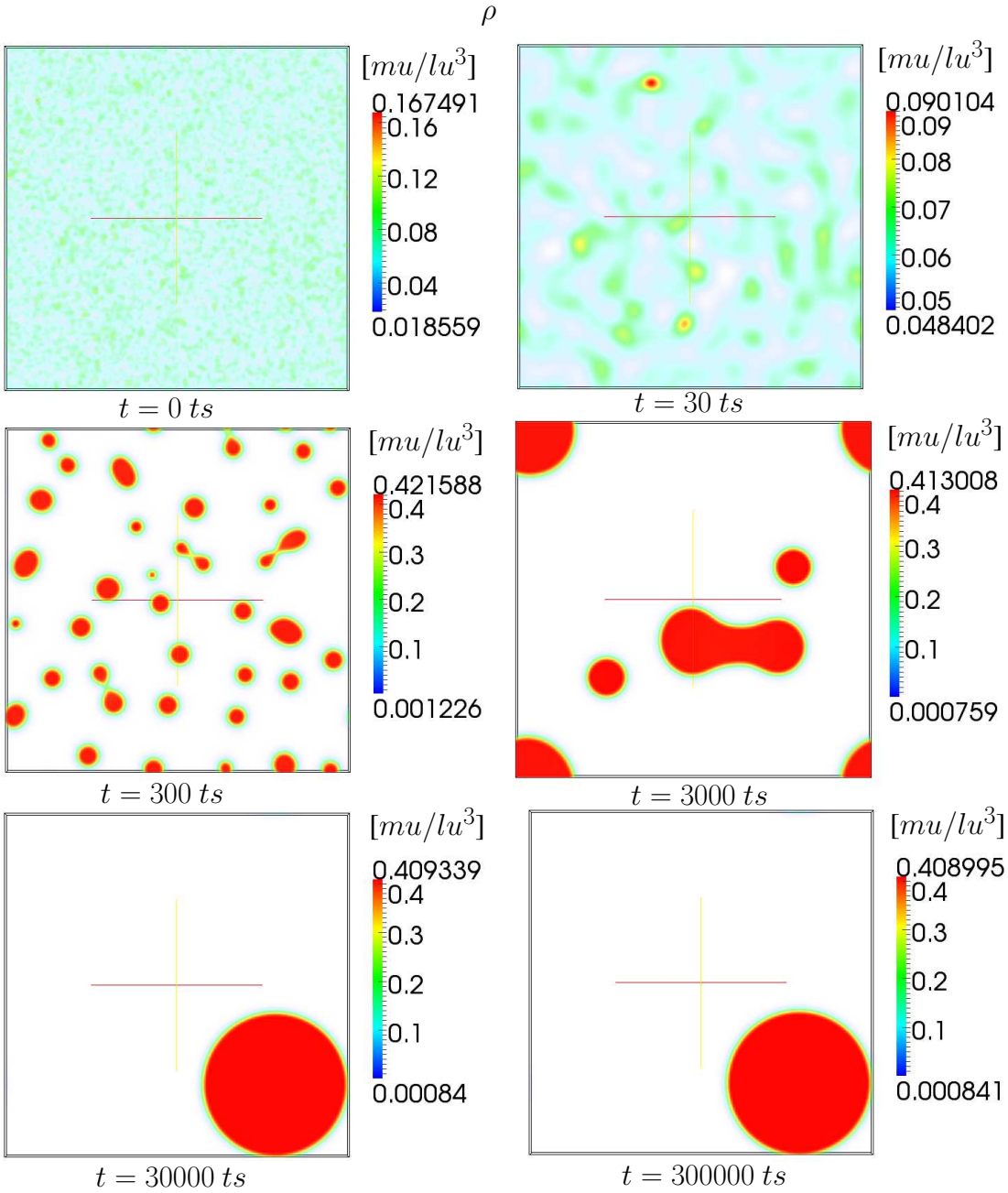


Fig 3.6 – Séparation en phase liquide et vapeur. Évolution temporelle du champ de densité à $t = 0ts$, $t = 30ts$, $t = 300ts$, $t = 3000ts$, $t = 30000ts$ et $t = 300000ts$. Dans cette simulation une fraction volumique initiale de liquide $S_r = 4.32\%$ avec $\rho^l > \rho_{crit}$ et $T/T_{crit} = 0.6$ a été utilisée.

3.4.2 Coexistence thermodynamique des phases liquides et gazeuses

Nous souhaitons discuter une limite de notre modèle SC LBM, à savoir sa consistance thermodynamique. Pour ce faire nous comparons la courbe de coexistence des densités liquide et vapeur en fonction de la température réduite obtenue par notre modèle SC LBM à celle obtenue par la construction de Maxwell (Callen, 1985). La construction de Maxwell est utilisée pour obtenir les densités liquide et vapeur à partir d'une courbe $p - v$ avec $v \infty \frac{1}{\rho}$,

$$\int_{v_l}^{v_v} p(\rho) dv = p_{sat}(v_v - v_l) \tag{3.64}$$

où p_{sat} est la pression de saturation en vapeur à une température donnée. L'équation d'état du fluide connue (Eq. (3.45)), les densités liquide et vapeur s'obtiennent par la construction de Maxwell en résolvant itérativement l'Eq. (3.64).

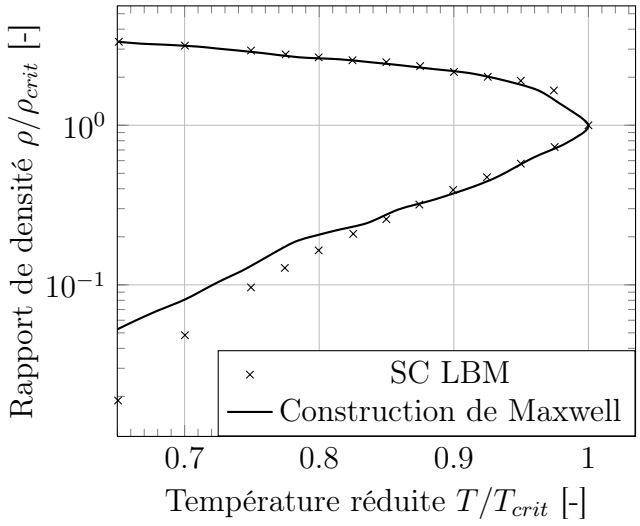


Fig 3.7 – Coexistence thermodynamique. La solution analytique est obtenue à partir de la construction de Maxwell de l'équation d'état de (Carnahan and Starling, 1969).

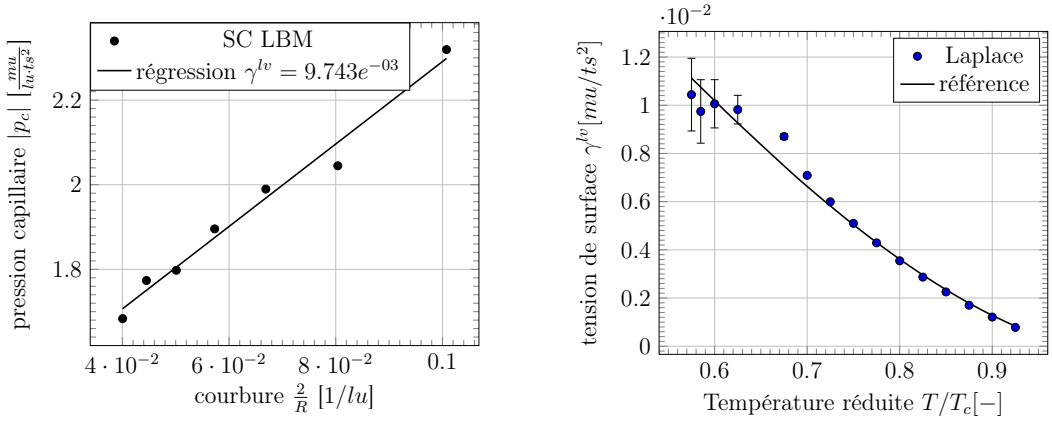
Afin de comparer notre modèle SC LBM à la construction de Maxwell obtenue pour l'équation d'état de (Carnahan and Starling, 1969), nous avons réalisé des simulations de l'équilibre liquide et vapeur dans le cas d'une interface plane avec notre modèle. Les simulations ont été réalisées sur une grille $200 \times 10 \times 10$ lu^3 voxels avec des conditions aux limites périodiques. Le champ de densité initial est donné par,

$$\rho(x) = \rho^v + \frac{\rho^l - \rho^v}{2} \left[tanh\left(\frac{2(x-50)}{\delta_0}\right) - tanh\left(\frac{2(x-150)}{\delta_0}\right) \right] \tag{3.65}$$

où ρ^l, ρ^v et δ_0 sont les densités liquide, vapeur et l'épaisseur de l'interface initiales. Le vecteur position est donné par $\mathbf{x} = (x, y, z)$. La Fig. (3.7) présente les courbes de coexistence thermodynamique obtenue par le modèle SC LBM et la construction de Maxwell, et souligne une dispersion entre elles aux basses températures. En effet, aux basses températures le modèle SC

LBM a du mal à correctement simuler au sens thermodynamique les rapports ρ^l/ρ_v importants surtout les densités de la branches vapeur. Cette observation à aussi été faite par (Kupershtokh et al., 2009), selon lesquels cela serait dû au schéma d'intégration des forces d'interactions. Une amélioration de la consistance thermodynamique pourrait être obtenue en agrandissant la plage des forces d'interaction et en gardant le même schéma d'intégration. Néanmoins cela engendrerait des coûts de calcul beaucoup plus importants. Dans cette thèse nous souhaitons tester la méthode sur des morphologies complexes en 3-D, et donc nous acceptons cette limite du modèle pour conserver des temps de calcul raisonnables.

3.4.3 La loi de Laplace



(a) Loi de Laplace à $T/T_{crit} = 0.585$ (b) tension de surface en fonction de T/T_{crit}

Fig 3.8 – Loi de Laplace et calcul de la tension de surface liquide-vapeur.

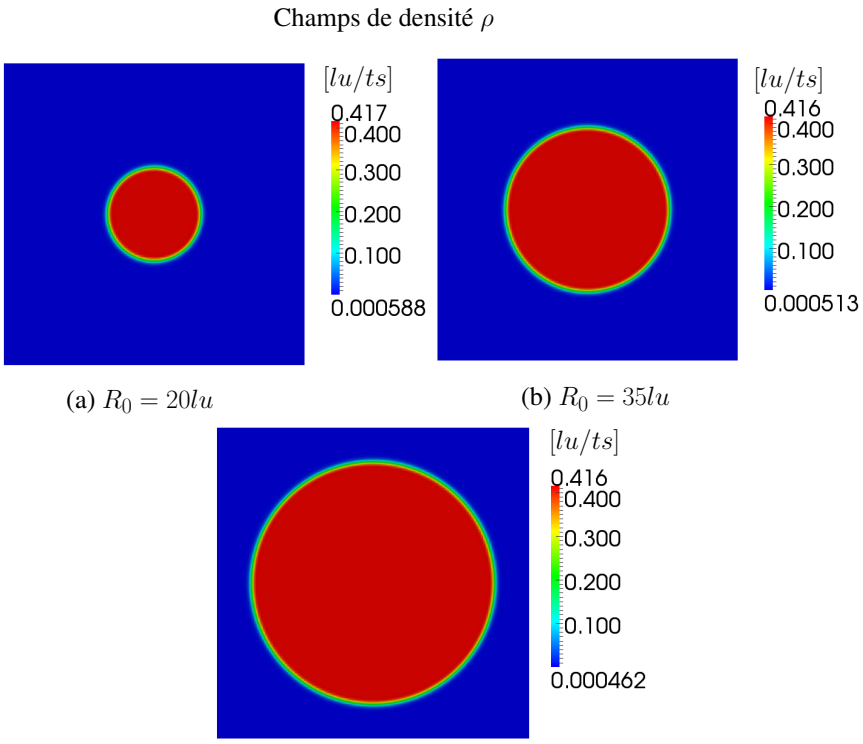
Nous considérons ici le cas d'une goutte avec plusieurs rayons dans l'objectif de valider notre implémentation de la méthode SC LBM avec la loi de Laplace. Les calculs ont été réalisés sur une grille $128 \times 128 \times 4$ lu^3 voxels et ce, à la température réduite de $T/T_{crit} = 0.585$. L'état initial en densité a été obtenu en appliquant la formule donnée par,

$$\rho(x, y, z) = \frac{\rho^l + \rho^v}{2} - \frac{\rho^l - \rho^v}{2}[tanh(\frac{2(\sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2} - R_0)}{\delta_0})] \tag{3.66}$$

où (x_0, y_0, z_0), R_0 et δ_0, les coordonnées du centre de la goutte, son rayon initial et l'épaisseur initiale de l'interface liquide-vapeur, respectivement (Fig. 3.9).

Une condition aux limites périodique a été imposée au tour du domaine. La Fig. 3.8-a montre que la loi de Laplace peut être reproduite par notre implémentation du modèle SC LBM. Dans la Fig. 3.8-b la tension de surface liquide-vapeur γ^{lv} calculée à partir de la loi de Laplace et celle obtenue à partir de la formule intégrale de l'Eq. (3.54) sont comparées. Il y a une bonne

correspondance entre les deux définitions de la tension de surface mais nous observons de faibles écarts aux basses températures réduites.

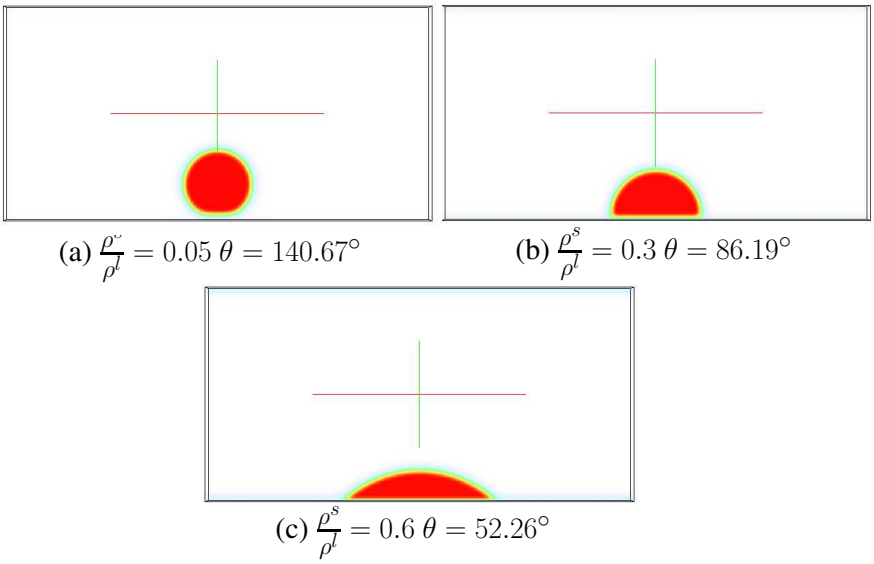


(a) $R_0 = 20lu$ (b) $R_0 = 35lu$ (c) $R_0 = 50lu$

Fig 3.9 – Différents champs de densité finale en mu/lu^3 obtenus à $T/T_{crit} = 0.585$ avec $\delta_0 = 5lu$ et un rayon initial R_0.

3.4.4 La loi de Young

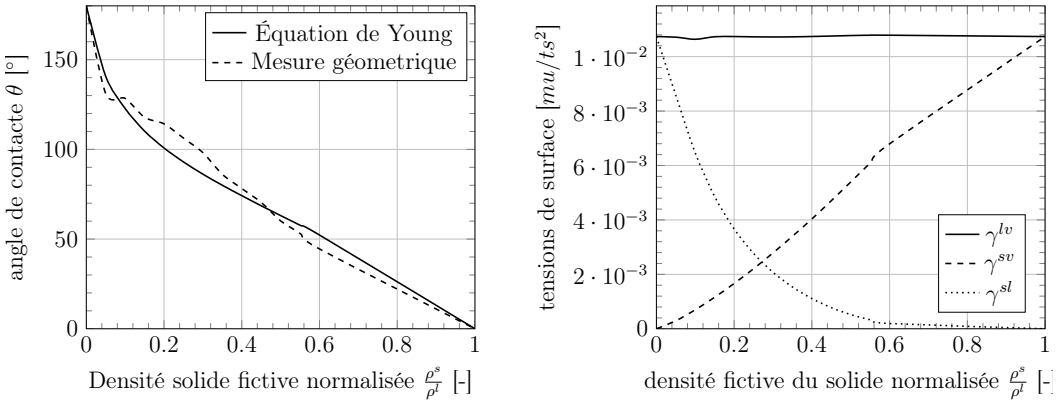
Dans le but de valider dans le cadre de la Loi de Young, la simulation classique permettant d'obtenir différents angles de contact (Fig. 3.10) a été réalisée sur une grille de $128 \times 64 \times 4$ lu^3 voxels à une température réduite $T/T_{crit} = 0.585$. Dans ces simulations, nous avons mis un demi-cercle de goutte avec un rayon de $15lu$ sur une surface solide plane et homogène. Ces simulations sont réalisées avec une condition aux limites de non glissement aux bords supérieur et inférieur du domaine, tandis qu'une condition aux limites de périodicité est imposée à gauche, à droite et dans la direction de la profondeur du domaine. Les différents angles de contact sont obtenus en faisant varier la densité fictive de l'interface solide-fluide ρ^s comme illustré sur la Fig. 3.11-a.



(a) $\frac{\rho^s}{\rho^l} = 0.05$ $\theta = 140.67°$ (b) $\frac{\rho^s}{\rho^l} = 0.3$ $\theta = 86.19°$

(c) $\frac{\rho^s}{\rho^l} = 0.6$ $\theta = 52.26°$

Fig 3.10 – Différents angles de contact obtenus en ajustant la densité fictive du solide ρ^s à $\frac{T}{T_{crit}} = 0.585$.



(a) angle de contact (b) tensions de surface

Fig 3.11 – Différents angles de contact, tensions de surface liquide-vapeur, solide-vapeur et solide-liquide en fonction de la densité fictive du solide ρ^s à $\frac{T}{T_{crit}} = 0.585$.

En effet, choisir $\rho^s = \rho^l$ conduit à $\theta = 0^\circ$ (la phase liquide est complètement mouillante) et choisir $\rho^s = \rho^v$ résulte en $\theta = 180^\circ$ (la phase liquide est complètement non mouillante), tandis que choisir ρ^s dans la plage $]\rho^v, \rho^l[$ donne un angle de contact dans la plage $]0^\circ, 180^\circ[$. Dans le but de retrouver l'équation de Young, nous proposons de comparer l'angle de contact obtenu à partir de la définition des tensions de surface Eq. (3.54), (3.55) et celui calculé à partir de la formule géométrique suivante :

$$r = \frac{(4h^2 + b^2)}{8h} \tag{3.67}$$

$$\theta = \begin{cases} arctan[\frac{b}{2(r-h)}] & \theta \leq 90^{\circ} \\ \pi + arctan[\frac{b}{2(r-h)}] & \theta > 90^{\circ} \end{cases} \tag{3.68}$$

où b et h mesurent la base et la hauteur de la goutte, après que la simulation ait convergé. La Fig. 3.11-a montre que nous pouvons reproduire l'équation de Young avec le modèle SC LBM. Dans la Fig. 3.11-b, nous montrons les tensions de surface, γ^{ls}, γ^{lv}, γ^{sv} en fonction de ρ^s. Seulement les tensions de surface γ^{ls}, γ^{sv} dépendent de ρ^s et nous satisfaisons $\gamma^{ls} = 0$ pour $\rho^s = \rho^l$, ce qui correspond à la situation du liquide parfaitement mouillant ou de la surface complètement hydrophile. Comme le montre l'équation de Young, nous retrouvons que lorsque le liquide est parfaitement mouillant, la tension de surface liquide-vapeur est égale à la tension de surface solide-vapeur $\gamma^{lv} = \gamma^{sv}$ et la tension de surface solide-liquide est nulle $\gamma^{sl} = 0$. On obtient le cas contraire dans le cas du liquide parfaitement non mouillant $\gamma^{lv} = \gamma^{sl}$, $\gamma^{sv} = 0$.

3.4.5 Courbe capillaire d'un pore de forme ellipsoïdale allongée

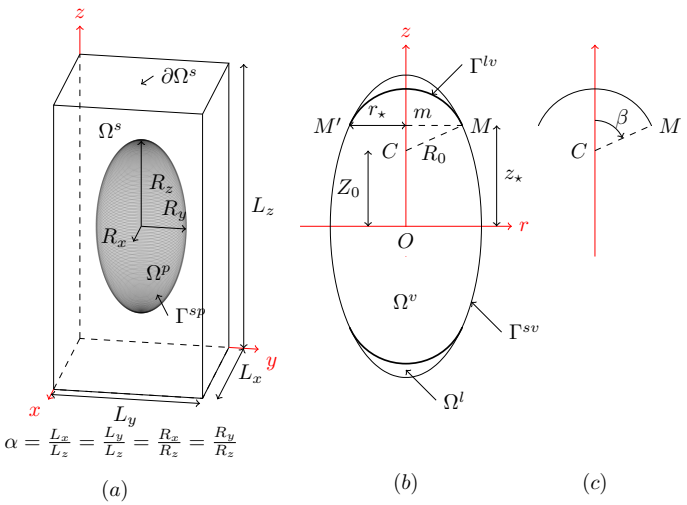
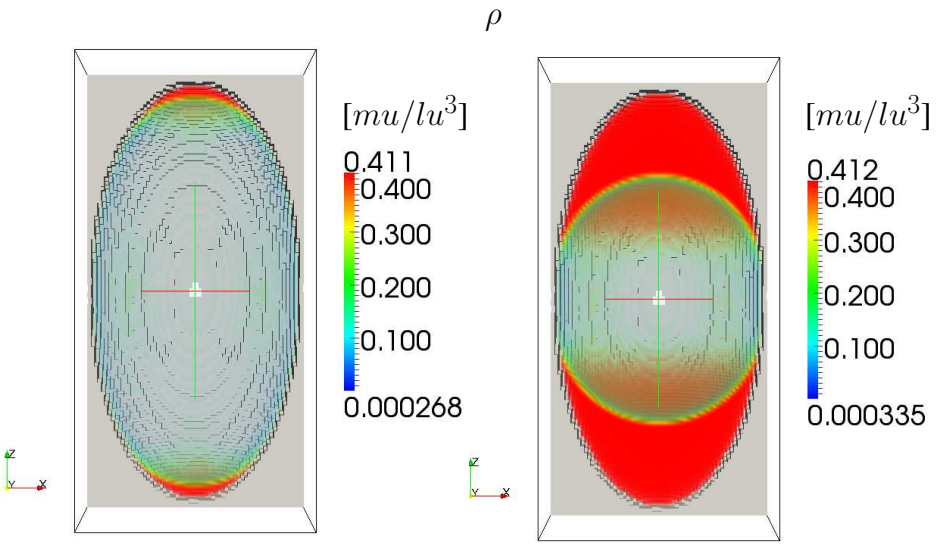


Fig 3.12 – Pore de forme ellipsoïdale en condition non saturée. (a) géométrie 3-D (b) hypothèse d'un ménisque sphérique (c) agrandissement sur l'angle β.

Il est commode en poromécanique de quantifier les effets capillaires par la courbe capillaire $p_c = p_c(S_r)$, qui est une propriété macroscopique des matériaux poreux. Ainsi, nous proposons de valider la courbe capillaire obtenue par le modèle SC LBM en présence d'interaction avec une phase solide en la comparant à une solution analytique dans le cas d'un pore ellipsoïdal allongé en condition non saturée. Ici, la phase liquide est considérée comme parfaitement mouillante , c'est à dire que l'angle de contact est nul $\theta = 0^{\circ}$ et la tension de surface liquide-vapeur est égale à la tension de surface solide-vapeur $\gamma^{lv} = \gamma^{sv}$. L'ellipsoïde a un rapport d'aspect $\alpha = 0.5$ avec les rayons $R_x = R_y = 32lu$ et $R_z = 64lu$. Les simulations SC LBM ont été réalisées sur une grille $66 \times 66 \times 132lu^3$ voxels à une température réduite $T/T_c = 0.585$ avec $\rho^s = \rho^l$ (dans le

but de simuler $\theta = 0^{\circ}$, voir Fig. 3.11) obtenue dans le cas de l'interface plate pour cette même température réduite. La Fig. 3.13 montre les champs de densité obtenus pour $Sr = 0.054$ et $Sr = 0.40$.



(a) $S_r = 5.4\%$ (b) $S_r = 40\%$

$p_c = 1.01 \times 10^{-3}\, mu/(lu \cdot ts^2)$ $p_c = 0.649 \times 10^{-3}\, mu/(lu \cdot ts^2)$

Fig 3.13 – Pore ellispoïdal en condition non saturée. (a), (b) : Champs de densité pour $\frac{T}{T_c} = 0.585$.

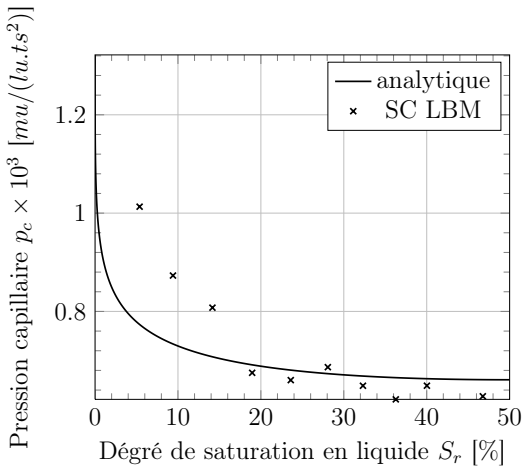


Fig 3.14 – Courbe capillaire d'un pore ellipsoïdal $\alpha = 0.5$.

Pour ce problème, la solution analytique sous l'hypothèse du ménisque sphérique (Fig. 3.12-b) est donnée par (Dormieux et al., 2006) :

$$p_c = \frac{2\gamma/R_x}{\sqrt{1 + (\alpha^2 - 1)u_\star^2}}, \tag{3.69}$$

avec $\alpha = \frac{R_x}{R_z}$ et $u_\star = \frac{z_\star}{R_z}$. Le dégré de saturation du liquide est donné par :

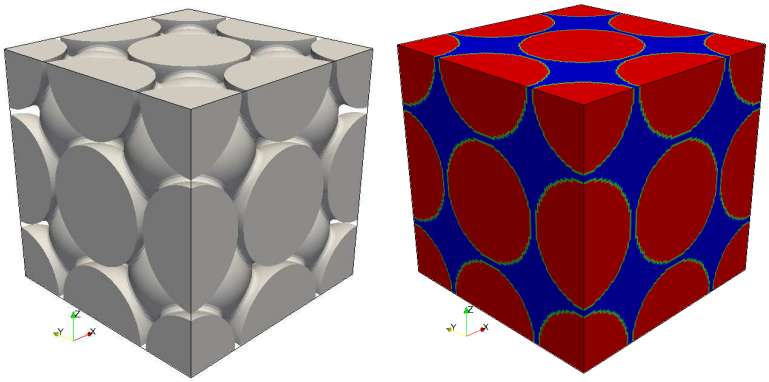
$$S_r = \frac{1}{2}(1-u_\star)^2(2+u_\star) - \alpha(\sqrt{1+(\alpha^2-1)u_\star^2})^3 + \alpha^2 u_\star(\frac{3}{2} + u_\star^2(\alpha^2 - \frac{3}{2})). \tag{3.70}$$

La comparaison entre les courbes de pression capillaire obtenues par le modèle SC LBM et par la solution analytique est montrée en Fig. 3.14. Nous observons le même ordre de grandeur pour les valeurs de pression capillaires mais avec un décalage en terme de saturation de la courbe donnée par le modèle SC LBM. Ce décalage de la saturation est lié au fait que la demi-épaisseur de l'interface est prise en compte dans le calcul du degré de saturation en liquide.

3.4.6 Microstructures à morphologie complexe

Dans l'objectif de montrer la possibilité de simuler des états d'équilibre des phases liquide et vapeur à l'échelle du réseau poreux dans des microstructures poreuses à morphologie quelconque, nous proposons de traiter le cas d'une microstructure à morphologie cubique centrée et une microstructure à morphologie idéalisée de gel de C-S-H.

3.4.6.1 Morphologie cubique centrée



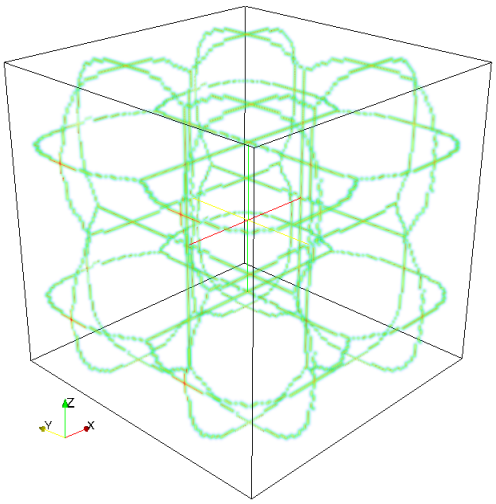
(a) Squelette solide (b) Microstructure voxelisée

Fig 3.15 – Description d'une microstructure poreuse à morphologie cubique centrée. (b) : en rouge la phase solide et en bleu l'espace poreux.

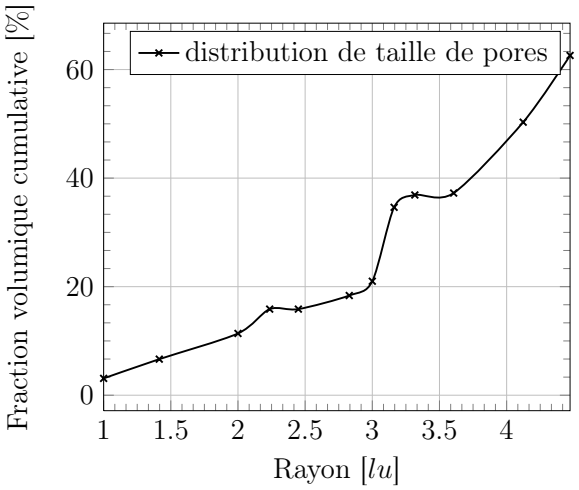
Un milieu poreux périodique à morphologie cubique centrée reproduit est considéré (voir la Fig. 3.15-a) en conditions non saturées. Le motif représentatif de ce matériaux poreux est discrétisé en $101 \times 101 \times 101$ lu^3 voxels 3.15-b. La microstructure poreuse a $\phi_0 = 16.3\,\%$ de porosité initiale, la description de la tortuosité de son réseau poreux et la distribution de ces tailles de pores sont données en Fig. 3.16. L'idée de la courbe sur la Fig. 3.16-b, est de caractériser les tailles de pore par des rayons, ce qui est très courant en poromécanique. En fait cela suppose une hypothèse de pore sphérique. Cette courbe nous l'obtenons selon les étapes suivantes :

— en déterminant pour l'espace poreux la ligne médiane (Lee et al., 1994) et ce par une opération de squeletisation (morphologie mathématique) du réseau poreux (Fig. 3.16-a),

— en estimant pour chaque point de cette ligne médiane la distance minimale au solide ensuite, ce qui nous donne tous les rayons des pores,
— enfin, pour chaque taille de pore obtenue nous calculons la volume cumulé correspondant aux pores de rayon inférieur à la taille visée en appliquant une opération de fermeture avec un élément structurant de dimension égale au rayon visée. la fraction de volume cumulée pour une taille de pore est donnée par le rapport du volume précédemment calculé sur le volume totale de l'espace poreux.



(a) axe médian du réseau poreux



(b) distribution des tailles de pore

Fig 3.16 – Caractéristiques du réseau poreux d'une microstructure de type cubique centré : (a) tortuosité and (b) tailles de pore.

Afin de déterminer la courbe capillaire pour notre microstructure cubique centrée nous avons réalisé plusieurs simulations à masse totale du fluide constante avec notre implémentation du modèle SC LBM. Les simulations ont été réalisées à température réduite $T/T_{crit} = 0.585$, en faisant une hypothèse de mouillabilité parfaite c'est à dire la densité fictive de la phase solide servant à simuler les angles de contact est prise égale à la densité liquide $\rho^s = \rho^l$, avec $\gamma^{lv} = \gamma^{sv} = 10.737 \times 10^{-3}\ mu/ts^2$. Le champ de densité est initialisé de façon aléatoire tout en s'assurant d'avoir une fraction volumique initiale de la phase liquide correspondant à un degré de saturation en liquide S_r prescrit. Le modèle SC LBM converge vers une répartition d'équilibre entre les phases liquide et vapeur à l'échelle du pore avec la masse totale du fluide maintenue constante. La Fig. 3.17 présente plusieurs répartitions à l'équilibre thermodynamique des phases liquide et vapeur obtenues à partir de nos simulations.

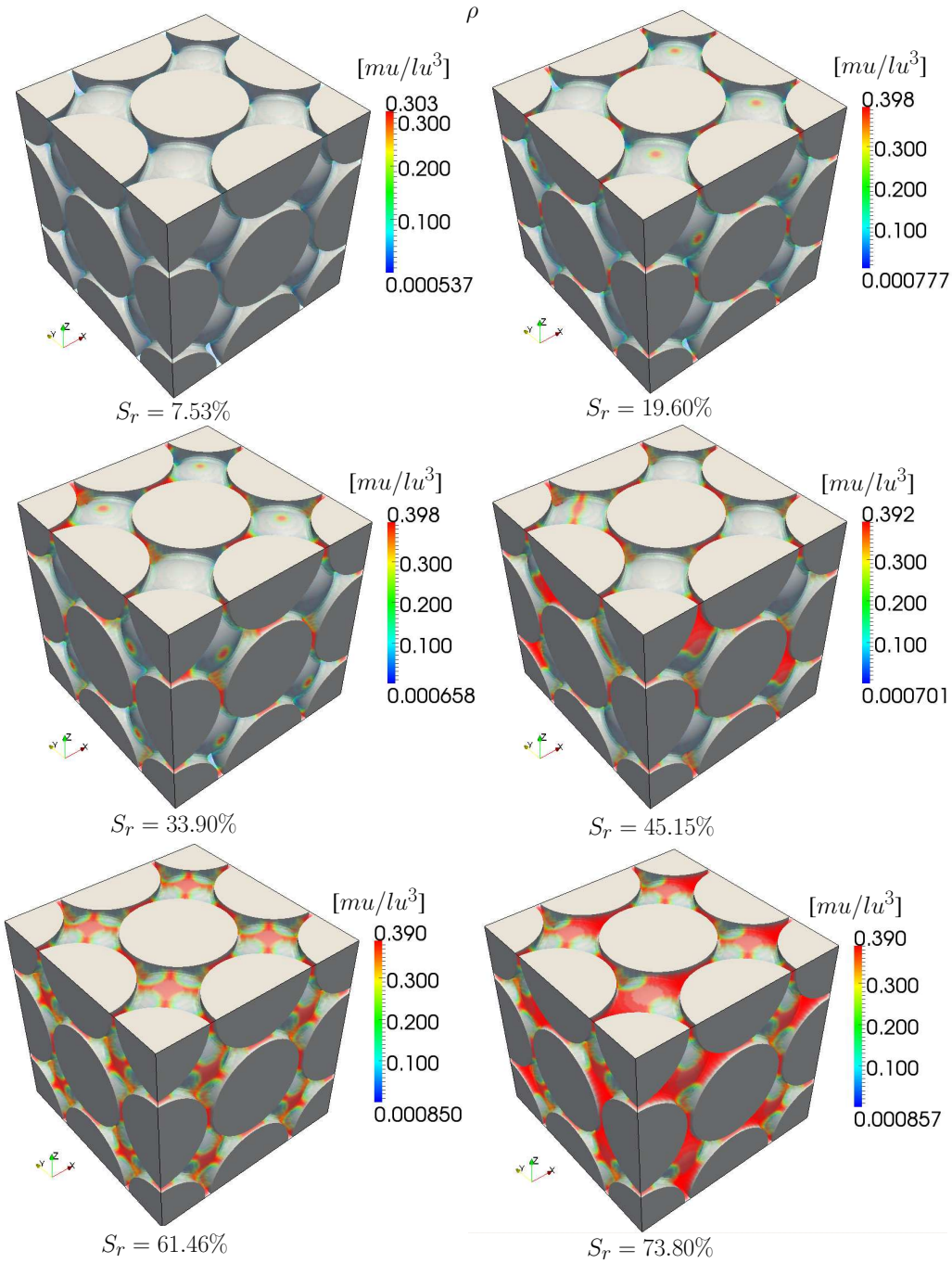


Fig 3.17 – Répartition à l'équilibre thermodynamique des phases liquide et vapeur dans l'espace poreux pour différente saturation en liquide d'une microstructure de type cubique centré.

La Fig. 3.18 présente les courbes capillaires pour cette microstructure cubique centrée obtenue par le modèle SC LBM et par une estimation. L'estimation de la courbe capillaire est construite à partir de la distribution des tailles de pores montrée sur la Fig. 3.16-b. En effet, la pression capillaire est estimée à partir de la loi de Laplace,

$$p_c = \frac{2\gamma^{lv}}{R} \tag{3.71}$$

où γ^{lv} et R sont respectivement la tension de surface liquide vapeur et le rayon du pore. Cette estimation de la pression capillaire fait l'hypothèse d'un pore sphérique, tandis que la saturation est directement donnée par la fraction volumique cumulée associée à la taille de pores en question. La comparaison entre les deux courbes capillaires montre que nous avons les mêmes ordres de grandeur, néanmoins le modèle SC LBM nous donne une information plus riche. Le modèle SC LBM permet d'associer la pression capillaire a une répartition d'équilibre local des phases liquide et vapeur. Cette information est utile car nous pouvons observer à partir du nuage de points du modèle SC LBM que nous pouvons en fonction de la répartition locale qui dépend du trajet de séchage ou d'humidification obtenir pour une saturation en liquide fixée plusieurs valeurs de pressions capillaires. Ce phénomène couramment appelé hystérésis de la courbe capillaire en séchage ou en humidification s'explique généralement par les effets de goulots (Coussy, 2004), c'est à dire pour la même masse totale d'eau, en séchage les ménisques capillaires sont dans les petits pores tandis qu'ils sont dans les grands pores en humidification.

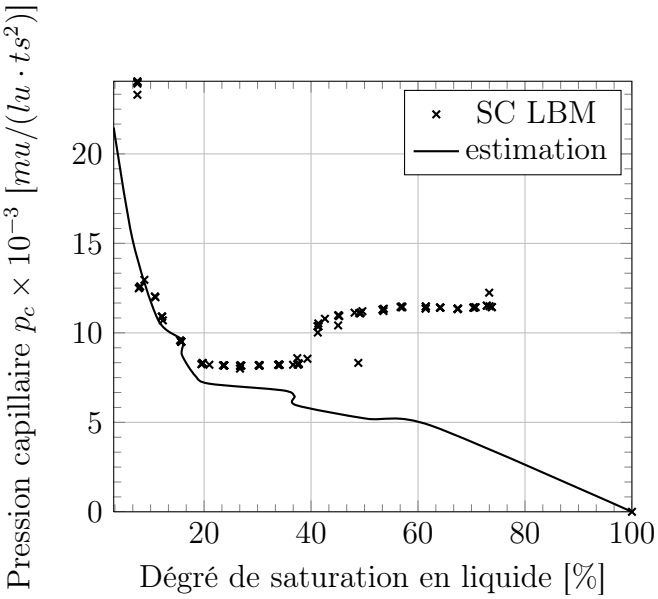


Fig 3.18 – Courbe capillaire d'une microstructure de type cubique centré.

Enfin, le nuage de points obtenus à partir du modèle SC LBM montre que nous pouvons estimer quantitativement l'hystérésis en simulant des trajets de séchage et d'humidification.

3.4.6.2 Morphologie du type du gel de C-S-H

La même procédure qu'en section 3.4.6.1, d'utilisation du modèle SC LBM est utilisée pour simuler le comportement hydrique d'une microstructure poreuse du type du gel de C-S-H. Cette microstructure à été construite numériquement en générant aléatoirement des ellipsoïdes aplaties de rayons $r_x = 60\ lu$, $r_y = 30\ lu$ et $r_z = 5\ lu$.

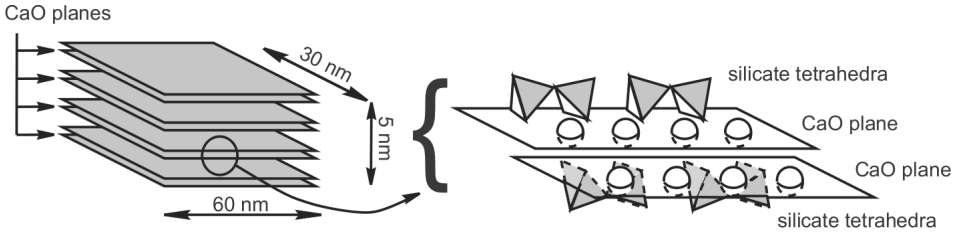
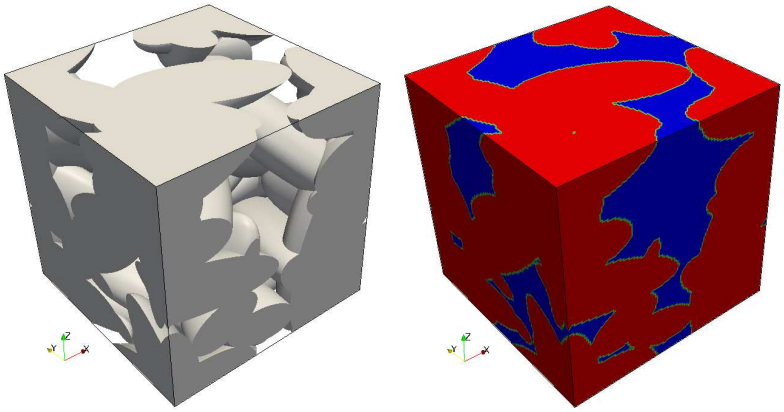
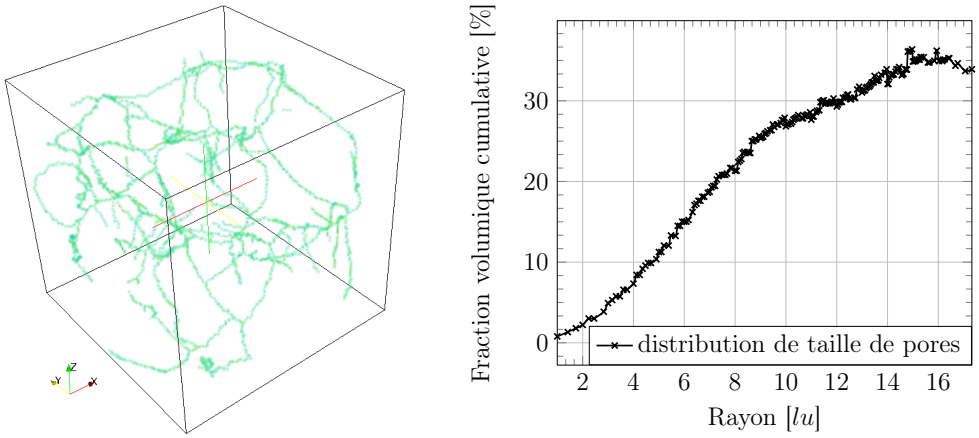


Fig 3.19 – Réprésentation schématique d'une particule de C-S-H ((Barbarulo, 2002) à partir du modèle de Courault et Nonat (Courault, 2001; Nonat et al., 2001))



(a) Squelette solide (b) Microstructure voxelisée

Fig 3.20 – Description d'une microstructure poreuse à morphologie du type du gel de C-S-H. (b) : en rouge la phase solide et en bleu l'espace poreux.



(a) axe médian du réseau poreux (b) distribution des tailles de pore

Fig 3.21 – Caractéristiques du réseau poreux d'une microstructure de type C-S-H : (a) tortuosité and (b) tailles de pore.

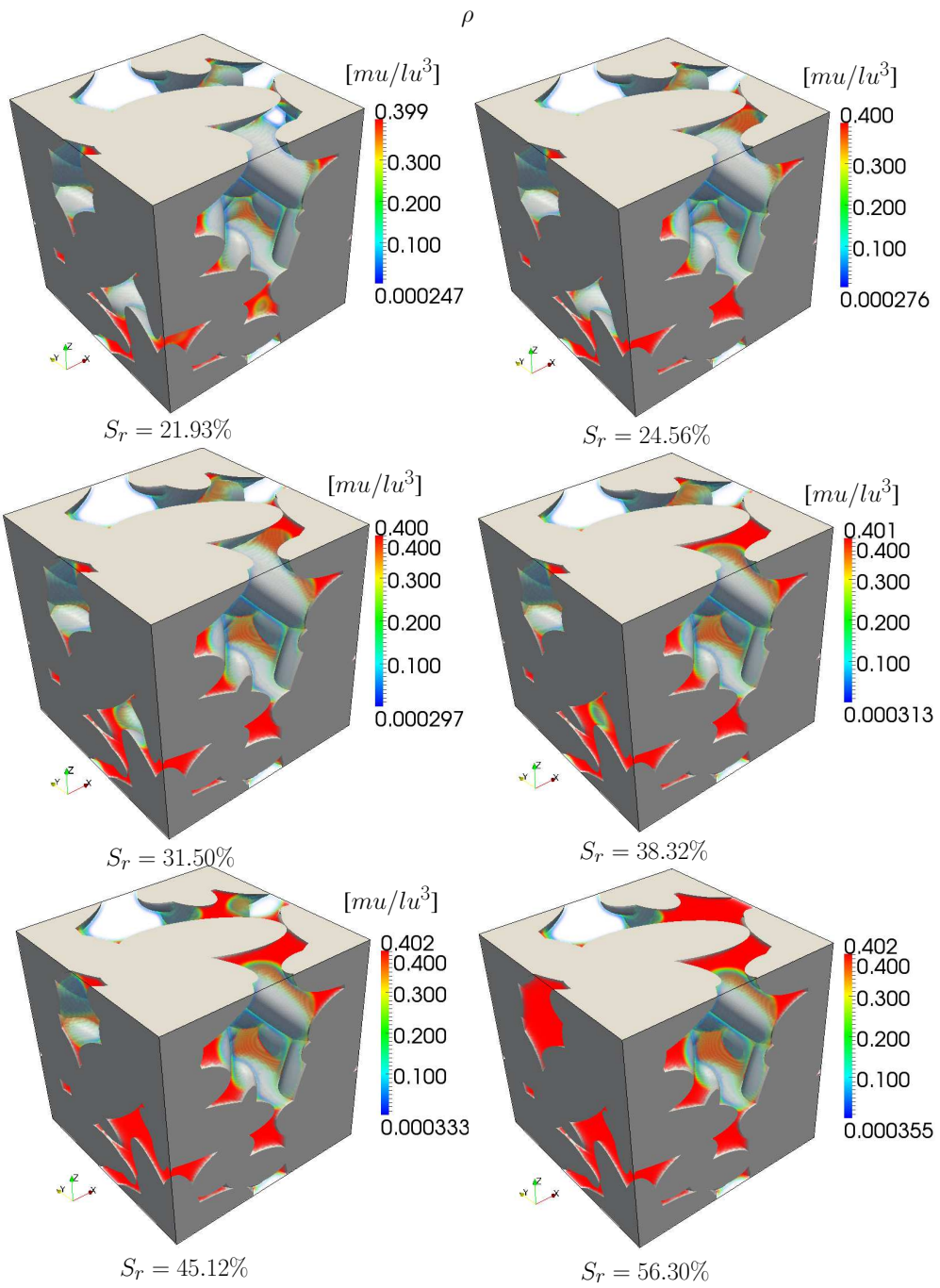


Fig 3.22 – Répartition à l'équilibre thermodynamique des phases liquide et vapeur dans l'espace poreux pour différentes saturations en liquide d'une microstructure de type C-S-H.

Dans ce modèle, la particule aplatie représente une particule de C-S-H, avec les rapports d'aspect de forme de celle-ci définis selon le modèle de particule de C-S-H proposé sur la Fig. 3.19 par (Barbarulo, 2002). La microstructure poreuse a été construite numériquement, en générant à des positions et avec des orientations aléatoires dans un domaine cubique des particules aplaties de C-S-H. Les intersections entre les particules sont autorisées et la seule contrainte que nous

prenons en compte lors de la génération de cette microstructure est la périodicité du domaine. En effet, lorsqu'une particule générée est en contact avec une ou plusieurs limites du domaine, une ou des particules sont générées aux limites opposées. Une telle microstructure d'une porosité initiale $\phi_0 = 30\%$ à été générée dans un domaine $128 \times 128 \times 128 \times lu^3$ et à été voxelisée à partir d'un outil que nous avons dévéloppé sous Salomé_méca (voir Fig. 3.20).

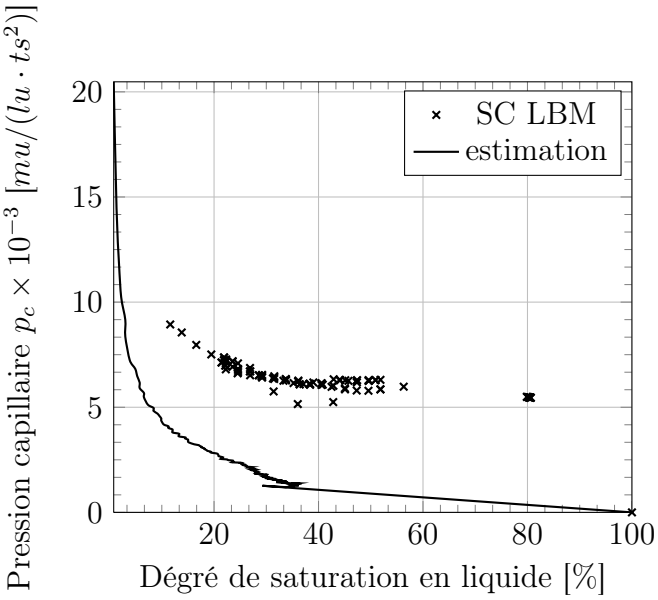


Fig 3.23 – Courbe capillaire d'une microstructure de type C-S-H.

Les simulations ont été réalisées à température réduite $T/T_{crit} = 0.6$, en faisant une hypothèse de la phase liquide parfaitement mouillante, avec $\gamma^{lv} = \gamma^{sv} = 10.239 \times 10^{-3}\ mu/ts^2$. La description de la tortuosité de son réseau poreux et la distribution de ces tailles de pores sont données en Fig. 3.21. La Fig. 3.22 présente quelques répartitions à l'équilibre thermodynamique des phases liquide et vapeur obtenues à partir de nos simulations. Enfin, La Fig. 3.23 présente les courbes capillaires pour cette microstructure de type gel de C-S-H obtenue par le modèle SC LBM et par une estimation donnée à partir de la distribution des tailles de pore. Nous avons encore les mêmes ordre de grandeur mais l'estimation ne permet pas de prendre en compte la distribution détaillée des ménisques capillaires et sous-estime la pression capillaire.

3.5 Conclusion

Nous avons dans ce chapitre développé un modèle à partir de la méthode Boltzmann sur réseau et du modèle de Shan-Chen, nous permettant de résoudre les équations de Navier-Stokes pour un fluide diphasique à l'échelle du réseau poreux. Cela nous permet de comprendre le comportement d'un fluide diphasique dans un milieu poreux, par exemple en nous permettant d'estimer la courbe capillaire d'une microstructure poreuse. Nous nous sommes particulièrement

intéressés à faire un rappel théorique de la méthode et ainsi de présenter le modèle de Shan-Chen comme une variante discrète d'une équation de Boltzmann prenant en compte un potentiel d'interaction entre les particules du fluide. Nous avons conclu que la méthode présente certaines limites, dont sa consistance thermodynamique aux basses températures réduites. Néanmoins, elle permet entre autre de correctement reproduire les lois de Laplace et de Young. Ce modèle a pu être utilisée pour simuler le comportement hydrique dans le cas de microstructures à morphologie complexe, comme le gel de C-S-H. Nous sommes arrivés au terme de notre travail de présentation de la SC LBM et des possibilités d'application qu'elle nous offre. Les prochains verrous que nous devons lever pour être en mesure de modéliser de façon unifiée les phénomènes de fluage et de retrait, sont la modélisation du chargement hydrique à l'interface solide-pore en condition non saturée et la loi de comportement permettant de prendre en compte les mécanismes élémentaires décrit dans la conclusion du chapitre 1.

Chapitre 4

La réponse mécanique en condition non saturée des microstructures poreuses à morphologie quelconque

Sommaire

4.1 Introduction **118**

4.2 Théorie **119**

4.2.1 Problème d'équilibre local en condition non saturée 119

4.2.1.1 Description d'une microstructure poreuse en condition non saturée 119

4.2.1.2 Effet mécanique de la tension $\gamma^{\alpha\beta}$ de surface à l'interface $\Gamma^{\alpha\beta}$ . . 120

4.2.1.3 Moyenne des contraintes et des déformations 122

4.2.1.4 Équations d'équilibre d'une microstructure poreuse en condition non saturée 123

4.2.2 Modéle de comportement de la phase solide du gel C-S-H 125

4.2.2.1 Viscoélasticité linéaire vieillissante isotrope et l'hypothèse du coefficient de Poisson en fluage constant 126

4.2.2.2 Théorie de microprécontrainte-solidification (MPS) 127

4.2.2.3 Spèctre de retard continu de la fonction de fluage non vieillissante $\Phi(t-t')$ 130

4.3 Implémentation numérique **131**

4.3.1 Conditions aux limites périodiques 131

4.3.2 Algorithmes de détection des interfaces, de calcul de la courbure locale signée et de la moyenne de contrainte de membrane 133

4.3.3 Intégration numérique de la théorie MPS : algorithme exponentiel 136

4.4 Exemples numériques **139**

4.4.1 Validations des conditions aux limites périodique en 3-D 139

4.4.2 Détection des interfaces solide-liquide, solide-vapeur et liquide-vapeur . . . 144

4.4.3 Surpression/depression induite par la présence de tension de surface 147

4.4.4 Simulations de la réponse d'un point matériel avec la théorie MPS 148

4.4.4.1 Simulations à humidité constante 150

4.4.4.2 Simulations à humidité variable 154

4.5 Conclusion **156**

4.1 Introduction

A partir du chapitre 3, nous sommes en mesure pour une microstructure poreuse à morphologie complexe telle que celle du gel de C-S-H de générer des répartitions d'équilibre thermodynamique des phases liquide et vapeur à l'échelle du réseau poreux. Ces états de non saturation correspondent aux états du matériau poreux lors des processus de séchage et/ou d'humidification. Dans ce dernier chapitre sur la méthodologie mise en œuvre dans le cadre de cette thèse, nous nous intéressons à la réponse mécanique des microstructures poreuses dans des états de saturation partielle en liquide. En effet, intéressé par la modélisation unifiée des phénomènes de fluage et de retrait des bétons, nous pensons qu'il faudrait pour la microstructure poreuse du gel de C-S-H, analyser la réponse mécanique sous l'effet combiné d'un chargement hydrique induit par la non saturation en liquide d'une part, et par un chargement mécanique macroscopique imposé d'autre part. Cette approche, nous permet en plus de correctement modéliser le chargement hydrique, d'introduire quelques mécanismes de fluage et de retrait identifiés au chapitre 1 pertinents à cette échelle. Il s'agit des mécanismes de solidification et de glissement de cisaillement influencés par la microprécontrainte (Bazant and Prasannan, 1989a; Bazant et al., 1997a). Ces derniers, seront directement modélisés au travers du modèle de comportement proposé pour la phase solide du gel de C-S-H. Dans ce chapitre, nous présentons une partie théorique, une partie implémentation numérique et nous terminons par les exemples numériques. Dans la partie théorique, nous commençons par présenter l'effet mécanique induit par la tension de surface, nous définissons les quantités macroscopiques du système à étudier, ensuite nous abordons la description du problème d'équilibre local en condition non saturée et nous terminons par le modèle de comportement de la phase solide du gel de C-S-H. Dans la seconde partie sur l'implémentation, nous présentons les techniques développées pour être en mesure de correctement imposer le chargement induit par la non saturation à l'interface solide-fluide, les techniques permettant d'effectuer la moyenne de la contrainte de membrane et terminons par l'algorithme d'intégration explicite (Bazant, 1971; Bazant and Prasannan, 1989b; Bazant et al., 1997b, 2004) du modèle de comportement viscoélastique vieillissant de la phase solide. Les exemple numériques présentés ont été réalisés avec une version de Salomé_méca et Code_Aster surchargée par des routines python dévéloppées dans cette thèse afin de pouvoir imposer les efforts induits par le fluide diphasique et effectuer les moyennes des contraintes en présence des tensions de surface. La loi de comportement viscoélastique vieillisante utilisée ici est une version de la théorie de microprécontrainte-solidification (Bazant and Prasannan, 1989a; Bazant et al., 1997a) qui a été implémentée sous Mfront dans le cadre de cette thèse. L'ensemble de ces développements ont été réalisés au MSME et ont été intégrés par EDF R&D à la plateforme logicielle MAP (Materials ageing platform) dédiée au calcul sur les matériaux.

4.2 Théorie

4.2.1 Problème d'équilibre local en condition non saturée

4.2.1.1 Description d'une microstructure poreuse en condition non saturée

Considérons une microstructure poreuse en condition non saturée contenue dans un domaine noté Ω (Fig. 4.1-a), représentative d'une milieu poreux périodique partiellement saturé. Les domaines Ω^s et Ω^f sont respectivement associés aux phases solide et fluide. Le contour intérieur Γ^{sf} est l'interface entre les domaines solide et fluide. L'interface Γ^{sf} peut être séparée en Γ^{sl}, l'interface solide-liquide et Γ^{sv}, l'interface solide-vapeur. Comme nous sommes en condition non saturée le domaine fluide peut être scindé en deux domaines à savoir, le domaine occupé par la phase liquide Ω^l et celui occupé par la phase vapeur Ω^v du fluide. Introduisons aussi Γ^{lv}, l'interface entre les domaines liquide et vapeur. Notons par $\partial\Omega$, la limite extérieure du domaine Ω, qui contient, $\partial\Omega^s$ la limite extérieure du domaine solide et $\partial\Omega^f$, la limite extérieur du domaine fluide.

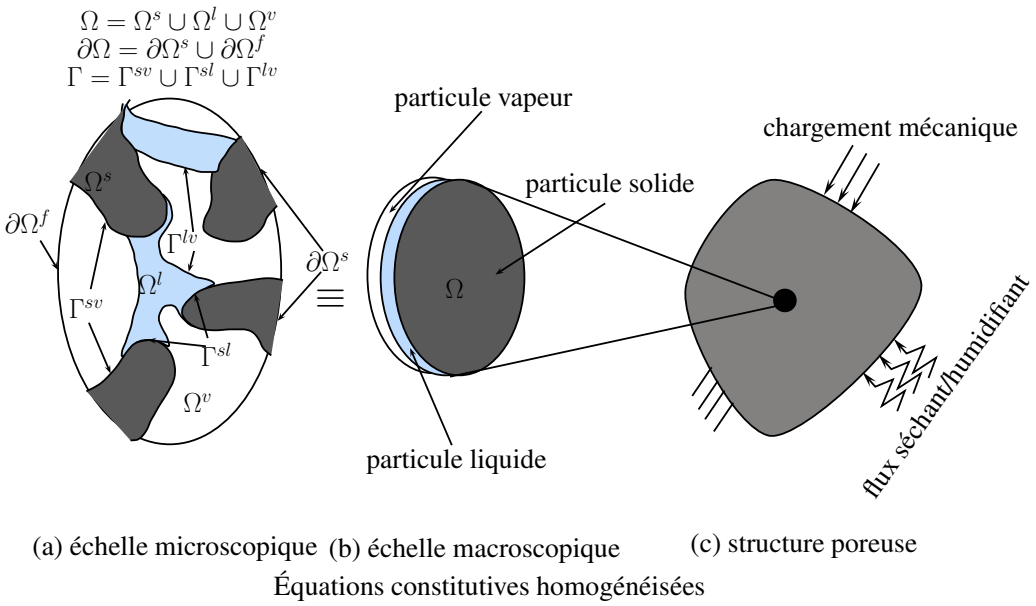


Fig 4.1 – Description schématique des différentes échelles d'un milieu poreux en condition non saturée. (a) échelle microscopique, (b) échelle macroscopique et (c) échelle de la structure.

Nous qualifions de description macroscopique du milieu poreux non saturée, l'échelle où nous considérons chacune des phases solide, liquide et vapeur comme des particules homogènes situées à la même position à l'échelle de la structure (Fig. 4.1-b, c). Dans cette description ces particules sont en interaction les unes avec les autres et la description de ces interactions fait l'objet de l'approche macroscopique de la poromécanique (Coussy, 2004). Dans la suite nous nous intéressons à la mécanique microscopique d'un tel milieu et au changement d'échelle nous permettant d'analyser et de construire un comportement macroscopique.

4.2.1.2 Effet mécanique de la tension $\gamma^{\alpha\beta}$ de surface à l'interface $\Gamma^{\alpha\beta}$

Nous avons déjà souligné en section 3.3.4 du chapitre 3, qu'il est préférable de mettre sous sa forme correspondant aux interfaces à épaisseur nulle, le tenseur de contrainte obtenu par post-traitement des champs de densité à l'équilibre thermodynamique obtenus par la méthode de Boltzmann sur réseau, Eqs. (3.57).

On souligne que la principale raison justifiant le passage aux interfaces à épaisseur nulle, est le fait que la discrétisation utilisée dans les applications précédentes de la méthode de Boltzmann ne permet pas d'obtenir une description précise du tenseur de contrainte dans l'épaisseur de l'interface. Néanmoins ces discrétisations sont suffisantes, comme nous avons pu le montrer au chapitre 3, pour calculer les tensions de surface entre les phases solide, liquide et vapeur. Dans la définition de la contrainte de membrane $\boldsymbol{\sigma}^m$ dans l'Eq. (3.57), $\gamma^{\alpha\beta}$, est la tension de surface, tandis que $\mathbf{1}_T$ est le tenseur identité du plan tangent T de l'interface $\Gamma^{\alpha\beta}$, donné par (3.60).

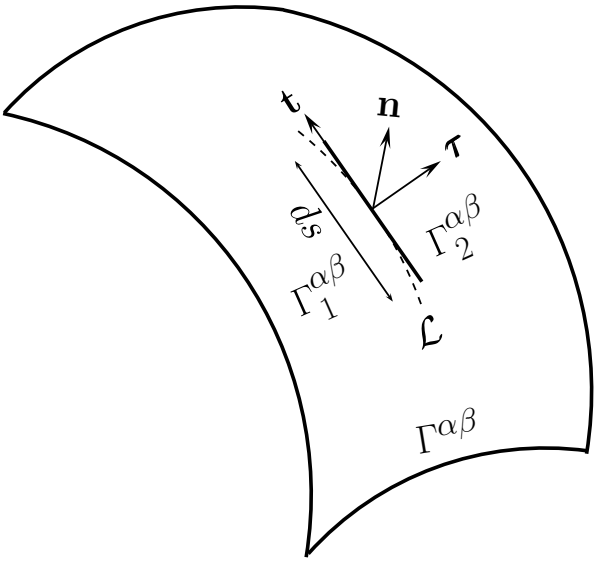


Fig 4.2 – Concept de contrainte de membrane.

Nous avons besoin de bien comprendre le sens physique de cette contrainte de membrane. Soient $\Gamma_1^{\alpha\beta}$ et $\Gamma_2^{\alpha\beta}$ deux sous domaines de $\Gamma^{\alpha\beta}$ séparés par la courbe $\mathcal{L}$. Notons par $\mathbf{t}$ le vecteur tangent unitaire de $\mathcal{L}$ et $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{t} \wedge \mathbf{n}$ est la normale à $\mathcal{L}$ située sur le plan T. Considérons que $\boldsymbol{\tau}$ est orientée vers $\Gamma_2^{\alpha\beta}$, la force élémentaire appliquée par $\Gamma_2^{\alpha\beta}$ sur $\Gamma_1^{\alpha\beta}$ le long du segment élémentaire $\mathbf{t}\, ds$ est $\gamma^{\alpha\beta}\boldsymbol{\tau} ds$ (Dormieux et al., 2006) (Fig. 4.2). Définissant ainsi, la contrainte de membrane par,

$$\boldsymbol{\sigma}^m \cdot \boldsymbol{\tau} = \gamma^{\alpha\beta}\boldsymbol{\tau}. \tag{4.1}$$

Puisque l'équation précédente s'applique pour toutes les orientations possibles de $\boldsymbol{\tau}$ dans le plan tangent T, nous aboutissons à l'identité tensorielle utilisée dans l'Eq. (3.57). La présence de la tension de surface à l'interface $\Gamma^{\alpha\beta}$, engendre une discontinuité du vecteur contrainte à

travers cette interface et est une généralisation de la loi de Young-Laplace, Eqs (3.58), (3.59), (3.60), (3.61), (3.62) et (3.63). En particulier, pour une interface liquide-vapeur sphérique avec le centre de courbure situé dans la phase vapeur, comme c'est le cas de l'interface liquide-vapeur dans les milieux poreux non saturés où le liquide est en depression ($p^l < 0$), nous avons la Loi de Laplace,

$$p_c = p^v - p^l = \frac{2\gamma^{lv}}{R} \text{ sur } \Gamma^{lv}, \tag{4.2}$$

avec R le rayon de la sphère et p_c la pression capillaire.

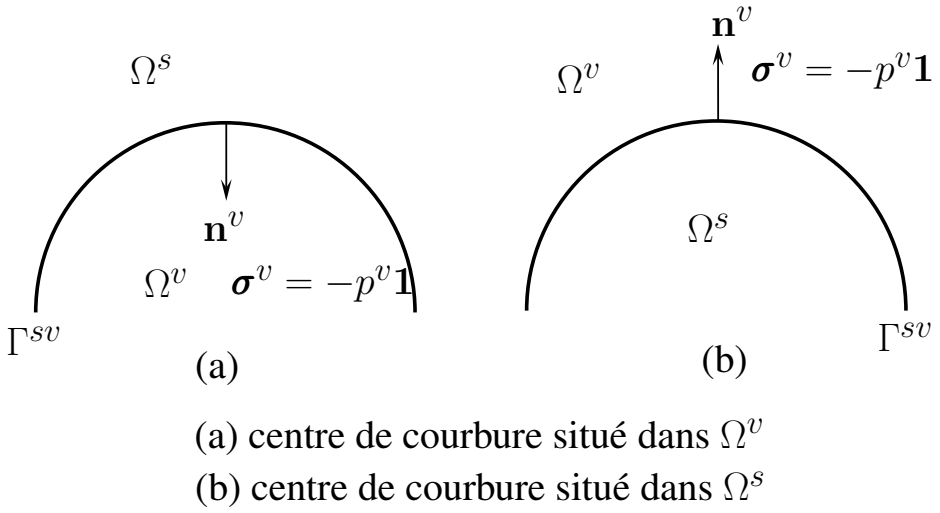


Fig 4.3 – Influence du centre de courbure.

Alors que pour une interface solide-vapeur sphérique (Fig. 4.3), selon que le centre de courbure se situe à l'intérieur ou à l'extérieur du solide, nous avons :

— situation sur la Fig. 4.3-a :

$$\boldsymbol{\sigma}^s \cdot \mathbf{n}^v = -(p^v - \frac{2\gamma^{sv}}{R})\mathbf{n}^v \text{ sur } \Gamma^{sv}, \tag{4.3}$$

— situation sur la Fig. 4.3-b :

$$\boldsymbol{\sigma}^s \cdot \mathbf{n}^v = -(p^v + \frac{2\gamma^{sv}}{R})\mathbf{n}^v \text{ sur } \Gamma^{sv}, \tag{4.4}$$

avec $\boldsymbol{\sigma}^s$ étant la contrainte dans la phase solide. En effet, dans la situation précédente de l'interface solide-vapeur la tension de surface solide-vapeur engendre selon la convexité de l'interface une augmentation ou une réduction de la pression appliquée au solide. Dans la suite nous noterons par $\mathcal{C}$ la courbure locale signée, telle que :

$$\mathcal{C} = -(\mathbf{1}_T : \nabla \mathbf{n}^\alpha), \tag{4.5}$$

avec la normale $\mathbf{n}^\alpha$ à l'interface solide-fluide orientée vers le fluide et à l'interface liquide-vapeur, orientée vers la vapeur.

4.2.1.3 Moyenne des contraintes et des déformations

Nous sommes intéressés par l'analyse et la construction d'un comportement macroscopique d'un milieu en condition non saturée, tel que le gel de C-S-H. On entend ici par comportement macroscopique, des équations constitutives liant la contrainte macroscopique $\overline{\boldsymbol{\sigma}}$ et la variation de la porosité $\phi - \phi_0$ à la déformation macroscopique $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}$, la pression capillaire $p_c = p^v - p^l$, les tensions de surfaces $\gamma^{\alpha\beta}$ et la pression de vapeur p^v pendant un processus de séchage et/ou humidification. Avant toute chose, il est important de correctement définir ces quantités macroscopiques en fonction des quantités microscopiques. Étant donné que nous faisons l'hypothèse d'être à l'équilibre thermodynamique, les phases fluides, liquide et vapeur ont des pressions homogènes (chapitre 3). Ainsi, il n'y a aucune distinction entre les pressions microscopiques du liquide et de la vapeur et les pressions macroscopiques intrinsèques de ces phases. Il en est de même pour les tensions de surfaces qui sont aussi réparties de façon homogène sur chacune des interfaces concernées,

$$\overline{p}^l = \frac{1}{|\Omega^l|}\int_{\Omega^l} p^l(\mathbf{x})dv = p^l, \tag{4.6}$$

$$\overline{p}^v = \frac{1}{|\Omega^l|}\int_{\Omega^l} p^v(\mathbf{x})dv = p^v, \tag{4.7}$$

$$\overline{\gamma}^{\alpha\beta} = \frac{1}{|\Gamma^{\alpha\beta}|}\int_{\Gamma^{\alpha\beta}} \gamma^{\alpha\beta}(\mathbf{x})ds = \gamma^{\alpha\beta}. \tag{4.8}$$

La déformation macroscopique est entièrement définie par la moyenne suivante,

$$\overline{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{(1-\phi_0)}{|\Omega^s|}\int_{\Omega^s} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})dv + \frac{\phi_0}{2|\Omega^f|}\int_{\partial\Omega^f\cup\Gamma^{sf}} \left[\mathbf{u}(\mathbf{x})\otimes\mathbf{n}^\alpha(\mathbf{x}) + \mathbf{n}^\alpha(\mathbf{x})\otimes\mathbf{u}(\mathbf{x})\right] ds, \tag{4.9}$$

où ϕ_0 est la porosité initiale de la microstructure poreuse, $\mathbf{u}$ est le vecteur déplacement et $\mathbf{n}^\alpha, \alpha = s, ext$ la normale orientée vers le solide à l'interface Γ^{sf} et vers l'extérieur sur $\partial\Omega^f$. La déformation de l'espace poreux a été prise en compte dans la déformation macroscopique, telle que :

$$\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}^f = \frac{1}{2|\Omega^f|}\int_{\partial\Omega^f\cup\Gamma^{sf}} \left[\mathbf{u}(\mathbf{x})\otimes\mathbf{n}^\alpha(\mathbf{x}) + \mathbf{n}^\alpha(\mathbf{x})\otimes\mathbf{u}(\mathbf{x})\right] ds, \tag{4.10}$$

de sorte que la variation de l'espace poreux soit définie par,

$$\phi - \phi_0 = \phi_0 \mathrm{Tr}(\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}^f). \tag{4.11}$$

En présence des contraintes de membrane induites par les tensions de surface $\gamma^{\alpha\beta}$ sur les interfaces $\Gamma^{\alpha\beta}$, il est plus délicat de définir la contrainte macroscopique. Néanmoins, on montre que dans le cas d'une interface fermée, la contrainte macroscopique est définie par (Annexe C.1) :

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{(1-\phi_0)}{|\Omega^s|}\int_{\Omega^s}\boldsymbol{\sigma}^s(\mathbf{x})dv + S_r\phi_0 p^l + (1-S_r)\phi_0 p^v + \frac{1}{|\Omega|}\sum_{\alpha\beta}\gamma^{\alpha\beta}\int_{\Gamma^{\alpha\beta}}\mathbf{1}_T(\mathbf{x})ds. \tag{4.12}$$

4.2.1.4 Équations d'équilibre d'une microstructure poreuse en condition non saturée

L'analyse et l'étude des quantités macroscopiques définies à la section précédentes, passe par la résolution de l'équilibre local et la connaissance des quantités locales. Pour ce faire nous décrivons dans cette section le problème d'équilibre locale d'une microstructure poreuse pour une déformation macroscopique $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}$ imposée, et ce en condition non saturée. Lorsqu'on traite des microstructures poreuses en condition de saturation partielle, il est nécessaire de définir un état de référence.

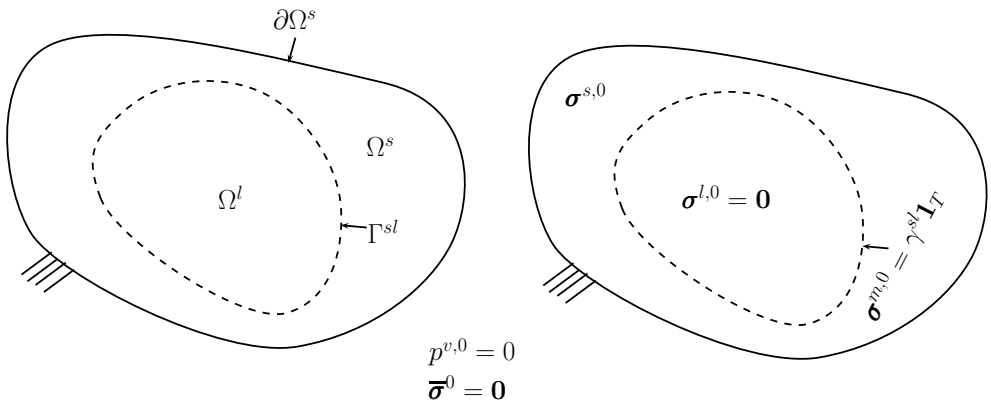


Fig 4.4 – Etat de référence complètement saturé en liquide à pression nulle $p^l = p^v = 0$ et en présence de la tension de surface liquide-vapeur γ^{sl} sur toute l'interface solide-fluide Γ^{sf}.

Nous choisissons un état de référence complètement saturé en liquide et caractérisé par la condition macroscopique $\overline{\boldsymbol{\sigma}}^0 = p^{l,0} = p^{v,0} = 0$. Á l'état de référence, il existe localement une contrainte non nulle dans la phase solide $\boldsymbol{\sigma}^{s,0}$ équilibrant la contrainte de membrane $\boldsymbol{\sigma}^{m,0} = \gamma^{sl}\mathbf{1}_T$ sur toute l'interface solide-fluide (Fig. 4.4),

$$\boldsymbol{\sigma}^{s,0}\cdot\mathbf{n}^l = \gamma^{sl}\mathcal{C}\mathbf{n}^l. \tag{4.13}$$

En considérant, la définition de la contrainte moyenne Eq. (4.12) et la condition macroscopique $\overline{\boldsymbol{\sigma}}^0 = p^l = p^v = 0$ à l'état de référence, nous avons :

$$\frac{(1-\phi_0)}{|\Omega^s|}\int_{\Omega^s}\boldsymbol{\sigma}^{s,0}(\mathbf{x})dv + \frac{1}{|\Omega|}\gamma^{sl}\int_{\Gamma^{sf}}\mathbf{1}_T(\mathbf{x})ds = 0, \tag{4.14}$$

où l'exposant ^{0} rappelle que ce sont des quantités définies à l'état de référence. En condition non saturée, la condition d'équilibre local à satisfaire est donnée par,

$$\nabla \cdot d\boldsymbol{\sigma}^{\alpha} = \mathbf{0} \text{ dans } \Omega^{\alpha} \ \alpha = s, l, v, \tag{4.15}$$

où $\nabla \cdot ()$ et $d\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}$ sont l'opérateur divergence et l'incrément de contrainte dans le domaine Ω^{α} par rapport à l'état de référence, respectivement. Dans l'équation au-dessus, nous donnons l'équilibre des phases volumiques, solide, liquide et vapeur avec,

$$d\boldsymbol{\sigma}^{\alpha} = -p^{\alpha}\mathbf{1} \text{ dans } \Omega^{\alpha} \ \alpha = l, v, \tag{4.16}$$

dans les phases liquide et vapeur. La loi de comportement du solide dans le cas du C-S-H est viscoélastique linéaire vieillissante, et est donnée dans le cas du fluage par :

$$d\boldsymbol{\varepsilon}^{s}(t) = \int_{t'=-\infty}^{t} \mathbb{F}(t, t') : \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{s}(t')dt' \text{ dans } \Omega^{s}, \tag{4.17}$$

où $d\boldsymbol{\varepsilon}^{s}$ et $\mathbb{F}$ sont respectivement, l'incrément de déformation par rapport à la configuration de référence et la complaisance de fluage linéaire vieillissante de la phase solide. Le modèle de complaisance de fluage linéaire vieillissante proposé pour modéliser les mécanismes élémentaires de fluage et de retrait des bétons sera détaillé dans la section suivante.

L'équilibre mécanique des interfaces solide-liquide Γ^{sl}, solide-vapeur Γ^{sv} et liquide-vapeur Γ^{lv} entre les phases volumiques est donnée par,

$$(d\boldsymbol{\sigma}^{\alpha} - d\boldsymbol{\sigma}^{\beta}) \cdot \mathbf{n}^{\beta} = d\gamma^{\alpha\beta}\mathcal{C}\mathbf{n}^{\beta} \text{ sur } \Gamma^{\alpha\beta}, \tag{4.18}$$

où $\mathbf{n}^{\beta}$ est la normale à l'interface $\Gamma^{\alpha\beta}$ orientée vers Ω^{β}, $\mathcal{C}$ est la courbure locale signée calculée à partir de l'Eq. (4.5) et de $\mathbf{n}^{\beta}$, et $d\gamma^{\alpha\beta}$ est l'incrément de tension de surface par rapport à la situation de référence. Dans notre modèle, nous négligeons les effets de dépendance des tensions de surface solide-liquide γ^{sl} et solide-vapeur γ^{sv} par rapport au degré de saturation. Cette dépendance est à prendre en compte si nous souhaitons modéliser les effets de l'épaisseur des couches adsorbées sur ces incréments de tensions de surface. Ainsi, l'incrément de tension de surface $d\gamma^{\alpha\beta}$ est défini par,

$$d\gamma^{sv} = \gamma^{sv} - \gamma^{sl} = \gamma^{lv}cos(\theta) \text{ sur } \Gamma^{sv}, \tag{4.19}$$

$$d\gamma^{sl} = 0 \text{ sur } \Gamma^{sl}, \tag{4.20}$$

$$d\gamma^{lv} = \gamma^{lv} \text{ sur } \Gamma^{lv}, \tag{4.21}$$

où l'Eq. (**??**) de Young définissant l'angle de contact θ a été utilisée. Enfin, nous faisons une hypothèse d'un milieu poreux non saturé périodique auquel cas nous avons,

$$d\mathbf{u} = d\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{x} + d\mathbf{u}^{\#}(d\mathbf{u}^{\#} \text{ périodique }) \text{ sur } \partial\Omega. \tag{4.22}$$

où $d\mathbf{u}$ est l'incrément de déplacement par rapport à la situation de référence. La condition aux limites périodiques est valable pour les deux domaines, fluide et solide. Pour être en mesure

de résoudre numériquement un tel problème, nous négligeons les effets de la déformation du squellette solide sur l'équilibre thermodynamique des phases liquide et vapeur. A partir de cette dernière hypothèse, nous pouvons adopter une stratégie de couplage faible où nous résolvons d'abord l'équilibre thermodynamique du fluide diphasique et ce, à l'échelle du réseau poreux (chapitre 3) puis nous pouvons obtenir ensuite la réponse mécanique du squelette solide. L'équilibre thermodynamique des phases liquide et vapeur est résolu par le modèle SC LBM présenté au chapitre 3. Alors, pour obtenir l'équilibre total de notre système à trois phases, il ne reste plus qu'à résoudre l'équilibre local (Fig. 4.5) de la phase solide donné par :

$$\begin{cases} \nabla \cdot d\boldsymbol{\sigma}^s = \mathbf{0}, \text{ dans } \Omega^s, \\ d\boldsymbol{\varepsilon}^s(t) = \int_{t'=-\infty}^{t} \mathbb{F}(t,t') : \dot{\boldsymbol{\sigma}}^s(t')dt' \text{ dans } \Omega^s, \\ d\boldsymbol{\sigma}^s \cdot \mathbf{n}^l = -(p^v - p_c)\mathbf{n}^l \text{ sur } \Gamma^{sl}, \\ d\boldsymbol{\sigma}^s \cdot \mathbf{n}^v = -(p^v - \gamma^{lv} cos(\theta)\mathcal{C})\mathbf{n}^v \text{ sur } \Gamma^{sv}, \\ d\mathbf{u}^s = d\overline{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{x} + d\mathbf{u}^{\#} (d\mathbf{u}^{\#} \text{ périodique}) \text{ sur } \partial\Omega^s, \end{cases} \tag{4.23}$$

où nous négligeons par soucis de simplification la force d'arrachement induit par la tension de surface γ^{lv} sur la ligne de contact.

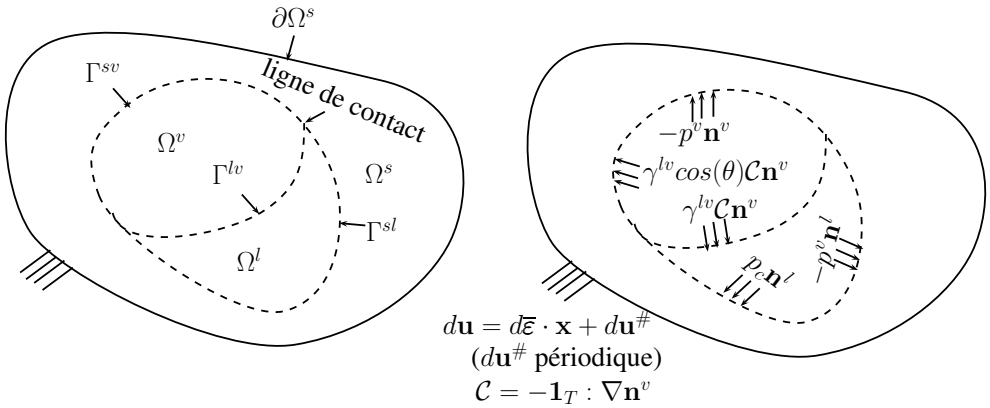


Fig 4.5 – Chargement hydrique en condition non saturée et équilibre du squelette solide.

La résolution des problèmes d'équilibre du fluide disphasique et de la phase solide nous donne le champ de contrainte local complet dans notre milieu non saturé et comme la loi de comportement du solide est linéaire nous pouvons utiliser l'Eq. (4.12) à chaque instant pour obtenir l'histoire de la contrainte macroscopique en fonction de la déformation macroscopique imposée et de l'état de saturation en liquide. L'analyse de ces quantités nous permettra sans doute de mieux comprendre les couplages qu'il y a entre fluage et retrait à l'échelle du gel de C-S-H.

4.2.2 Modéle de comportement de la phase solide du gel C-S-H

Le fluage du C-S-H est la principale source du fluage des bétons. Les autres phases de la microstructure, incluant les granulats, la portlandite et les grains de ciment non hydratés ,

ont un effet de restriction élastique de la déformation de fluage du gel de C-S-H. Puisque la pâte de ciment occupe jusqu'à 40% du volume des bétons ordinaires et que 50% du volume de la pâte de ciment est occupé par le gel de C-S-H, l'amplitude du fluage de la phase solide de C-S-H peut être espérée considérablement plus grand que celui observé à l'échelle du béton ou de la pâte de ciment. Comme les restrictions élastiques ne changent pas significativement la cinétique temporelle des courbes de fluage, les complaisances de fluage du C-S-H et du béton peuvent espérer être similaires. Ainsi, nous adoptons la théorie de microprécontrainte-solidification de (Bazant and Prasannan, 1989a; Bazant et al., 1997a) noté MPS. La théorie MPS, nous permet dans un formalisme d'un modèle de comportement isotrope, viscoélastique, linéaire et vieillissant, de modéliser les mécanismes élémentaires pertinents à l'échelle du gel de C-S-H. Il s'agit :

— du mécanisme de glissement à l'échelle des micropores ($< 2.6nm$) à l'origine du fluage du gel de C-S-H,
— des mécanismes de solidification et de relaxation de la microprécontrainte pour modéliser la réduction du fluage du gel de C-S-H avec l'accroissement de son âge,
— du mécanisme de variation de la microprécontrainte avec l'humidité des mésopores et macropores adjacents,
— du mécanisme de réduction de la solidification, du processus de glissement de cisaillement et de la relaxation de la microprécontrainte avec la réduction de l'humidité.

Pour une discussion plus complète sur les mécanismes se référer au chapitre 1. Dans la suite de la description du modèle de comportement proposé dans cette thèse pour simuler les quatre mécanismes précédents jugés pertinents pour la phase solide du gel de C-S-H, nous omettons dans un soucis de simplification de l'écriture l'exposant ^{s} faisant référence à la phase solide dans une microstructure poreuse non saturée.

4.2.2.1 Viscoélasticité linéaire vieillissante isotrope et l'hypothèse du coefficient de Poisson en fluage constant

Pour toute histoire de contrainte, le comportement viscoélastique linéaire 3-D peut être écrit en utilisant la complaisance de fluage $\mathbb{F}$:

$$d\boldsymbol{\varepsilon}(t) = \int_{t'=-\infty}^{t} \mathbb{F}(t,t') : \dot{\boldsymbol{\sigma}}(t')dt', \tag{4.24}$$

Les variables temps, t et t' sont respectivement les instants associés à l'évaluation de la déformation et à l'histoire de la contrainte. Sous l'hypothèse d'isotropie de notre matériau, le comportement peut maintenant être décrit par deux fonctions scalaires. Une manière commode d'écrire le comportement isotrope est de projeter l'Eq. (4.24) sur la base $\mathbb{J}$, $\mathbb{K}$ des tenseurs d'ordre 4 d'isotropie :

$$\mathbb{F}(t,t') = \frac{1}{3}F_v(t,t')\mathbb{J} + \frac{1}{2}F_d(t,t')\mathbb{K}, \tag{4.25}$$

introduisant les complaisances de fluage F_v volumique et F_d déviatorique. Le coefficient de Poisson ν_F en fluage (Charpin and Sanahuja, 2017) est alors défini par :

$$\nu_F(t,t') = \frac{3F_d(t,t') - 2F_v(t,t')}{2[3F_d(t,t') + F_v(t,t')]} \tag{4.26}$$

Sous l'hypothèse de coefficient de Poisson constant en fluage du béton que nous adoptons aussi pour la phase solide du gel de C-S-H, nous avons :

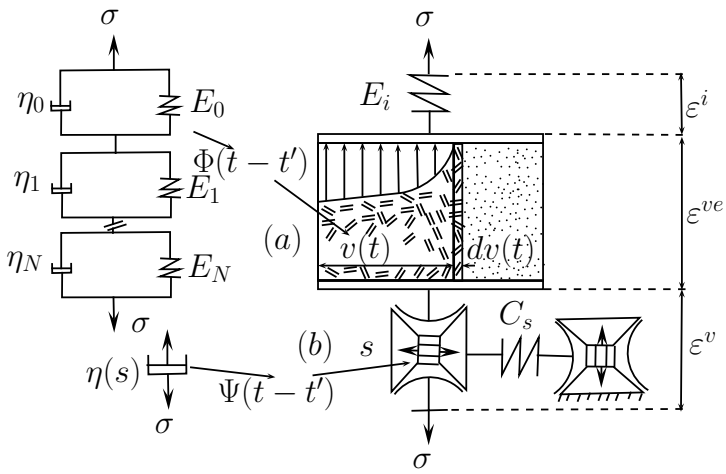
$$F_v(t,t') = 3(1-2\nu)F(t,t'), \tag{4.27}$$

$$F_d(t,t') = 2(1+\nu)F(t,t'), \tag{4.28}$$

où le coefficient de Poisson en fluage est égal au coefficient de Poisson élastique $\nu_F(t,t') = \nu$. Nous avons finalement introduit la complaisance de fluage 1-D $F(t,t')$ que nous allons décrire dans la suite.

4.2.2.2 Théorie de microprécontrainte-solidification (MPS)

La description de la théorie MPS se fera en 1-D, au travers de la complaisance de fluage $F(t,t')$ et la généralisation du modèle au cas 3-D peut être obtenue par les Eq. (4.27) et (4.28).



(a) mécanisme de solidification
(b) mécanisme de relaxation de la microprécontrainte s

Fig 4.6 – Théorie de la microprécontrainte-solidification (MPS).

Dans la théorie MPS, l'incrément de déformation totale peut être décomposé comme suite Fig. 4.6,

$$d\varepsilon = d\varepsilon^i + d\varepsilon^{ve} + d\varepsilon^v, \tag{4.29}$$

avec, $d\varepsilon^i$ l'incrément de déformation élastique initiale, $d\varepsilon^{ve}$ l'incrément de déformation viscoélastique et $d\varepsilon^v$ l'incrément de déformation purement visqueuse. On rappelle que les incréments sont définis par rapport à la situation de référence. La partie initiale de la déformation élastique est donnée par,

$$d\varepsilon^i = \frac{d\sigma}{E_i}, \tag{4.30}$$

où le module de Young E_i de l'élasticité initiale, est une constante de la phase solide du gel de C-S-H, et est défini comme un module asymptotique obtenu pour un chargement d'une très courte durée, inférieur à $1\mu s$. Alors que, la partie dépendante du temps de l'élasticité du matériau est incluse dans le fluage court terme, représenté par l'incrément de déformation viscoélastique $d\varepsilon^{ve}$. Dans ce modèle, la double cinétique, courte et long terme du fluage des matériaux cimentaires évoquée au chapitre 1, est modélisée par $d\varepsilon^{ve}$ pour le court terme et $d\varepsilon^v$ pour le long terme.

Le modèle présente la réduction de la déformation du fluage avec l'âge du matériau comme une conséquence de l'accroissement de la fraction volumique $v(t)$ des particules de C-S-H d'une part et par la rélaxation de la microprécontrainte $s(t)$ avec le temps. Analysons d'abord l'effet de $v(t)$ qui est associé à l'incrément de déformation $d\varepsilon^{ve}$. Le volume élémentaire, $dv(t)$, qui s'est solidifié à l'instant, t est supposé se déposer sous forme d'une couche parallèle sur la surface du matériau précédemment solidifié, comme illustré sur la Fig. 4.6 (mécanisme a). Moyennant l'hypothèse que cette nouvelle couche soit libre de contrainte à l'instant t, (Bazant and Prasannan, 1989a) montre que,

$$d\varepsilon^{ve}(t) = \frac{1}{v(t)} \int_{t'=-\infty}^{t} \Phi(t-t')\dot{\sigma}(t')dt', \tag{4.31}$$

où $\Phi(t-t')$ et $v(t)$ sont respectivement, la complaisance de fluage non vieillissante (microscopique) et la fraction volumique apparente des particules de C-S-H. Les effets de réduction des processus de solidification (hydratation) et de fluage à faible humidité sont modélisés par la technique des temps équivalents :

- te, est le temps équivalent ou la période d'hydratation (solidification) équivalente,
- t_r, est le temps réduit, caractérisant la réduction du processus de glissement de cisaillement à faible humidité,

définis par :

$$dt_e = \Psi_e(h)dt, \tag{4.32}$$

et,

$$dt_r = \Psi_r(h)dt, \tag{4.33}$$

tels que,

$$\Psi_e(h) = \frac{1}{1+(\alpha_e(1-h))^4}, \tag{4.34}$$

et

$$\Psi_r(h) = \alpha_r + (1 - \alpha_r)h^2, \tag{4.35}$$

où h est l'humidité, α_e et α_r sont des paramètres empiriques. Ainsi, nous avons la partie visco-élastique de la théorie MPS qui est finalement donnée par,

$$d\varepsilon^{ve}(t) = \frac{1}{v[t_e(t)]} \int_{t'=-\infty}^{t} \Phi[t_r(t) - t_r(t')]\dot{\sigma}(t')dt', \tag{4.36}$$

Selon le modèle de (Bazant and Prasannan, 1989a), la fraction volumique apparente s'obtient par :

$$\frac{1}{v(t)} = (\lambda_0/t)^m + \alpha, \tag{4.37}$$

tandis que le fluage non vieillissant court terme des C-S-H est donné par :

$$\Phi(t - t') = q_2 ln\left[1 + \xi^n\right], \; \xi = \frac{(t - t')}{\lambda_0}, \tag{4.38}$$

avec λ_0, m, q_2 et n des paramètres empiriques du matériau. Aussi, les effets de relaxation de la microprécontrainte avec le temps et avec l'humidité sont pris en compte dans le terme visqueux, tel que :

$$\dot{\varepsilon}^v(t) = \Psi_r(h)\frac{d\sigma}{\eta(s)}. \tag{4.39}$$

avec η est la viscosité apparente à long terme des particules de C-S-H. Ici, $\Psi_r(h)$ est introduit pour prendre en compte aussi sur la partie long terme du modèle, l'effet de la réduction du processus de fluage à faible humidité. Selon (Bazant et al., 1997a), la viscosité η est une fonction décroissante de la microprécontrainte s, telle que :

$$\frac{1}{\eta(s)} = c_0 q_4 (p - 1)s^{p-1}, \tag{4.40}$$

avec $p > 1$, c_0 et q_4 les constantes empiriques du matériau. Alors que, la relaxation de la microprécontrainte s est donnée par,

$$\dot{s}(t) + c_0\Psi_s[h(t)]s^p(t) = c_1\left|\frac{\dot{h}(t)}{h(t)}\right| \tag{4.41}$$

où Ψ_s permet de définir un nouveau temps équivalent $dt_s = \Psi_s(h)dt$, caractérisant la décélération de la relaxation de la microprécontrainte à faible humidité. La fonction Ψ_s, est définie de la même manière que Ψ_r (Eq. (4.35)), mais avec un paramètre empirique différent α_s.

De tout ce qui précède nous aboutissons à :

$$F(t, t') = q_1 + \int_0^t \frac{\dot{\Phi}[t_r(\tau) - t_r(t')]}{v[t_e(\tau)]} + \frac{\Psi_r(\tau)}{\eta(s)}d\tau, \tag{4.42}$$

avec $q_1 = \frac{1}{E_i}$.

4.2.2.3 Spèctre de retard continu de la fonction de fluage non vieillissante $\Phi(t-t')$

Bien que la forme empirique de la fonction de fluage non vieillissante $\Phi(t-t')$ soit déjà définie par l'Eq. (4.38), il est commode pour son intrégration numérique de l'approcher par une série de Dirichlet ou chaîne de Kelvin généralisée (voir Fig. 4.6) :

$$\phi(t-t') \simeq q_2 \sum_{\alpha=0}^{N} A_\alpha \left[1 - e^{-\frac{(t-t')}{\tau_\alpha}}\right], \tag{4.43}$$

où les modules $E_\alpha = \frac{1}{q_2 A_\alpha}$ et $\tau_\alpha = \frac{\eta_\alpha}{E_\alpha}$ sont les modules et les temps caractéristiques de la chaîne de Kelvin Généralisée. Le diagramme des coefficients A_α en fonction des temps caractéristiques τ_α, est appelé spèctre discret des temps caractéristiques du matériau. Il est avantageux de concevoir une généralisation de l'Eq. (4.43) qui représente le spèctre continu des temps caractéristiques du matériau (Bazant and Xi, 1995; Jirasek and Havlasek, 2014). Il s'agit d'une serie infinie de Dirichelet avec des temps caractéristiques infiniment proche les uns des autres. Selon cette généralisation, on a le cas limite de l'Eq. (4.43) :

$$\Phi(t-t') = q_2 \int_{\tau=0}^{+\infty} L(\tau) \left[1 - e^{-\frac{(t-t')}{\tau}}\right] d(ln\tau), \tag{4.44}$$

où $L(\tau)$ est le spèctre continu des temps caractéristiques. Si la fonction $L(\tau)$ est connue et les temps caractéristiques discret τ_α sont astucieusement choisis, la détermination des coefficients A_α est systématique.

Une approximation précise du spèctre continu peut être obtenue analytiquement, en exploitant les formules de Widder (Widder, 1941, 1971) permettant de faire l'inversion de la transformée de Laplace. Il peut être montré (Jirasek and Havlasek, 2014) que l'approximation d'ordre k de L :

$$L_k(\tau) = -\frac{(-k\tau)^k}{(k-1)!}\Phi^{(k)}(k\tau), \tag{4.45}$$

converge vers le spèctre continu, c'est à dire,

$$L(\tau) = \lim_{k\to+\infty} L_k(\tau), \tag{4.46}$$

où $\Phi^{(k)}$ est la dérivée d'ordre k de Φ. Une approximation du spèctre continu à l'ordre 3 nous donne une bonne précision de la complaisance de fluage $\Phi(t-t')$ (Eq. (4.38) avec $\lambda_0 = 1$) :

$$L_3(\tau) = \frac{27}{3}\tau^3\Phi(3\tau) = \frac{n(n-1)(n-2)(3\tau)^n}{2[1+(3\tau)^n]} - \frac{3n^2(n-1)(3\tau)^{2n}}{2[1+(3\tau)^n]^2} + \frac{n^3(3\tau)^{3n}}{[1+(3\tau)^n]^3}. \tag{4.47}$$

A partir du spèctre continu nous pouvons identifier les coefficients A_α pour un choix astucieux des τ_α du spèctre discret de Φ. Pour atteindre un bon compromis entre efficience et précision, les temps caractéristiques discrets τ_α sont souvent choisis de sorte qu'ils forment une suite géométrique :

$$\tau_\alpha = 10^{\alpha-1}\tau_1 \ , \alpha = 2, \cdots N, \tag{4.48}$$

Chacun de ces temps τ_α est représentatif d'un ordre de magnitude, couvrant l'intervalle de $\tau_\alpha/\sqrt{10}$ à $\tau_\alpha\sqrt{10}$. Il est ainsi naturel de choisir $\tau_0 = \tau_1/\sqrt{10}$ et de déterminer les A_α par :

$$A_0 = \int_{\tau=0}^{\tau_0} L(\tau) d(\ln\tau), \tag{4.49}$$

$$A_\alpha = (ln10)L(\tau_\alpha). \tag{4.50}$$

4.3 Implémentation numérique

Les simulations numériques de la réponse mécanique de la phase solide sont réalisées avec Salomé_méca et Code_Aster (EDF, 1989, 2001). En effet, nous réalisons le maillage périodique de la phase solide sous Salomé_méca et les calculs par éléments finis sont ensuite effectués sous Code_Aster. Afin d'être en mesure de correctement imposer les efforts hydriques à l'interface solide-fluide, nous avons développé un script Python nous permettant de détecter sur le maillage du squelette solide les interfaces solide-liquide et solide-vapeur en fonction d'une répartition des phases liquide et vapeur dans le réseau poreux. Ensuite nous avons développé un autre script Python calculant le champ de pression à imposer sur chacune des portions de l'interface solide-fluide, en ajoutant à la pression de la phase fluide correspondante la surpression (> 0) ou depression (< 0) induite par la tension de surface et la courbure locale signée. Aussi, sous Code_Aster la condition aux limites périodiques est imposée en prescrivant une condition aux limites du type relation linéaire entre les groupes de nœuds des faces, arrêtes et sommets opposés précédemment identifiés sous Salomé_méca. Par ailleurs, un script Python réalisant la moyenne de la contrainte de membrane dans le but d'effectuer le calcul de la moyenne de la contrainte sur l'ensemble du domaine Ω est aussi présenté. Enfin, le modèle de comportement décrit en section 4.2.2 est implémenté sous Mfront (CEA, 2012) et utilisé comme loi de comportement dans nos simulations viscoélastiques futures sous Code_Aster. Cette section a pour objectif de présenter en détail ces différents algorithmes développés et implémentés dans le cadre de cette thèse au MSME.

4.3.1 Conditions aux limites périodiques

Sous Code_Aster, pour respecter les conditions aux limites périodiques Eq.(4.22) imposées sur le contour extérieur de la phase solide $\partial\Omega^s$, une méthode non triviale basée sur les techniques de minimisation sous contrainte est utilisée. Pour sa description, nous faisons l'hypothèse d'une loi de comportement linéaire élastique entre la contrainte et la déformation nous conduisant à ce système d'équation discret à résoudre :

$$[\mathbf{K}][\mathbf{u}] = [\mathbf{f}], \tag{4.51}$$

où $[\mathbf{K}]$, $[\mathbf{u}]$ et $[\mathbf{f}]$ sont respectivement la matrice de rigidité élastique, le vecteur déplacement et le vecteur de force. Considérons deux noeuds α et β sur les faces, arrêtes ou sommets opposées de la boîte, nous avons à partir de la condition aux limite de périodicité :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}^\alpha) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{x}^\alpha + \mathbf{u}^\#(\mathbf{x}^\alpha), \tag{4.52}$$

et

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}^\beta) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{x}^\beta + \mathbf{u}^\#(\mathbf{x}^\beta). \tag{4.53}$$

Comme $\mathbf{u}^\#$ est une fonction périodique sur $\partial\Omega^s$ nous avons $\mathbf{u}^\#(\mathbf{x}^\alpha) = \mathbf{u}^\#(\mathbf{x}^\beta)$. La condition aux limites de périodicité peut alors être réécrite sous la forme :

$$u_i^\beta - u_i^\beta = \bar{\varepsilon}_{ij}(x_j^\alpha - x_j^\beta) = r_i^{\alpha\beta}. \tag{4.54}$$

L'écriture de ces conditions pour tous les couples de nœuds sur les faces, arrêtes et sommets opposés de la boîte donne des équations additionnelles au système discret (Eq. 4.51), obtenu par la discrétisation aux éléments finis. Dans la suite, nous adoptons la méthode des multiplicateurs de Lagrange pour prendre en compte les conditions données par l'Eq. (4.54).

Soit,

$$c_i = L_{ij}u_j - r_i^{\alpha\beta} = 0, \tag{4.55}$$

où $[\mathbf{L}]$ est la matrice reliant les indices des couples de nœuds à l'ensemble des indices. Le problème de minimisation sous contrainte est donné par :

$$\underset{c_i=0, i=1,\cdots,n_c}{\overset{\text{Inf}}{\mathbf{u}}} \frac{1}{2}[\mathbf{u}]^T[\mathbf{K}][\mathbf{u}] - [\mathbf{f}][\mathbf{u}], \tag{4.56}$$

où n_c est le nombre de contraintes de périodicité. Introduisons les multiplicateurs de Lagrange $\boldsymbol{\lambda}$ associés aux contraintes de périodicité. Le Lagrangien résultant s'écrit comme :

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}[\mathbf{u}]^T[\mathbf{K}][\mathbf{u}] - [\mathbf{f}][\mathbf{u}] + [\boldsymbol{\lambda}]^T([\mathbf{L}][\mathbf{u}] - [\mathbf{r}]). \tag{4.57}$$

Le problème de minimisation sans contrainte qui en résulte est donnée par :

$$\underset{\boldsymbol{\lambda}}{\text{Sup}}\ \underset{\mathbf{u}}{\text{Inf}}\, \mathscr{L}. \tag{4.58}$$

La stationarité de $\mathscr{L}$ est trouvée par :

$$\begin{cases} D_{\delta\mathbf{u}}\mathscr{L} = 0, \\ D_{\delta\boldsymbol{\lambda}}\mathscr{L} = 0, \end{cases} \tag{4.59}$$

où $D_{\delta\mathbf{u}}(\cdot)$ est la dérivée directionnelle. Nous obtenons :

$$\begin{cases} [\delta\mathbf{u}]^T([\mathbf{K}][\mathbf{u}]) - [\mathbf{f}][\delta\mathbf{u}] + [\boldsymbol{\lambda}]^T[\mathbf{L}][\delta\mathbf{u}] = 0, \\ [\boldsymbol{\lambda}]^T[\mathbf{L}][\mathbf{u}] = [\delta\boldsymbol{\lambda}]^T[\mathbf{r}]. \end{cases} \tag{4.60}$$

Comme le choix de $\delta\mathbf{u}$ et de $\delta\boldsymbol{\lambda}$ est arbitraire nous obtenons le système linéaire suivant :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{L}^T \\ \mathbf{L} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{r} \end{bmatrix}, \tag{4.61}$$

où chaque ligne de $\mathbf{L}$ est de la forme $[0 \cdots 1 \cdots 0 \cdots -1 \cdots 0]$, où 1 et -1 sont respectivement situés sur la $i^{\text{ième}}$ et la $j^{\text{ième}}$ colonne, définis comme les indices des dégrés de liberté dans le vecteur global des inconnus $[\mathbf{u}]$.

En 3-D, les nœuds situés sur les arrêtes et les sommets de la boîte requièrent un traitement particulier pour éviter un processus de minimisation surcontraint. Pour ce faire, nous avons adopté une condition aux limites de Dirichlet $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{x}$ pour les noeuds des sommets. Pour les arrêtes, l'appareillage des nœuds opposés (Fig. 4.7) est comme suit :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}^A) - \mathbf{u}(\mathbf{x}^C) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot (\mathbf{x}^A - \mathbf{x}^C), \tag{4.62}$$

et

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}^B) - \mathbf{u}(\mathbf{x}^D) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot (\mathbf{x}^B - \mathbf{x}^D), \tag{4.63}$$

où $\mathbf{x}^A$ et $\mathbf{x}^C$ sont les nœuds diamétralement opposés sur A et C. Il en est de même pour les nœuds des arrêtes B et D.

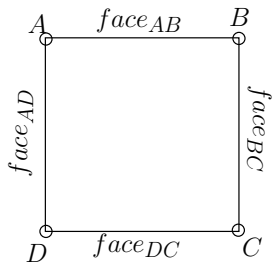


Fig 4.7 – Vue de haut de la boîte de calcul : appareillage des nœuds opposés des arrêtes en 3-D.

Enfin, en ce qui concerne les faces définies au sens de la Fig. 4.7, pour chaque paire de nœuds opposés nous avons une seule contrainte de périodicité. Cette méthode de construction de l'appareillage des nœuds opposés nous assure un système discret à résoudre avec autant d'équation que d'inconnues y compris les multiplicateurs de Lagrange associés à chacune des contraintes de périodicité rajoutée.

4.3.2 Algorithmes de détection des interfaces, de calcul de la courbure locale signée et de la moyenne de contrainte de membrane

A partir du champ de densité de la phase fluide à l'équilibre thermodynamique obtenu par le modèle SC LBM décrit au chapitre 3, nous devons segmenter le maillage de l'interface solide-fluide en deux parties, à savoir la partie correspondante à l'interface solide-vapeur Γ^{sv} et celle correspondante à l'interface solide-liquide Γ^{sl}. Pour ce faire, nous avons développé et implémenté l'algorithme donné en Fig. 4.8. Dans cet algorithme, le paramètre d'entrée δ_{lim}

représente l'épaisseur seuil de l'interface (Fig. 4.9), c'est à dire, tous les élements du maillage de l'interface solide-fluide Γ^{sf} pour lesquels l'épaisseur locale de l'interface est inférieure ou égale à cette limite $\delta \leq \delta_{lim}$ constituent le maillage de l'interface solide-vapeur Γ^{sv}, tandis que les mailles restantes forment le maillage de l'interface solide-liquide Γ^{sl}.

ENTRÉES. Seuil de l'épaisseur de film δ_{lim}, champ de densité $\rho(\mathbf{x})$ dans Ω^f, maillage de l'interface solide-fluide Γ^{sf}

(1) Détection des voxels dans le liquide Ω^l et ceux qui sont dans la vapeur Ω^v en utilisant la densité moyenne $\rho_m = \frac{\rho^l+\rho^v}{2}$

(2) Calcul de la distance minimale $\mathcal{D}_{min}(\mathbf{x})$ par rapport au domaine occupé par la vapeur de chaque voxel dans $\Omega^s \cup \Omega^l$

(3) Calcul de la coordonnée moyenne de Gauss $\mathbf{x}_g$ pour chaque element de l'interface solide-fluide

(4) Projection de la distance minimale à la vapeur sur le maillage de l'interface solide-fluide $\mathcal{D}_{min}(\mathbf{x}_g)$

(5) Chaque élément du maillage de Γ^{sf} avec $\mathcal{D}_{min}(\mathbf{x}_g) \leq \delta_{lim}$ sont dans Γ^{sv} et les autres sont dans Γ^{sl}

SORTIES. Segmentation du maillage de l'interface Γ^{sf} en Γ^{sv} et Γ^{sl}

Fig 4.8 – Algorithme de segmentation du maillage de l'interface Solide-Fluide Γ^{sf}.

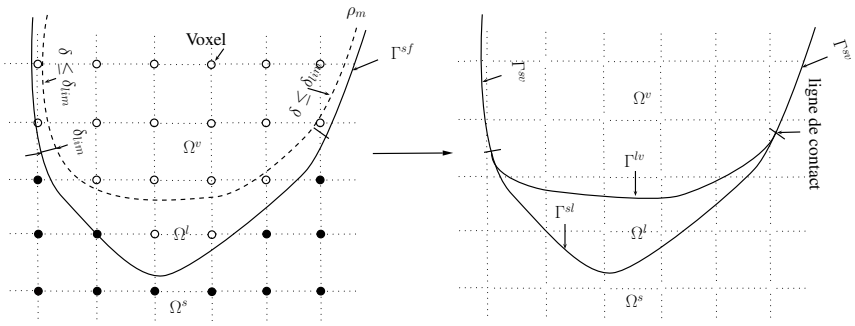


Fig 4.9 – Seuil δ_{lim} de segmentation du maillage de l'interface Solide-Fluide Γ^{sf}.

Le seuil de l'épaisseur de film à l'interface solide-fluide est choisi pour être égal à la moitié de l'épaisseur de l'interface donnée par le modèle SC LBM. Dans les modèles SC LBM les interfaces se forment par l'équilibre des forces d'interaction et nous ne sommes pas en mesure de fixer de façon explicite et indépendemment des autres paramètres sa valeur. L'épaisseur de l'interface ne dépend pas seulement de la température réduite et de $\tau = \frac{\Delta t}{\tau_c}$, mais dépend aussi de la formule de l'équation d'état (EOS) que nous simulons. Par exemple, les paramètres a, R et b dans l'EOS de (Carnahan and Starling, 1969) peuvent affecter l'épaisseur de l'interface et la stabilité numérique du modèle. Dans cette thèse, les paramètres choisis nous donnent approximativement $5\Delta x$ (Δx espacement de la grille SC LBM) pour la plupart des T/T_{crit} et

τ. Alors, nous avons choisi $\delta_{lim} = 2.5\Delta x$.

ENTRÉES. Normale aux éléments $\mathbf{n}_e$ de l'interface solide-fluide Γ^{sf}

(1) Vérification et ré-orientation de la normale aux éléments vers le domaine fluide Ω^f si necessaire

(2) Calcul de la surface $\mathcal{S}_e$ de chaque élément en utilisant les coordonnées des nœuds

(3) Calculer le tenseur d'identité tangentiel $\mathbf{1}_T = \mathbf{1} - \mathbf{n}_e \otimes \mathbf{n}_e$
(4) Pour chaque nœuds de l'interface solide-fluide, détecter l'ensemble des éléments qui le partagent $\mathcal{E}_i = \{e_1, e_2, \cdots, e_n\}$

(5) Extrapoler les normales des éléments aux nœuds en utilisant cette approximation $\mathbf{n}_i = \frac{1}{\sum_{e\in\mathcal{E}_i} \mathcal{S}_e} \sum_{e\in\mathcal{E}} \mathbf{n}_e \mathcal{S}_e$

(6) Calculer les dérivées $\mathbf{B}(\mathbf{x}_g)$ des fonctions de forme en chaque point de Gauss de l'élement de l'interface

(7) Calculer le gradient de la normal de l'élement en chaque points de Gauss $\nabla\mathbf{n}_e(\mathbf{x}_g) = \mathbf{B}(\mathbf{x}_g) \cdot (\mathbf{n}_1 \cdots \mathbf{n}_q)^T$, pour un élément à q nœuds
(8) Calculer la courbure locale signée $\mathcal{C}_e(\mathbf{x}_g) = -\mathbf{1}_T : \nabla\mathbf{n}_e(\mathbf{x}_g)$

SORTIES. Champ aux points de Gauss de l'interface solide-fluide Γ^{sf} de la courbure locale signée $\mathcal{C}_e(\mathbf{x}_g)$

Fig 4.10 – Algorithme de calcul du champ aux points de Gauss de l'interface solide-fluide Γ^{sf} de la courbure locale signée.

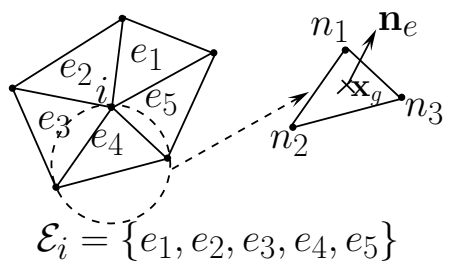


Fig 4.11 – Opération d'assemblage de tous les éléments partageant le nœud i.

Dans le modèle d'interface imparfaite cohérente, l'impact mécanique de la présence de la tension de surface à une interface se résume à une surpression/depression dont l'amplitude dépend de la courbure locale moyenne et de la tension de surface. Alors, nous proposons un modèle de chargement mécanique de la tension de surface en imposant au solide tout simplement cette surpression/depression. La principale difficulté pour quantifier cette surpression/depression, réside dans l'évaluation de la courbure locale signée à chaque point de Gauss du maillage de l'interface solide-fluide. Alors, nous proposons de calculer cette courbure locale signée selon l'algorithme proposé en Fig. 4.10. Dans cet algorithme une illustration de l'opération de détection des éléments partageant chaque nœuds du maillage de l'interface et la description des nœuds et des points de Gauss d'un élément est donnée en Fig. 4.11.

La présence de deux grilles différentes, c'est à dire le grille régulière de SC LBM et le maillage du calcul par éléments finis (FEM), en particulier le maillage de l'interface solide-fluide, introduit

un paramètre $l_{FEM-LBM} = \frac{l_{FEM}}{\Delta x}$ qui est défini comme le rapport de longueur moyenne l_{FEM} du côté des éléments du maillage de l'interface solide-fluide sur l'espacement de la grille LBM Δx. Dans cette thèse, dans le but d'optimiser entre la précision de la segmentation de Γ^{sf} et le calcul de la courbure locale moyenne signée et les temps de calcul, nous avons choisis $l_{FEM-LBM} = 1$. Néanmoins, le maillage volumique de la phase solide est construit avec Salomé_méca de sorte à avoir des tailles caractéristiques du maillage plus grandes lorsqu'on s'éloigne de l'interface solide-fluide.

ENTRÉES. Seuil de l'épaisseur des films δ_{lim}, champ de densité $\rho(\mathbf{x})$ dans Ω^f

(1) Lissage du champ de densité $\rho(\mathbf{x})$ en utilisant un filtre Gaussien

(2) Détection des voxels dans Ω^l et ceux dans Ω^v en utilisant le densité moyenne $\rho_m = \frac{\rho^l + \rho^v}{2}$

(3) Extraction du maillage de l'interface $\Gamma^{lv} \cup \Gamma^{sv\prime}$ donné par ρ_m en utilisant un algorithme de Marching-Cube [Lorensen and Cline, 1987]. $\Gamma^{sv\prime}$ est la partie de l'interface qui est extraite qui est à une distance maximale de δ_{lim} par rapport à l'interface solide

(4) Calculer les coordonnées moyen de Gauss $\mathbf{x}_g$ pour chaque élément d'interface

(5) Calculer la distance minimale $\mathcal{D}_{min}(\mathbf{x})$ au solide pour chaque voxel dans Ω^l et Ω^v

(6) Projeter la distance minimale $\mathcal{D}_{min}(\mathbf{x}_g)$ sur le maillage de l'interface $\Gamma^{lv} \cup \Gamma^{sv\prime}$

(7) Pour chaque élément du maillage de $\Gamma^{lv} \cup \Gamma^{sv\prime}$ dont la distance minimale au solide est $\mathcal{D}_{min}(\mathbf{x}) \leq \delta_{min}$ appartient à $\Gamma^{sv\prime}$ tandis que les autres sont dans Γ^{lv}

SORTIES. maillage de l'interface liquide-vapeur Γ^{lv}

Fig 4.12 – Algorithme de construction du maillage de l'interface liquide-vapeur Γ^{lv}.

Enfin, la définition de la contrainte macroscopique donnée en Eq. (4.12) en présence des tensions de surface inclut la moyenne des contraintes de membrane sur l'interface liquide-vapeur. Alors, pour être en mesure d'évaluer cette contribution à la contrainte macroscopique nous avons développé et implémenté un algorithme similaire à l'algorithme de segmentation de l'interface solide-liquide (Fig. 4.8) pour détecter l'interface liquide-vapeur Γ^{lv}. La particularité de ce nouvel algorithme réside dans le fait que nous devons d'abord reconstruire le maillage de l'interface donné par la densité moyenne du fluide ρ_m (Fig. 4.12). Cette reconstruction est faite par lissage du champ de densité obtenu par le modèle SC LBM et ensuite nous appliquons un algorithme de Marching-Cube (Lorensen and Cline, 1987), nous permettant de reconstruire ce maillage.

4.3.3 Intégration numérique de la théorie MPS : algorithme exponentiel

L'intégration numérique de la théorie MPS est construite autour de l'intégration du terme viscoélastique Eq. (4.36) de la réponse en fluage. Il est bien connu que pour une intégration efficiente dans le cadre d'un calcul de structure des lois de fluage de type intégrale il faut les convertir sous forme différentielle avec des variables internes.

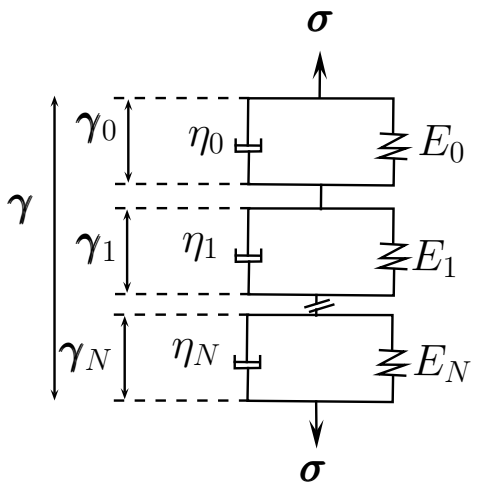


Fig 4.13 – Forme différentielle de la partie non vieillissante du terme viscoélastique $\boldsymbol{\varepsilon}^{ve}$ de la théorie MPS.

Notons par $\boldsymbol{\gamma}_\alpha$ les variables internes correspondant aux déformations des unités de la chaîne de Kelvin généralisée du terme viscoélastique $d\boldsymbol{\varepsilon}^{ve}$ de la théorie MPS, tel que :

$$\boldsymbol{\gamma}_\alpha(t) + \frac{\tau_\alpha}{\Psi_r(t)}\dot{\boldsymbol{\gamma}}_\alpha(t) = q_2 A_\alpha \boldsymbol{\sigma}(t), \tag{4.64}$$

et,

$$\boldsymbol{\gamma}(t) = \sum_{\alpha=0}^{N} \boldsymbol{\gamma}_\alpha(t), \tag{4.65}$$

où $\frac{1}{E_\alpha} = q_2 A_\alpha$ a été utilisé et $\boldsymbol{\gamma}$ est la déformation totale de la chaîne de Kelvin généralisée, avec :

$$d\boldsymbol{\varepsilon}^{ve}(t) = \frac{1}{v(t_e)}\boldsymbol{\gamma}(t) \tag{4.66}$$

Nous rappelons que A_α et τ_α^a sont les coefficients et les temps caractéristique de l'Eq. (4.43) de sorte que la résolution des Eq. (4.64) et (4.66), pour une contrainte $\boldsymbol{\sigma}(t) = \boldsymbol{\sigma}_0$ constante nous donne :

$$\boldsymbol{\gamma}(t) = q_2 \boldsymbol{\sigma}_0 \sum_{\alpha=0}^{N} A_\alpha \left\{1 - e^{-[t_r(t)-t_r(t')]/\tau_\alpha}\right\}. \tag{4.67}$$

Pour une histoire de contrainte donnée $\boldsymbol{\sigma}(t)$, nous utilisons l'algorithme exponentiel (Bazant, 1971; Bazant and Prasannan, 1989b; Bazant et al., 1997b, 2004) pour l'intégration numérique de la loi de comportement. Dans cet algorithme il est considéré dans chaque intervalle de temps $[t_i, t_{i+1}]$, que la contrainte varie linéairement. Sous cette hypothèse l'Eq. (4.64), peut être intégrée sur l'intervalle de temps $[t_i, t_{i+1}]$, ce qui conduit à :

$$\gamma^v_{\alpha_{i+1}} = \gamma^v_{\alpha_i} e^{-\Delta y_{\alpha_i}} + \frac{1}{3} q_{2v} A_\alpha \sigma^v_i (1 - e^{-\Delta y_{\alpha_i}}) + \frac{1}{3} q_{2v} A_\alpha (1 - \lambda_{\alpha_i}) \Delta\sigma^v, \tag{4.68}$$

$$\boldsymbol{\gamma}^d_{\alpha_{i+1}} = \boldsymbol{\gamma}^d_{\alpha_i} e^{-\Delta y_{\alpha_i}} + \frac{1}{2} q_{2d} A_\alpha \boldsymbol{\sigma}^d_i (1 - e^{-\Delta y_{\alpha_i}}) + \frac{1}{2} q_{2d} A_\alpha (1 - \lambda_{\alpha_i}) \Delta \boldsymbol{\sigma}^d, \tag{4.69}$$

où les exposants et indices ^{d} , ^{v} et $_d$, $_v$ font références aux parties déviatorique et volumique, telles que :

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma^v \mathbf{1} + \boldsymbol{\sigma}^d, \tag{4.70}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon^v \mathbf{1} + \boldsymbol{\varepsilon}^d, \tag{4.71}$$

$$\boldsymbol{\gamma}_\alpha = \gamma^v_\alpha \mathbf{1} + \boldsymbol{\gamma}^d_\alpha, \tag{4.72}$$

et on a :

$$\begin{aligned} q_{jv} &= 3(1 - 2\nu) q_j, j = 1, 2, 4, \\ q_{jd} &= 2(1 + \nu) q_j, j = 1, 2, 4. \end{aligned} \tag{4.73}$$

Les autres variables Δy_{α_i}, λ_{α_i} et $\Delta \boldsymbol{\sigma}$ sont définies par :

$$t_{i+1/2} = t_i + \Delta t/2, \tag{4.74}$$

$$\Delta \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_{i+1} - \boldsymbol{\sigma}_i, \tag{4.75}$$

$$\Delta y_{\alpha_i} = \Psi_r(t_{i+1/2}) \Delta t / \tau_\alpha, \tag{4.76}$$

et,

$$\lambda_{\alpha_i} = \frac{(1 - e^{-\Delta y_{\alpha_i}})}{\Delta y_{\alpha_i}}. \tag{4.77}$$

La prise en compte du terme d'élasticité initial, la mise sous leur forme incrémentale des Eq. (4.66) et (4.39),

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{ve} = \frac{1}{v_{e,i+1/2}} \Delta \boldsymbol{\gamma}, \tag{4.78}$$

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^v = \Psi_{r,i+1/2} \Delta t \frac{\boldsymbol{\sigma}_{i+1/2}}{\eta_{i+1/2}} \tag{4.79}$$

où $v_{e,i+1/2} = v[t_e(t_{i+1/2})]$, $\Psi_{r,i+1/2} = \Psi_r(t_{i+1/2})$, $\eta_{i+1/2} = \eta(s_{i+1/2})$, $\boldsymbol{\sigma}_{i+1/2} = \boldsymbol{\sigma}_i + \Delta \boldsymbol{\sigma}/2$, $s_{i+1/2} = s(t_{i+1/2})$, nous donne la loi de comportement incrémentale suivante de la théorie MPS :

$$\frac{1}{k''_i} = q_{1v} + q_{2v} \frac{1}{v_{e,i+1/2}} \sum_{\alpha=0}^{N} A_\alpha (1 - \lambda_{\alpha_i}) + \frac{\Psi_{r,i+1/2} \Delta t}{2 \eta^v_{i+1/2}}, \tag{4.80}$$

$$\frac{1}{\mu_i''} = q_{1d} + q_{2d}\frac{1}{v_{e,i+1/2}}\sum_{\alpha=0}^{N} A_\alpha(1-\lambda_{\alpha_i}) + \frac{\Psi_{r,i+1/2}\Delta t}{2\eta^d_{i+1/2}}, \tag{4.81}$$

$$\Delta\varepsilon^{\prime\prime,v} = \frac{1}{v_{e,i+1/2}}\sum_{\alpha=0}^{N}(1-e^{-\Delta y_{\alpha_i}})(q_{2v}A_\alpha\frac{\sigma_i^v}{3} - \gamma_\alpha^v) + \frac{\Psi_{i+1/2}\Delta t\sigma_i^v}{3\eta^v_{i+1/2}}, \tag{4.82}$$

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^{\prime\prime,d} = \frac{1}{v_{e,i+1/2}}\sum_{\alpha=0}^{N}(1-e^{-\Delta y_{\alpha_i}})(q_{2d}A_\alpha\frac{\boldsymbol{\sigma}_i^d}{2} - \boldsymbol{\gamma}_\alpha^d) + \frac{\Psi_{i+1/2}\Delta t\boldsymbol{\sigma}_i^d}{2\eta^d_{i+1/2}}. \tag{4.83}$$

$$\Delta\boldsymbol{\sigma} = 3k''(\Delta\varepsilon^v - \Delta\varepsilon^{\prime\prime,v})\mathbf{1} + 2\mu''(\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^d - \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^{\prime\prime,d}) \tag{4.84}$$

où les viscosités volumique et déviatorique à $t = t_{i+1/2}$ sont données par :

$$\eta^v_{i+1/2} = 3(1-2\nu)\eta_{i+1/2}, \tag{4.85}$$

$$\eta^d_{i+1/2} = 2(1+\nu)\eta_{i+1/2}. \tag{4.86}$$

Pour obtenir les valeurs de la viscosité $\eta_{i+1/2} = \eta(s_{i+1/2})$ nous devons, connaître en avance, la valeur de la microprécontrainte à l'instant $t = t_{i+1/2}$. Nous pouvons l'obtenir en faisant l'hypothèse que le second terme de l'Eq. (4.41) est constant sur l'intervalle de temps $[t_i, t_{i+1}]$, ce qui conduit à :

$$s_{i+1} = \left(\frac{1}{(p-1)\Psi_{s,i+1/2}c_0\Delta t + \frac{1}{s_i^{p-1}}}\right)^{\frac{1}{p-1}} + \frac{c_1}{c_0}\left|\frac{\Delta h}{h_{i+1/2}}\right|, \tag{4.87}$$

et $s_{i+1/2} = s_i + \Delta s/2$.

Cette intégration de la théorie MPS a été implémentée sous Mfront et les grandes étapes de l'implémentation sont résumées par :

1. Calculer à tous les points de Gauss de la structure $s_{i+1/2}$, $\frac{1}{k_i''}$, $\frac{1}{\mu_i''}$, $\Delta\varepsilon^{\prime\prime,v}$, $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^{\prime\prime,d}$ à partir des Eqs. (4.80)-(4.83) et (4.87),
2. Chercher $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$ jusqu'à vérifier l'équilibre de la structure pour l'incrément de contrainte $\Delta\boldsymbol{\sigma}$ calculé à partir de l'Eq. (4.84),
3. une fois l'équilibre atteint mettre à jour les variable $\boldsymbol{\sigma}_{i+1} = \boldsymbol{\sigma}_i + \Delta\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\varepsilon}_{i+1} = \boldsymbol{\varepsilon}_i + \Delta\boldsymbol{\varepsilon}$ et $\boldsymbol{\gamma}_{\alpha_{i+1}}$ à partir des Eq. (4.68), (4.69) et (4.72).

4.4 Exemples numériques

4.4.1 Validations des conditions aux limites périodique en 3-D

L'appareillage des conditions aux limites périodiques décrites en section 4.3.1, a d'abord été validé en vérifiant que nous retrouvons la déformation macroscopique imposée et une égalité

entre le tenseur de rigidité de la phase solide et son tenseur de rigidité effectif (point de porosité nulle sur la Fig. 4.14) dans le cas d'une boite de calcul remplie entièrement par une phase solide homogène élastique et isotrope.

Pore vide : homogénéisation de la rigidité élastique effective d'une microstructure périodique contenant des pores en forme d'éllipsoïde allongé selon $\mathbf{e}_3$.

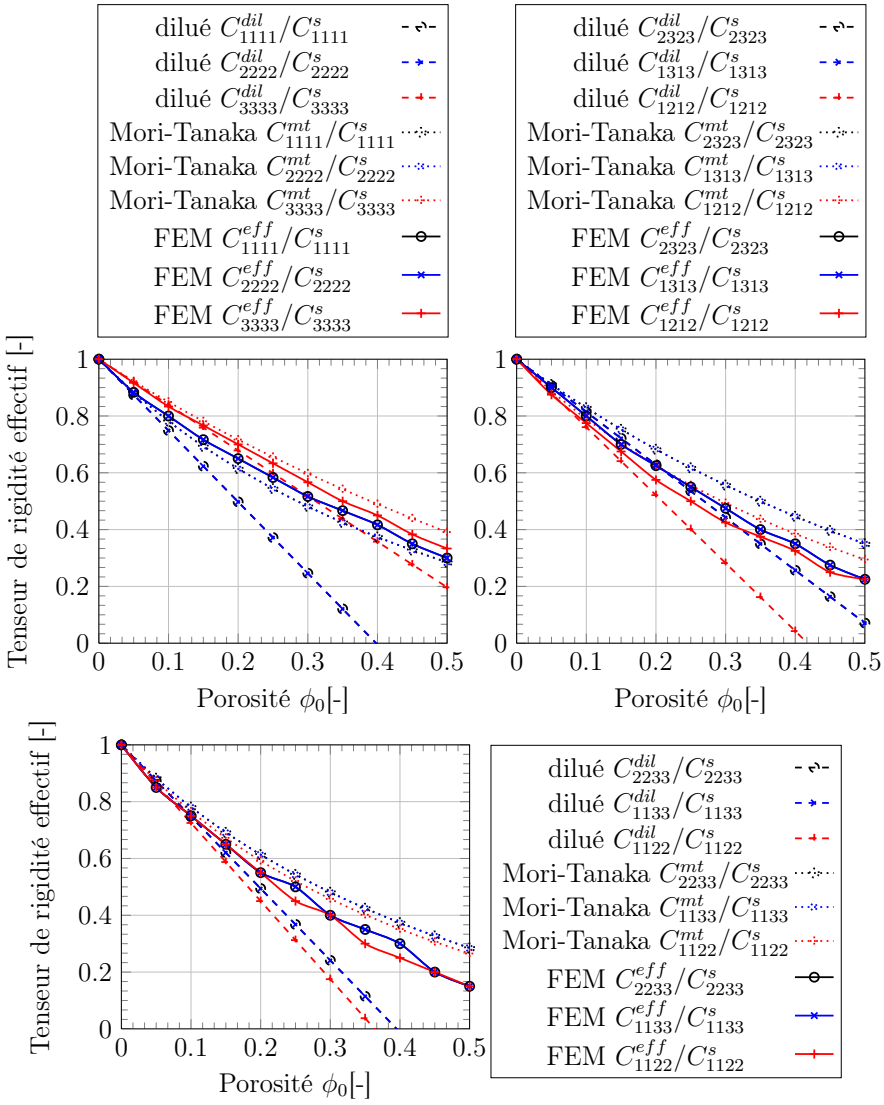


Fig 4.14 – Composantes normalisées du tenseur de rigidité effectif d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'éllipsoïde de révolution allongé.

Dans le double objectif d'avoir une validation supplémentaire et de montrer les possibilités d'utilisation de notre méthodologie d'appareillage des nœuds opposés dans le cadre de l'application des conditions aux limites périodiques sous Code_Aster, nous proposons de comparer la rigidité élastique effective d'un milieux poreux périodique contenant des pores en forme d'él-

lipsoïde de révolution allongé (prolate en anglais), comme illustré sur la Fig. 3.12, obtenue par différente méthodes. La rigidité effective est obtenue par les trois méthodes suivantes :

— une homogénéisation numérique avec les conditions aux limites périodiques pour une boîte de calcul ayant le même aspect de forme que le pore éllipsoïdal qu'il contient, noté par FEM,

— une estimation obtenue par homogénéisation analytique donnée par le **schéma dilué**,

— et une autre estimation obtenue par homogénéisation analytique donnée par le **schéma de Mori-Tanaka**.

Pour une discussion plus exhaustive sur la construction de ces estimations micromécaniques consulter (Dormieux et al., 2006). Introduisons le tenseur d'ordre 4 de localisation $\mathbb{A}$, qui relie par linéarité du problème la déformation macroscopique imposée à la déformation locale :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbb{A}(\mathbf{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \tag{4.88}$$

ce qui nous permet de définir le tenseur de rigidité effectif dans le cas d'une microstructure poreuse à phase solide élastique linéaire et homogène par :

$$\mathbb{C}^{eff} = \mathbb{C}^s : (\mathbb{I} - \phi_0 \langle \mathbb{A} \rangle_f) \,, \tag{4.89}$$

où $\mathbb{C}^s$ est le tenseur de rigidité élastique d'ordre 4 de la phase solide, $\mathbb{I}$ est le tenseur identité d'ordre 4 et $\langle \mathbb{A} \rangle_f$ est la moyenne intrinsèque du tenseur de localisation sur la phase poreuse. Les estimateurs micromécaniques consistent dans notre cas à donner une approximation de $\langle \mathbb{A} \rangle_f$. L'estimation du schéma dilué est donnée par :

$$\langle \mathbb{A} \rangle_f \simeq \mathbb{A}^{dil} = (\mathbb{I} - \mathbb{S})^{-1}, \tag{4.90}$$

avec $\mathbb{S}$ le tenseur d'Eshelby, définit dans le cas d'un pore en forme d'éllipsoïde de révolution allongé suivant $\mathbf{e}_3$ en Annexe C.2. Tandis que dans le cas de l'estimation du schéma de Mori-tanaka, nous avons :

$$\langle \mathbb{A} \rangle_f \simeq \mathbb{A}^{mt} = (\mathbb{I} - \mathbb{S})^{-1} : ((1 - \phi_0)\mathbb{I} + \phi_0 (\mathbb{I} - \mathbb{S})^{-1})^{-1}. \tag{4.91}$$

Ces deux estimateurs conduisent aux estimations suivantes du tenseur de rigidité élastique effectif :

$$\mathbb{C}^{dil} = \mathbb{C}^s : (\mathbb{I} - \phi_0 (\mathbb{I} - \mathbb{S})^{-1}), \tag{4.92}$$

$$\mathbb{C}^{mt} = (1 - \phi_0)\mathbb{C}^s : ((1 - \phi_0)\mathbb{I} + \phi_0 (\mathbb{I} - \mathbb{S})^{-1})^{-1}. \tag{4.93}$$

Par ailleurs, le tenseur de rigidité est construit par éléments en faisant pour un chargement $\bar{\varepsilon}_{kl} = 1$, $\bar{\varepsilon}_{ij} = 0, ij \neq kl$, la moyenne suivante :

$$C_{ijkl}^{eff} = \frac{(1-\phi_0)}{|\Omega^s|}\int_{\Omega^s} \sigma_{ij}^s(\mathbf{x})dv. \tag{4.94}$$

La Fig. 4.14, présente l'évolution des composantes normalisées du tenseur de rigidité élastique effectif en fonction de la porosité initiale. Comme attendu le tenseur de rigidité effectif est isotrope transverse compte tenue de la forme éllipsoïdale de révolution allongée des pores. Nous obtenons les mêmes tendances d'évolutions et les mêmes ordres de grandeur pour les trois méthodes de calcul. En dessous de 10% de porosité nous avons une bonne concordance des trois méthodes de calcul, tandis qu'au delà de cette fraction volumique de pore le schéma dilué s'écarte complètement des deux autres méthodes de calcul. Cela est cohérent puisque le schéma dilué représente la solution directe du problème d'inhomogénéité d'Eshelby qui ne prend pas en compte les interactions entre les pores et leurs répartitions. La solution par éléments finis est très proche de l'estimation donnée par le schéma Mori-Tanaka mais l'écart entre les deux méthodes se creuse avec l'augmentation de la porosité. Dans le calcul aux éléments finis, les composantes $C_{1133} = C_{2233}$ et C_{1122} sont parfois égales, cela doit être lié aux erreurs sur le maillage. En effet, pour de très faible porosité la boite de calcul est très grande comparé au pore ce qui induit des difficultés de maillage, aussi pour de grande porosité les conditions aux limites affectent beaucoup la qualité du résultat. Ce exemple nous a servi à nous assurer que nous imposons correctement les conditions aux limites périodiques, et que nous sommes en mesure d'estimer dans le cadre de l'élasticité par exemple la rigité effective d'un milieu poreux.

Pore saturé : homogénéisation du tenseur et du module de Biot en condition saturé d'une microstructure périodique contenant des pores en forme d'éllipsoïde allongée selon $\mathbf{e}_3$.

Dans le même esprit que dans l'application précédente nous comparons les évolutions du tenseur de Biot et du module de Biot avec la porosité obtenues, par les trois méthodes précédentes. Aussi, à partir de l'Eq (4.88), on montre (Dormieux et al., 2006), que :

$$\mathbf{B} = \phi_0 \mathbf{1} : \langle \mathbb{A} \rangle_f, \tag{4.95}$$

et,

$$\frac{1}{N} = \mathbf{1} : (\mathbb{C}^s)^{-1} : (\mathbf{B} - \phi_0 \mathbf{1}), \tag{4.96}$$

avec $\mathbf{B}$ et N, respectivement le tenseur et le module de Biot en condition saturée. Comme précédemment l'estimation du schéma dilué nous donne :

$$\mathbf{B}^{dil} = \phi_0 \mathbf{1} : (\mathbb{I} - \mathbb{S})^{-1}, \tag{4.97}$$

$$\frac{1}{N^{dil}} = \mathbf{1} : (\mathbb{C}^s)^{-1} : (\mathbf{B}^{dil} - \phi_0 \mathbf{1}), \tag{4.98}$$

alors que celui de Mor-Tanaka, nous donne :

$$\mathbf{B}^{mt} = \phi_0 \mathbf{1} : (\mathbb{I} - \mathbb{S})^{-1} : ((1-\phi_0)\mathbb{I} + \phi_0 (\mathbb{I} - \mathbb{S})^{-1})^{-1}, \tag{4.99}$$

$$\frac{1}{N^{mt}} = \mathbf{1} : (\mathbb{C}^s)^{-1} : (\mathbf{B}^{mt} - \phi_0 \mathbf{1}), \tag{4.100}$$

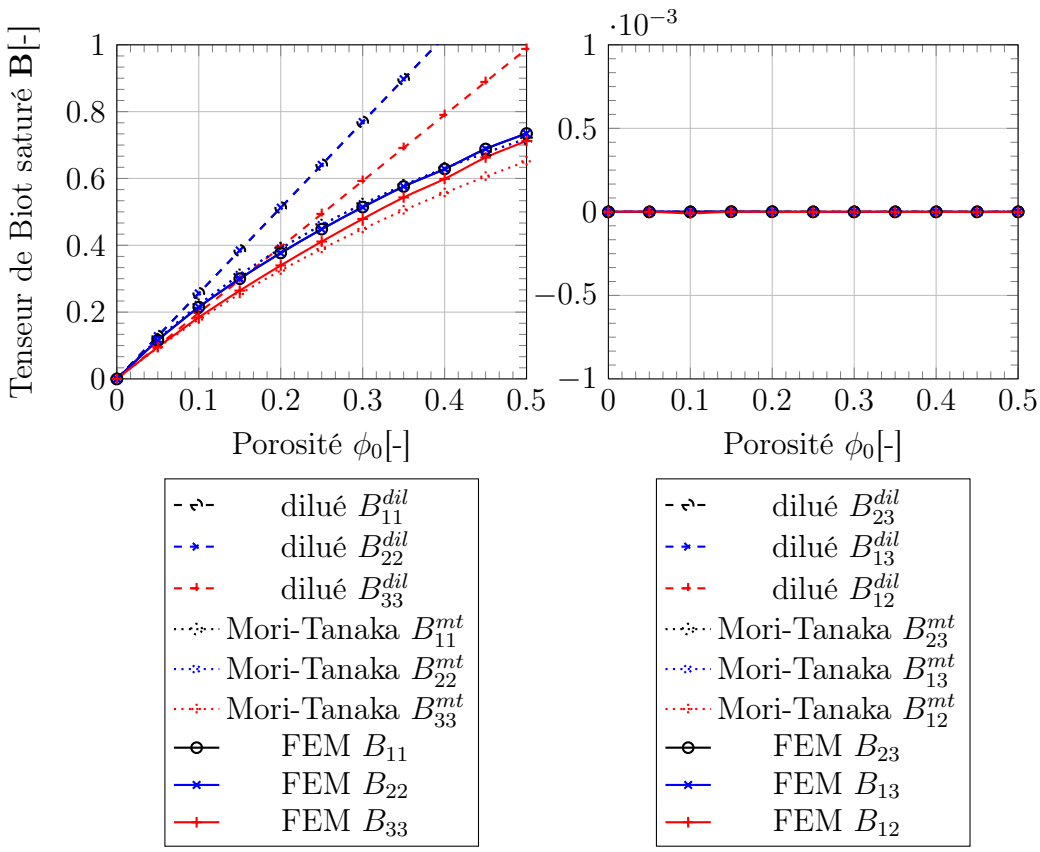


Fig 4.15 – Composantes du tenseur de Biot d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'éllipsoïde de révolution allongé.

Le calcul du tenseur et du module de Biot s'obtient par éléments finis en imposant une pression unitaire $p = 1$ à l'interface solide-pore avec un tenseur de déformation macroscopique nulle $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{0}$, et faisant les moyennes suivantes :

$$\mathbf{B} = -\frac{(1-\phi_0)}{|\Omega^s|}\int_{\Omega^s} \boldsymbol{\sigma}^s(\mathbf{x})dv + \phi_0, \tag{4.101}$$

$$\frac{1}{N} = \frac{\phi_0}{2|\Omega^p|}\left\{\mathbf{1} : \int_{\Gamma^{sp}} \left[\mathbf{u}(\mathbf{x}) \otimes \mathbf{n}^s(\mathbf{x}) + \mathbf{n}^s(\mathbf{x}) \otimes \mathbf{u}(\mathbf{x})\right] ds\right\}, \tag{4.102}$$

La Fig. 4.15, présente la comparaison du tenseur de Biot calculé par éléments finis et de ceux donnés par les estimateurs micromécaniques. Elle montre une évolution similaire des composantes du tenseurs en fonction de la porosité pour les trois méthodes de calcul. Le tenseur de Biot est bien isotrope transverse comme attendu du fait de la forme éllipsoïdale de révolution allongée du pore. Comme précédemment, le schéma dilué s'écarte pour de grandes porosités pour la même raison, concernant la non prise en compte des interactions entre les pores. Le calcul fait par les éléments finis reste très proche de celui fait par l'estimateur de Mori-Tanaka.

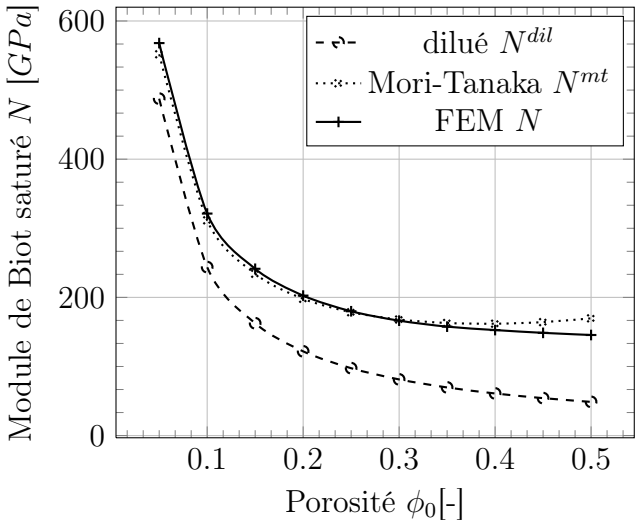


Fig 4.16 – Module de Biot d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'éllipsoïde de révolution allongé.

Enfin, la Fig. 4.16 montre l'évolution du module de Biot avec la porosité de la microstructure. Comme nous pouvons nous y attendre nous constatons les mêmes observations comme précédemment. Ce dernier cas valide notre mise en œuvre du calcul de la moyenne de déformation de l'espace poreux à partir de l'Eq. (4.102).

4.4.2 Détection des interfaces solide-liquide, solide-vapeur et liquide-vapeur

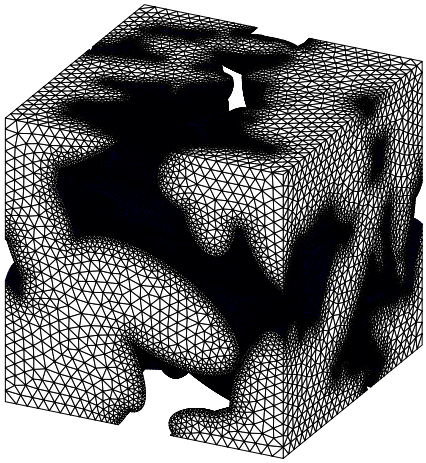
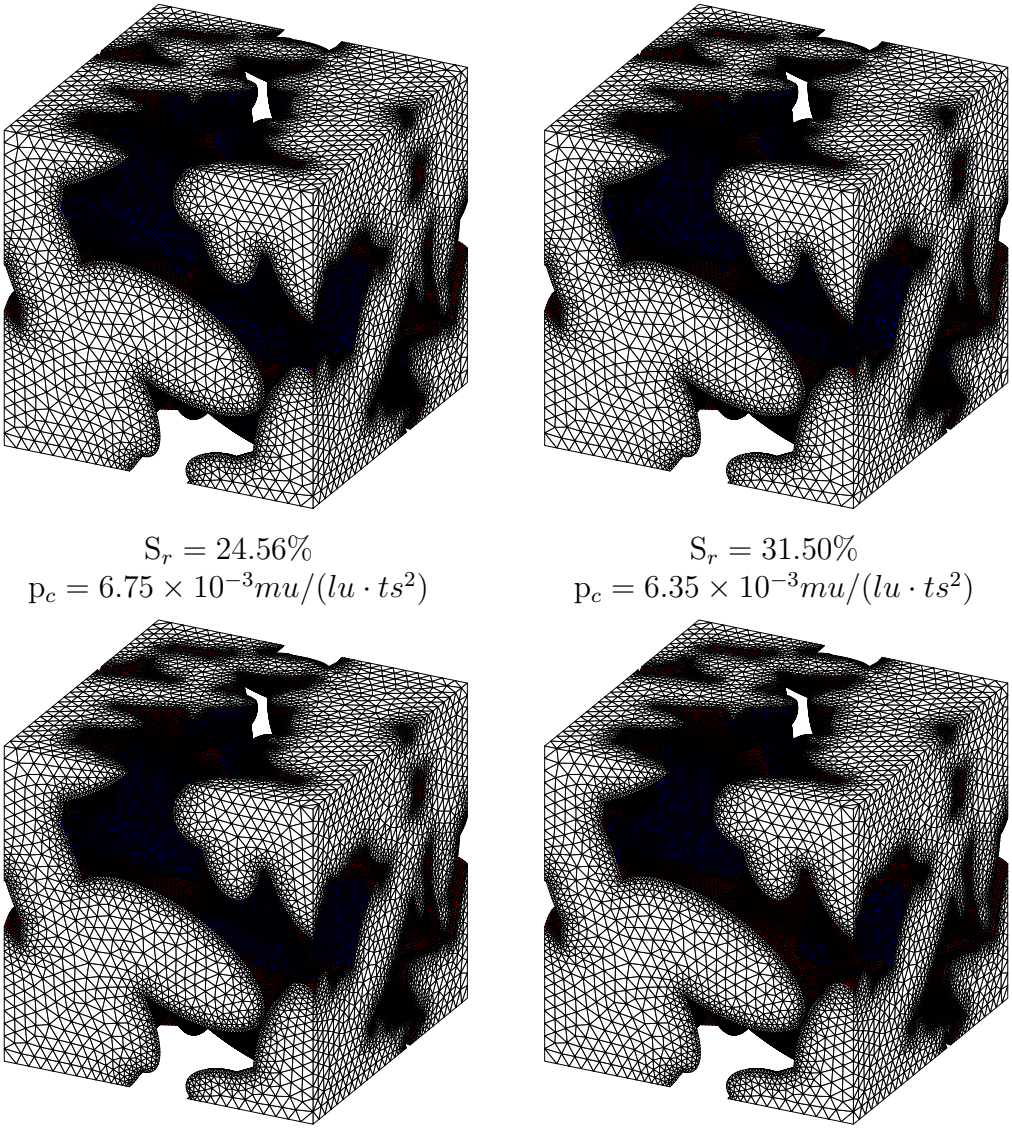


Fig 4.17 – Maillage de la microstructure à morphologie de type du gel C-S-H, 638883 nœuds et 3475860 tétrahèdres. En bleu : interface solide-fluide Γ^{sf} et En blanc : contour extérieur $\partial\Omega^s$.

Afin d'être en mesure de traiter les microstructures poreuses en situation non saturée, nous illustrons les techniques développées dans cette thèse pour segmenter l'interface solide-fluide ,

en interfaces solide-vapeur et solide-liquide et celle mise en place pour reconstruire l'interface liquide-vapeur pour une saturation partielle de liquide donnée. Sur la Fig. 4.17, le maillage de la phase solide de la microstructure construite numériquement dans le but de représenter la morphologie complexe du gel de C-S-H (section 3.4.6.2).



$S_r = 24.56\%$
$p_c = 6.75 \times 10^{-3} mu/(lu \cdot ts^2)$

$S_r = 31.50\%$
$p_c = 6.35 \times 10^{-3} mu/(lu \cdot ts^2)$

$S_r = 38.32\%$
$p_c = 6.09 \times 10^{-3} mu/(lu \cdot ts^2)$

$S_r = 45.12\%$
$p_c = 6.28 \times 10^{-3} mu/(lu \cdot ts^2)$

Fig 4.18 – Opération de segmentation du maillage de l'interface solide-fluide Γ^{sf}, en deux parties, interface solide-liquide Γ^{sl} et interface solide-vapeur Γ^{sv}, en fonction de la répartition des phases liquide et vapeur dans le réseau poreux.

La Fig. 4.18, présente les groupes de mailles des interfaces solide-liquide et solide-vapeur, en rouge l'interface solide-liquide Γ^{sl} et en bleu l'interface solide-vapeur Γ^{sv}, obtenus pour différents

degrés de saturation en liquide, à partir de l'algorithme donné en Fig. 4.8.

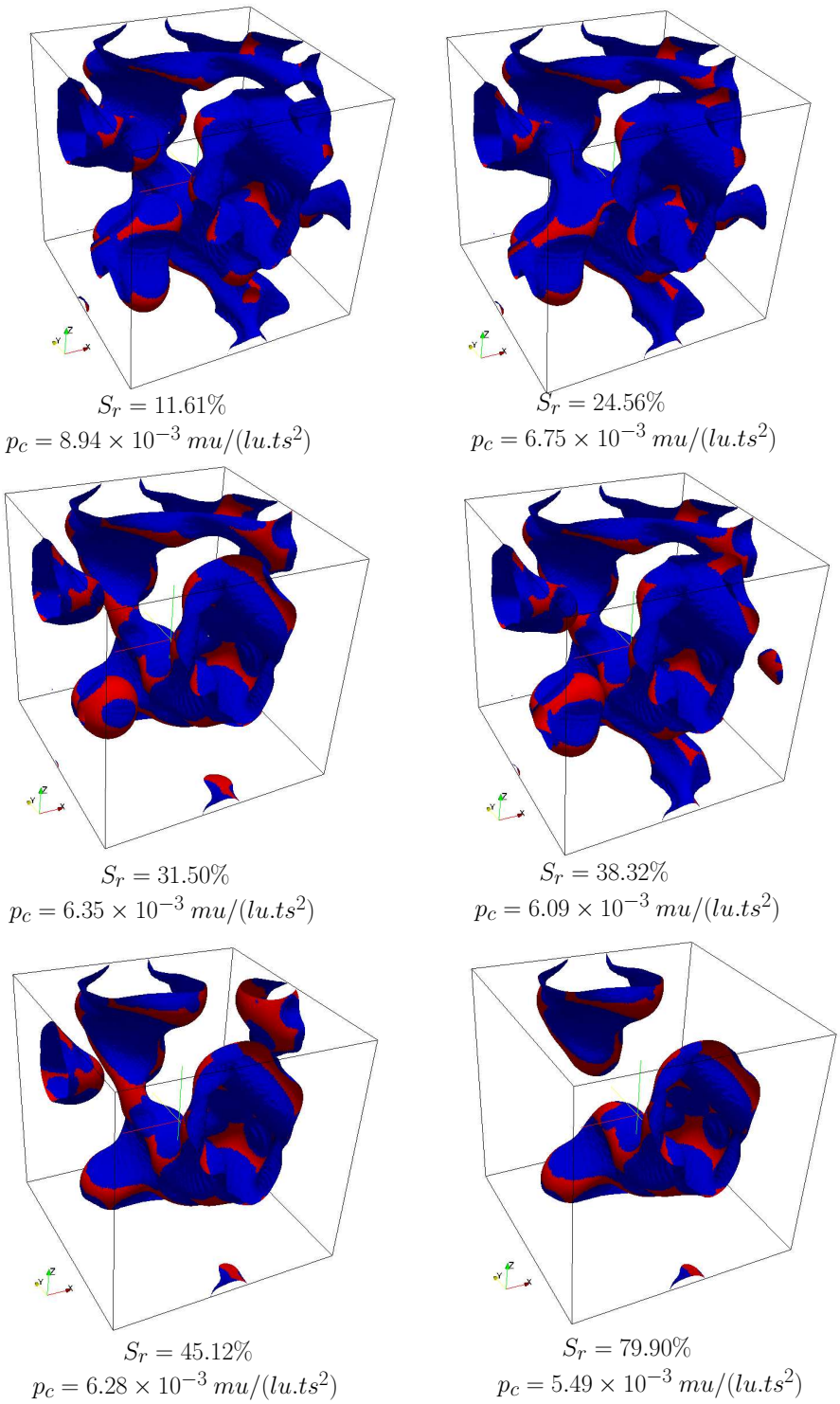
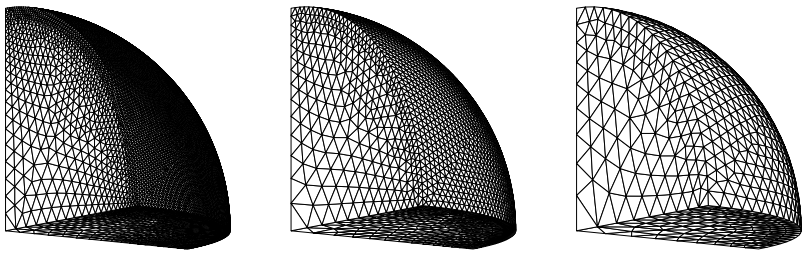


Fig 4.19 – Opération de reconstruction du maillage de l'interface liquide-vapeur Γ^{lv} (en rouge), en fonction de la répartition des phases liquide et vapeur dans le réseau poreux.

La Fig. 4.19, montre la construction du maillage de l'interface liquide-vapeur à partir de l'algorithme donné en Fig. 4.12. Sur cette figure la partie correspondante à l'interface liquide-

vapeur est labélisée en rouge. Ce maillage est utile pour le calcul de la contribution de l'interface liquide-vapeur à la moyenne de la contrainte de membrane sur l'ensemble du milieu non saturé.

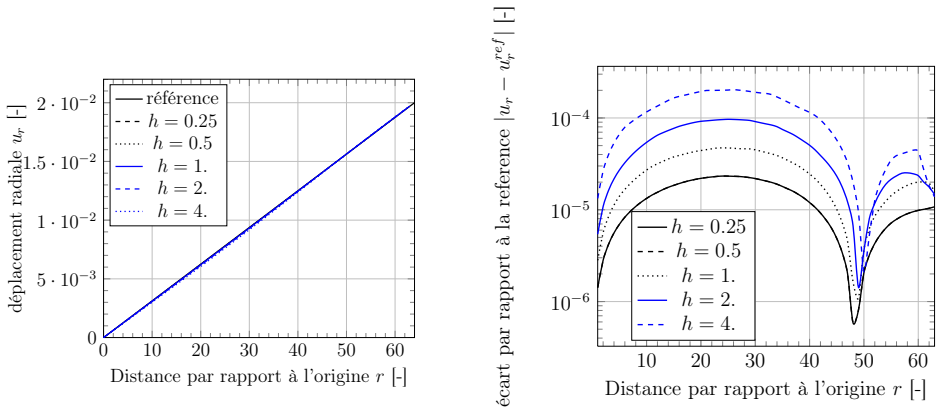
4.4.3 Surpression/depression induite par la présence de tension de surface



(a) $h = 1.0$ (b) $h = 2.0$ (c) $h = 4.0$

Fig 4.20 – Maillage d'un quart de sphère soumis à une tension de surface.

Dans cette section nous nous intéressons à la validation de l'algorithme que nous avons proposé en Fig. 4.10, nous permettant d'imposer une surpression/depression induite par la tension de surface sur l'interface solide-fluide. Nous proposons pour ce faire, de comparer à la solution analytique dans le cas d'une interface sphérique avec le centre de courbure situé dans la phase solide, le déplacement radial causé par la surpression calculée selon la méthode proposée dans l'algorithme sur la Fig. 4.10.



(a) Déplacement radial (b) écart de la référence

Fig 4.21 – Évaluation de la surpression induite par la tension de surface.

La solution de référence est donnée par :

$$u^{ref}(r) = \frac{2\gamma}{(3\lambda + 2\mu)} \frac{r}{R} \tag{4.103}$$

où γ est la tension de surface, λ et μ les coefficients de Lamé, r et R, la distance par rapport à l'origine de la sphère et le rayon de la sphère. Les calculs par éléments finis ont été réalisés sous Code_Aster avec les maillages d'un huitième de la sphère présentés en Fig. 4.20. Nous avons une condition de symétrie aux faces internes du maillage et le centre de sphère a été fixé. Un champ de surpression est imposé sur la face externe du maillage.

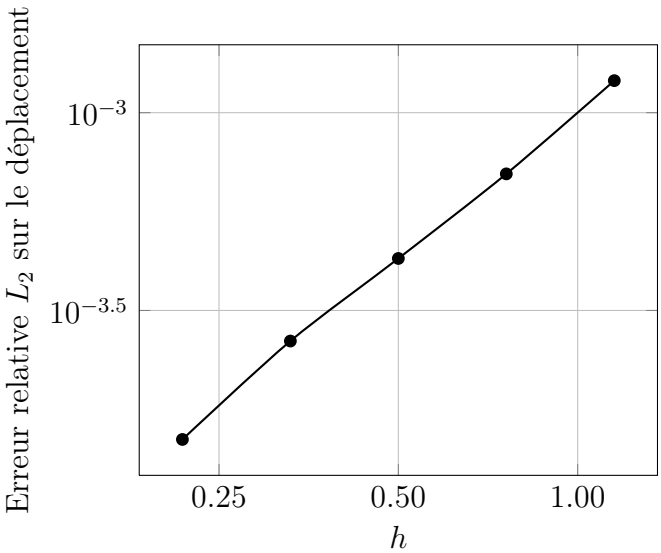


Fig 4.22 – Erreur sur l'évaluation de la surpression induite par la tension de surface en fonction du raffinement du maillage de l'interface solide-pore.

La Fig. 4.21, présente le déplacement radial en fonction de la distance au centre de la sphère. Nous observons une bonne correspondance entre les calculs par éléments finis pour différentes finesses du maillage de la face externe avec la solution de référence (Fig. 4.21-a). Sur la Fig. 4.21-b, l'écart observé entre la solution de référence et les calculs aux éléments finis par rapport à la distance au centre de courbure sont présentés. Ce écart se réduit avec la finesse du maillage de la face extérieur. Aussi, la Fig. 4.22 montre la convergence du calcul de la courbure locale signée et de l'imposition de la surpression avec la finesse du maillage de l'interface solide-fluide.

4.4.4 Simulations de la réponse d'un point matériel avec la théorie MPS

Nous souhaitons valider notre implémentation faite sous Mfront de la théorie MPS, pour ce faire nous proposons de simuler la réponse d'un point matériel sous Mtest et de la confronter soit à la solution analytique soit à quelques données expérimentales disponibles dans la littérature. Mtest est un outil associé à Mfront permettant de faire des simulations de la réponse d'un point de Gauss pour des trajets de chargement en contrainte ou en déformation et dans notre cas en

humidité. Ce module est très utile pour tester les dévéloppements de loi de comportement avant d'effectuer des applications aux éléments finis coûteuses en temps de calcul.

On rappelle que la forme empirique de la complaisance de fluage non vieillissante $\Phi(t-t')$ de la partie viscoélastique de la théorie MPS est donnée par l'Eq. (4.38). Pour cette forme empirique de la complaisance non vieillissante, l'Eq. (4.47) nous donne son spèctrede retard continu $L(\tau)$. Comme proposé par (Bazant and Prasannan, 1989a) nous prenons $\lambda_0 = 1$ jour et $n = 0.11$. Afin de déterminer les A_α, nous discrétisons le spèctre continu $L_3(\tau)$ en choisissant $\tau_1 = 10^{-4}$ jour et $N = 10$ unités pour la chaîne de Kelvin généralisée. Alors, nous avons $\tau_0 = \tau_1/\sqrt(10)$, $\tau_\alpha = 10^{\alpha-1}\tau_1$, $\alpha = 2, \cdots, 10$ et :

$$A_0 = \int_{\tau=0}^{\tau_0} L_3(\tau) d(\ln(\tau)) \tag{4.104}$$

$$A_\alpha = \ln(10) L_3(\tau_\alpha) \tag{4.105}$$

Nous évaluons A_0 en intégrant analytiquement L_2 entre $\tau = 0$ et $\tau = 10^{-20}$ et en y ajoutant l'intégration numérique de L_3 entre $\tau = 10^{-20}$ et τ_0 :

$$A_0 = ln(1 + (2\tau_0')^b) - \frac{b(2\tau_0')^b}{1 + (2\tau_0')^b} + \int_{\tau_0'}^{\tau_0} L_3(\tau) d(ln(\tau)),\ \tau_0' = 10^{-20} \tag{4.106}$$

Le Tab. 4.1 récapitule les valeurs obtenues des A_α.

A_0	0.27166222
A_1	0.06513008
A_2	0.07815955
A_3	0.0925178
A_4	0.10789128
A_5	0.1238521
A_6	0.13990094
A_7	0.15552763
A_8	0.17027456
A_9	0.1837866
A_{10}	0.19583709

Tab 4.1 – Valeurs des coefficients A_α obtenus en discrétisant $L_3(\tau)$ pour $\tau_1 = 10^{-4}$ jour et $N = 10$.

La Fig. 4.23, présente le spèctre continu et l'approximation obtenue de la complaisance non vieillissante de fluage avec notre jeu de paramètres ci-dessus. Nous observons des écarts en dessous de τ_0 et au dela de τ_{10}, ce qui est normal puisque la réponse de $\frac{1}{v(t)}\Phi(t-t')$ en dessous de τ_0 correspond à la partie vieillissante de la réponse élastique dans la théorie MPS. Alors que

le modèle de la chaîne de Kelvin généralisée nous permet d'avoir une très bonne approximation de la fonction de fluage non vieillissante $\Phi(t-t')$ jusqu'à τ_{10}. Ainsi, pour des simulations dont la durée va au-dela de τ_{10}, il faudrait ajouter des chaînes de Kelvin supplémentaires de sorte que la durée de la réponse en fluage soit incluse dans la plage des temps caractéristiques discrets.

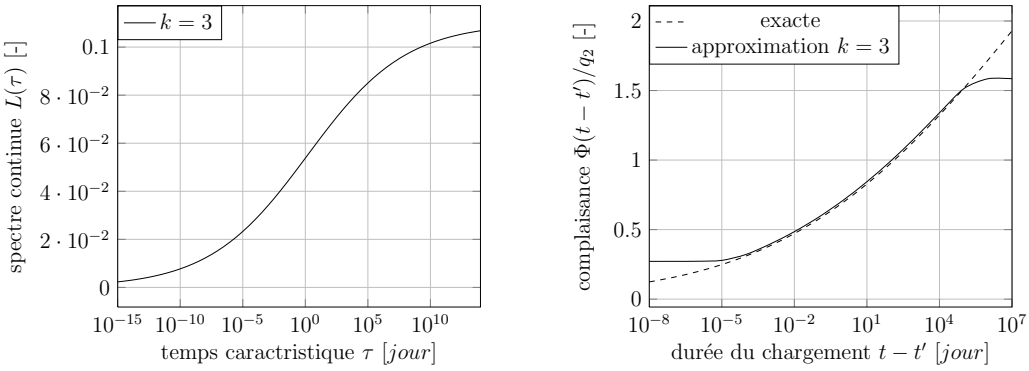


Fig 4.23 – Approximation d'ordre $k = 3$ du spèctre continu $L(\tau)$ et de la fonction de complaisance $\phi(t-t')/q_2$ normalisée de la partie non vieillissante de $d\boldsymbol{\varepsilon}^{ve}$.

Dans la suite nous présentons les effets de l'âge du chargement et de l'humidité sur la réponse du modèle MPS.

4.4.4.1 Simulations à humidité constante

Dans cette partie nous simulons la réponse du point matériel pour plusieurs trajets de contrainte pour le fluage ou de déformation pour la relaxation à humidité constante. Dans le but de comparer la complaisance de fluage vieillissante $F(t,t')$ a humidité constante ($h = 1$), à la complaisance de fluage exacte, nous nous donnons les paramètres matériaux du Tab. 4.2 suivants :

q_1	$0.069MPa^{-1}$
q_2	$0.786MPa^{-1}$
q_4	$0.0541MPa^{-1}$
α	0.0362
p	2
m	0.5

Tab 4.2 – Valeurs de paramètres matériaux.

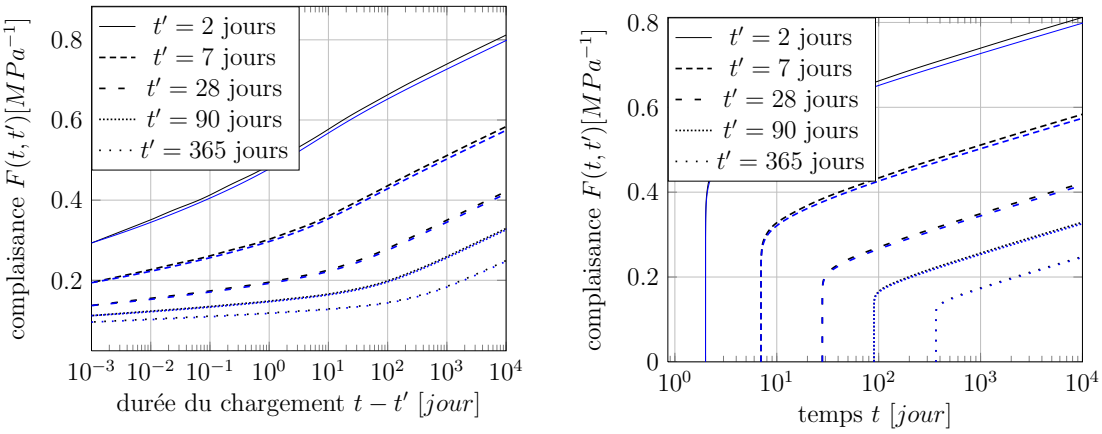


Fig 4.24 – Complaisance de fluage vieillissant $F(t,t')$ à différents âges $t' = 2, 7, 28, 90, 365$ jours à humidité constante $h = 1$. En noir : Mtest et en bleu : complaisance exacte.

.

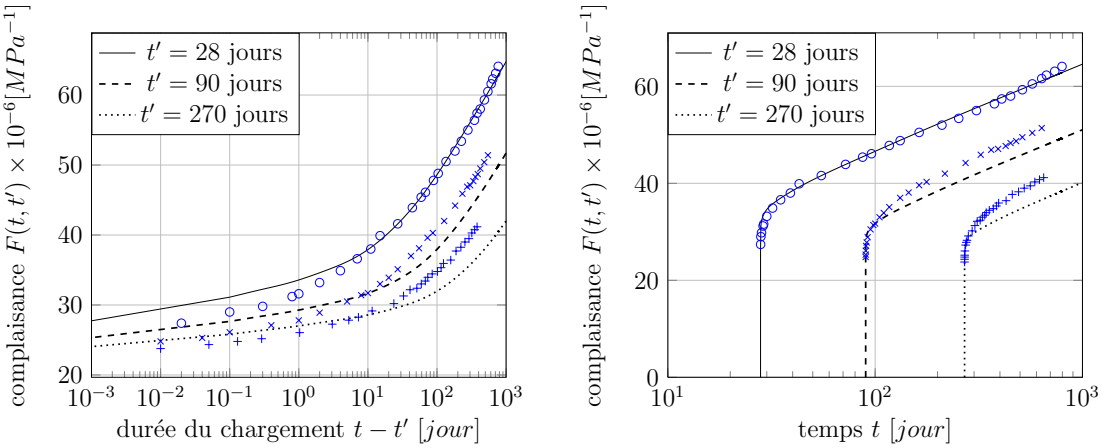


Fig 4.25 – Comparaison aux données expérimentales de (Komendant et al., 1976) de la complaisance de fluage vieillissant $F(t,t')$ à différents âges $t' = 28, 90, 270$ jours à humidité constante $h = 1$.En noir : Mtest et en bleu : les données expérimentales.

.

Dans le cas d'une humidité constante la complaisance exacte de fluage vieillissant est donnée par :

$$F(t,t') = q_1 + q_2 Q(t,t') + q_3 \ln[1 + (\frac{t-t'}{\lambda_0})^n] + q_4 \ln(\frac{t}{t'}), \tag{4.107}$$

avec,

$$Q(t,t') = \int_{t'}^{t} (\frac{\lambda_0}{\tau}) \frac{n(\tau - t')^{n-1}}{\lambda_0^n + (\tau - t')^n} d\tau \tag{4.108}$$

Les Fig. 4.24 montrent la complaisance de fluage vieillissant $F(t,t')$ pour une humidité fixée $h = 1$. L'effet du vieillissement au jeune âge et à long-terme est bien représenté par cette approche.

q_1	$20 \times 10^{-6} MPa^{-1}$
q_2	$70 \times 10^{-6} MPa^{-1}$
q_4	$3 \times 10^{-6} MPa^{-1}$
α	0.08
p	2
m	0.5

Tab 4.3 – Valeurs de paramètres matériaux optimisés par (Jirasek and Havlasek, 2014) sur les données de expérimentales de (Komendant et al., 1976).

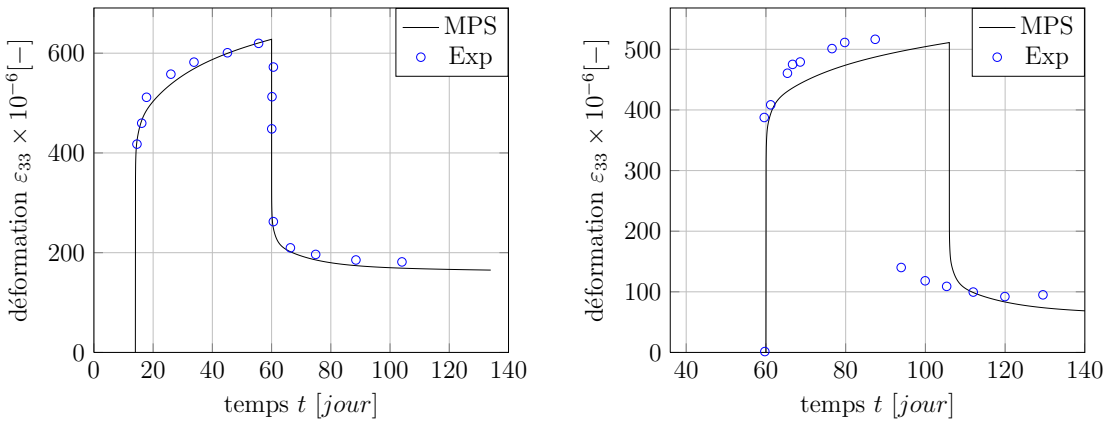


Fig 4.26 – Comparaison aux données expérimentales de (Ross, 1958) de la recouvrance de fluage vieillissant à humidité pour un chargement initial à différents âges $t' = 14, 60$ et une décharge à 46 jours plus tard et ce à humidité constante $h = 1$. En noir : Mtest et en bleu : les données expérimentales.

.

Des validations supplémentaires de notre implémentation s' obtiennent en simulant des essais expérimentaux de la littérature comme (Bazant and Prasannan, 1989b; Jirasek and Havlasek, 2014). Sur la Fig. 4.25, nous comparons la complaisance de fluage vieillisant à différent âge $t' = 28, 90, 270$ jours à humidité constante $h = 1$, avec les données expérimentales de (Komendant et al., 1976). Les paramètres matériaux dans cette simulation sont donnés dans le tableau 4.3.

Notre implémentation de la théorie MPS reproduit correctement ces données expérimentales obtenues sur béton à différents âges à température ambiante et à humidité constante.

Dans le but de vérifier dans le cas de la décharge ou de cycle de charge-décharge si notre implémentation de la théorie MPS est cohérente avec les précédentes implémentations (Bazant et al., 1997b, 2004; Jirasek and Havlasek, 2014) de la théorie nous proposons de confronter comme (Bazant et al., 1997b), notre modèle aux données expérimentales de (Ross, 1958). A ce titre nous avons utilisé les paramètres donnés par (Bazant and Prasannan, 1989b) que nous consignons dans le Tab. 4.4. La Fig 4.26, présente la confrontation de l'histoire de la déformation obtenue avec notre implémentation avec celles des données de (Ross, 1958). Une seconde confrontation pour un trajet de chargement plus complexe est faite sur la Fig. 4.27.

q_1	$8.6877 \times 10^{-6} MPa^{-1}$
q_2	$31.618 \times 10^{-6} MPa^{-1}$
q_4	$5.0 \times 10^{-6} MPa^{-1}$
α	0.6467
p	2
m	0.5

Tab 4.4 – Valeurs de paramètres matériaux optimisés par (Bazant and Prasannan, 1989b) sur les données de expérimentales de (Ross, 1958).

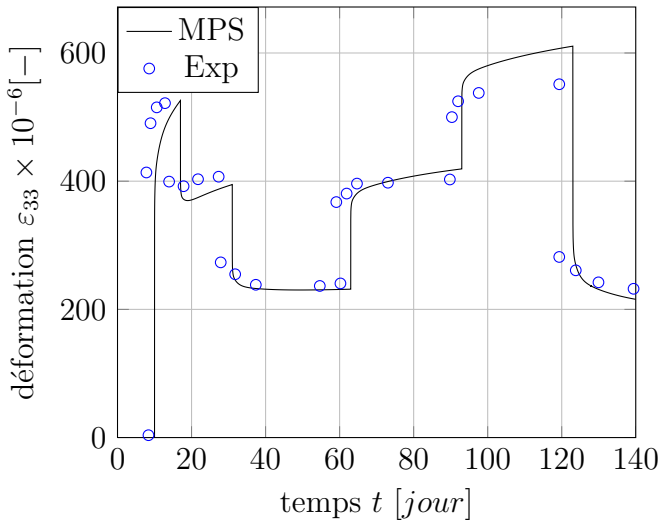


Fig 4.27 – Comparaison aux données expérimentales de (Ross, 1958) d'une réponse en fluage vieillissant d'un cycle de charge décharge à humidité constante $h = 1$. En noir : Mtest et en bleu : les données expérimentales.

.

Les précédentes comparaisons valident notre implémentation de la théorie MPS au moins dans le cas du fluage à humidité constante.

4.4.4.2 Simulations à humidité variable

En absence d'une solution exacte de la complaisance, dans la situation de l'humidité variable une validation par confrontation entre des simulations d'un point matériel sous Mfront avec la complaisance exacte n'est pas possible. Aussi, nous pouvons juste valider pour un point matériel les tendances de la complaisance, puisque par exemple la confrontation à des essais expérimentaux sur béton nécessite de simuler le séhage sur l'éprouvette de béton et d'ajouter un modèle d'endommagement pour être en mesure de comparer notre implémentation à celle de (Bazant et al., 1997b). Aussi, comme (Bazant et al., 1997a) nous avons rajouté un terme de retrait élastique $\boldsymbol{\varepsilon}^r$ à la précédente implémentation pour éffectuer les comparaisons présentées sur la Fig. 4.28,

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^r(t) = k^r \dot{h}(t)\mathbf{1}, \tag{4.109}$$

avec k^r un paramètre empirique. Les paramètres utilisés pour les simulations point matériel présentées sur la Fig 4.28, sont donnés dans le Tab. 4.5.

q_1	$24 \times 10^{-6} MPa^{-1}$
q_2	$53 \times 10^{-6} MPa^{-1}$
q_4	$5.78 \times 10^{-6} MPa^{-1}$
α	8.5×10^{-3}
p	2
m	0.5
c_0	$0.94 MPa^{-1} jour^{-1}$
c_1	$888.45 MPa$
k^r	0.00262
α_e	10
α_r	0.01
α_s	0.1

Tab 4.5 – Valeurs de paramètres matériaux optimisés par (Bazant et al., 1997b) sur les données de expérimentales de (L'Hermite et al., 1965).

La Fig. 4.28, nous donne une tendance correcte, la déformation totale de fluage lorsqu'on sèche simultanement le matériaux est plus importante que la déformation de fluage à humidité constante maintenue à $h = 100\%$.

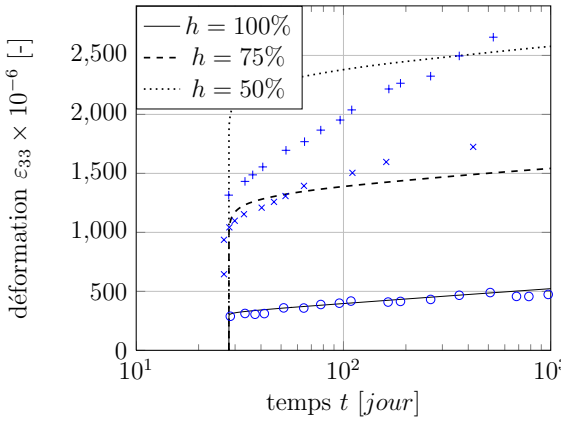


Fig 4.28 – Comparaison aux données expérimentales de (L'Hermite et al., 1965) de la tendance de la réponse en fluage séchant. En noir : Mtest et en bleu : les données expérimentales.

.

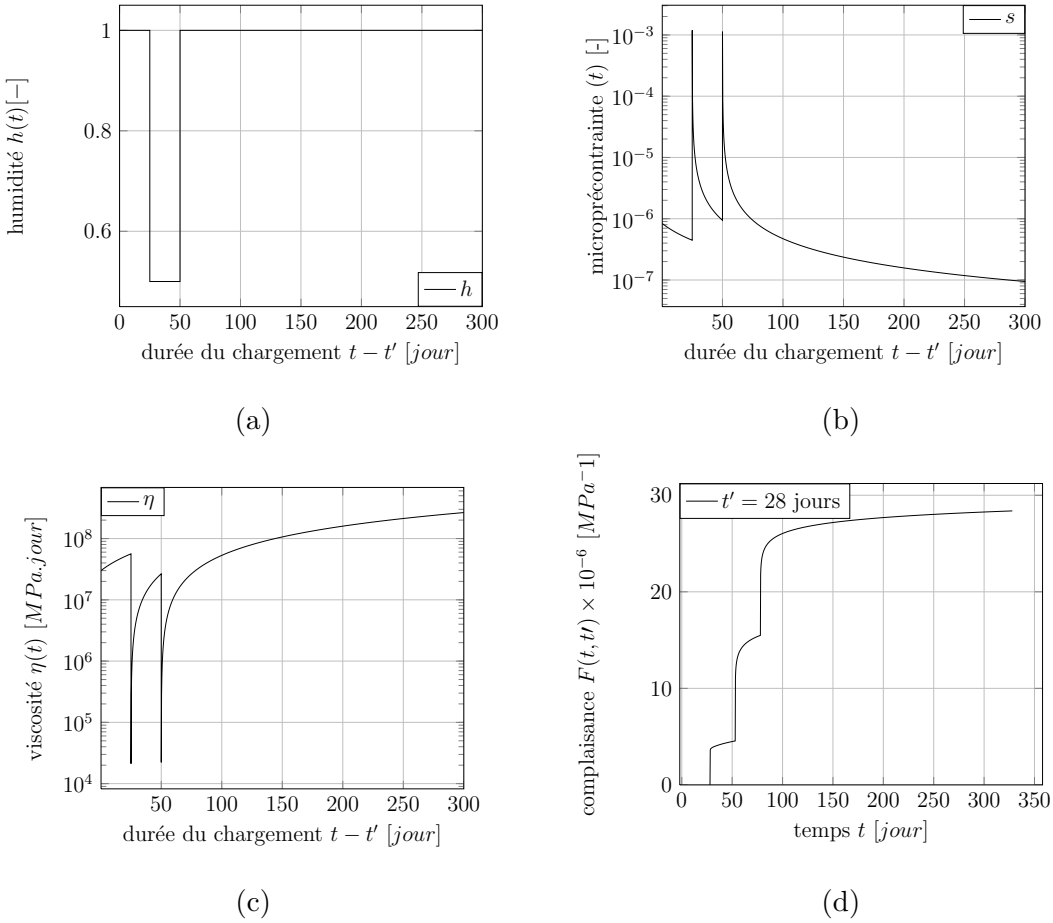


Fig 4.29 – Effet de l'humidité sur la déformation totale.(a) histoire de l'humidité, (b) variation de la microprécontrainte, (c) variation de la viscosité et (d) variation de la complaisance $F(t, t')$.

.

Anfin de mieux cerner ce qui se passe lors de la variation de l'humidité nous proposons de présenter la complaisance $F(t, t')$ de notre modèle MPS en absence du terme de retrait (Eq. (4.109)), et ceux pour un cycle de séchage-humidification. La Fig. 4.29-b, montre les variations de la microprécontrainte s avec l'humidité. Lorsque qu'on sèche $h \searrow$ ou qu'on humidifie $h \nearrow$, la microprécontrainte est augmentée selon le lien de relaxation par la variation de l'humidité défini à l'Eq. (4.41). Selon l'Eq. (4.40), la viscosité du terme de déformation visqueuse a une évolution inversement proportionnelle avec la microprécontrainte comme on peut le voir sur la Fig. 4.29-c. Dans les deux cas, séchage ou humidification, la viscosité est réduite entraînant systématiquement une augmentation de la déformation du terme visqueux, ce qui impacte directement la déformation totale du matériau (Fig. 4.29-d).

4.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons finalisé le développement de notre méthodologie nous permettant, d'étudier quantitativement la réponse mécanique d'une microstructure poreuse à morphologie complexe tel que celle du gel du C-S-H. Les développements et implémentations présentés dans ce chapitre concernent, les techniques mises en œuvre pour appliquer les éfforts hydriques en condition non saturée à l'échelle du réseau poreux et ce, en présence des contraintes de membrane, les techniques nous permettant de faire la moyenne des contraintes sur l'ensemble de la microstructure non saturée y compris des contraintes de membrane, et la loi de comportement viscolélastique vieillissante implémentée sous Mfront et donc directement utilisable sous Code_Aster. Dans la suite nous traiterons deux d'applications de notre méthodologie, d'abord au chapitre 5, nous abordons la thématique du rétrait/gonflement élastique des microstructures poreuses en conditions non saturées, et au chapitre 6, nous étudions la réponse complète des microstructures poreuses dans le cadre de la viscolélasticité non saturée.

Troisième partie

Une approche de modélisation multi physique des microstructures poreuses basée sur la méthode des éléments finis et la méthode de Boltzmann sur réseau : applications

Chapitre 5

Modélisation du retrait/gonflement élastique dans les microstructures poreuses à morphologie quelconque

Sommaire

5.1 Introduction **160**

5.2 Équations constitutives homogénéisées de l'élasticité non saturée . . . **160**

5.2.1 Sous-problème $(\mathcal{P}_1)$: $\overline{\varepsilon}_{kl} \neq 0,\ p^v = p^l = \gamma^{lv} = 0$ 161

5.2.2 Sous-problème $(\mathcal{P}_2)$: $p^l \neq 0,\ \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{0}, p^v = \gamma^{lv} = 0$ 163

5.2.3 Sous-problème $(\mathcal{P}_3)$: $p^v \neq 0,\ \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{0}, p^l = \gamma^{lv} = 0$ 164

5.2.4 Sous problème $(\mathcal{P}_4)$: $\gamma^{lv} \neq 0,\ \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{0}, p^l = p^v = 0$ 165

5.3 Homogénéisation numérique de l'élasticité non saturée par la méthodologie LBM-FEM **167**

5.3.1 Définitions des cas de chargement numérique et des propriétés poroélastiques associées 167

5.3.2 Microstructure périodique contenant des pores allongés selon $\mathbf{e}_3$ 168

5.3.3 Microstructure périodique à morphologie cubique centrée 178

5.4 Conclusion **184**

5.1 Introduction

Dans ce chapitre, le retrait/gonflement d'un milieu poreux ayant une phase solide élastique est traité dans le cadre de l'homogénéisation numérique. Dans l'approche proposée, une description explicite de la microstructure poreuse, et la distribution locale du liquide capillaire pendant les processus de séchage/humidification sont prises en compte. Dans ce contexte, le retrait/gonflement est une conséquence de la pression capillaire et des effets de la tension de surface sur le squelette solide (chapitre 4). L'approche hybride, combinant la méthode de Boltzmann sur réseau (SC LBM) et le méthode des éléments finis (FEM) développée au chapitre 4, est utilisée pour réaliser les simulations de la réponse de la microstructure. La SC LBM est utilisée pour décrire la distribution de l'eau capillaire dans la microstructure, tandis que la réponse élastique du squelette solide sous l'action des phases fluides est obtenue par la FEM, et ce pour des morphologies quelconques. Les paramètres des équations constitutives homogénéisées de l'élasticité en condition non saturée peuvent être obtenues pour des morphologies réalistes des phases liquide et vapeur. Enfin, les effets de la pression capillaire et de la tension de surface sur le retrait/gonflement sont comparés et discutés.

Dans ce chapitre, nous commençons par présenter les équations constitutives macroscopiques en faisant un rappel de la microporoélasticité en condition saturée. Ensuite, les exemples d'homogénéisation des propriétés de la poroélasticité non saturée sont données.

5.2 Équations constitutives homogénéisées de l'élasticité non saturée

La microporoélasticité en condition non saturée consiste à lier par homogénéisation, la contrainte macroscopique $\overline{\boldsymbol{\sigma}}$ et la variation de la porosité $\phi - \phi_0$ à la déformation macroscopique $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}$, à la pression capillaire $p_c = p^v - p^l$, aux tensions de surfaces $\gamma^{\alpha\beta}$ et à la pression de vapeur p^v pendant un processus de séchage et/ou humidification. Comme évoqué au chapitre 4, la moyenne des quantités microcopiques passe dans le cadre de l'élasticité en condition non saturée par la résolution du problème local suivant :

$$\begin{cases} \nabla \cdot d\boldsymbol{\sigma}^\alpha = \mathbf{0} \text{ dans } \Omega^\alpha,\ \alpha = s, l, v, \\ d\boldsymbol{\sigma}^s = \mathbb{C}^s : d\boldsymbol{\varepsilon}^s \text{ dans } \Omega^s, \\ d\boldsymbol{\sigma}^\alpha = -p^\alpha \mathbf{1} \text{ dans } \Omega^\alpha,\ \alpha = l, v, \\ d\boldsymbol{\sigma}^s \cdot \mathbf{n}^f = -p^v \mathbf{n}^f \text{ sur } \Gamma^{sf}, \\ d\boldsymbol{\sigma}^s \cdot \mathbf{n}^l = p_c \mathbf{n}^l \text{ sur } \Gamma^{sl}, \\ (d\boldsymbol{\sigma}^\alpha - d\boldsymbol{\sigma}^\beta) \cdot \mathbf{n}^\beta = d\gamma^{\alpha\beta} \mathcal{C} \mathbf{n}^\beta \text{ dans } \Gamma^{\alpha\beta}, \\ d\mathbf{u} = d\overline{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{x} + d\mathbf{u}^{\#,1} \ (d\mathbf{u}^{\#,1} \text{ périodique}). \end{cases} \tag{5.1}$$

ci-dessus, $d\boldsymbol{\sigma}^\alpha$ est un incrément de contrainte dans les phase solide, liquide et vapeur par rapport à la situation de référence (Fig. 4.4). Les variables $p^\alpha,\ \alpha = l, v$, sont les pressions dans les phases liquide et vapeur, $d\gamma^{\alpha\beta}$ représentent les incréments des tensions de surface définis à l'Eq

(4.19), $\mathbb{C}^s$ est le tenseur de rigidité élastique de la phase solide, $\mathbf{n}^\alpha$ désigne la normale unitaire à l'interface $\Gamma^{\alpha\beta}$ orientée vers le domaine Ω^β et $d\mathbf{u}$ symbolise un incrément de déplacement local. Etant donné la linéarité du problème (5.1) par rapport à $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}$, p^l, p^v et γ^{lv}, la construction des équations constitutives homogénéisées peut se faire en scindant ce problème noté $(\mathcal{P})$ en quatre sous problèmes $(\mathcal{P}_i), i = 1, 2, 3, 4$, ce qui nous permet d'identifier les équations constitutives homogénéisées de l'élasticité non saturée et les propriétés poroélastiques associées. La Fig. 5.1 présente ces sous problèmes définis en fonction des paramètres de chargement de la microstructure : il s'agit de la déformation macroscopique $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}$, de la pression capillaire p_c, de la pression de vapeur p^v et de la tension de surface liquide-vapeur γ^{lv}.

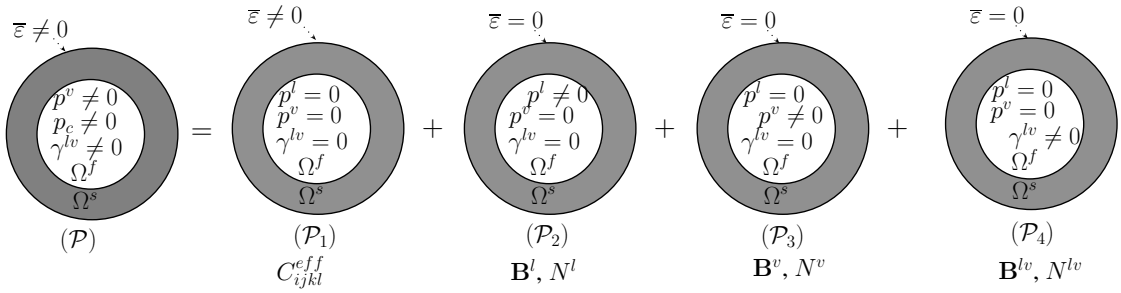


Fig 5.1 – Cas de chargement en poroélasticité non saturée.

Dans un soucis de clarté d'écriture, nous définissons l'opérateur $\langle\cdot\rangle$ et $\langle\cdot\rangle_\alpha$ pour les opérations de moyenne apparente et intrinsèque par

$$\langle a\rangle = \frac{1}{|\Omega|}\int_\Omega a(\mathbf{x})dv, \tag{5.2}$$

$$\langle a\rangle_\alpha = \frac{1}{|\Omega^\alpha|}\int_{\Omega^\alpha} a(\mathbf{x})dv, \tag{5.3}$$

$$\langle a\rangle_{\alpha\beta} = \frac{1}{|\Gamma^{\alpha\beta}|}\int_{\Gamma^{\alpha\beta}} a(\mathbf{x})ds, \tag{5.4}$$

où a est une quantité microscopique quelconque.

5.2.1 Sous-problème $(\mathcal{P}_1)$: $\overline{\varepsilon}_{kl} \neq 0,\ p^v = p^l = \gamma^{lv} = 0$

Dans le premier cas de chargement nous ne considèrons que $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}$ comme chargement, tandis que les chargements sont nuls :

$$\begin{cases} \nabla\cdot\boldsymbol{\sigma}^{s,1} = \mathbf{0} \text{ dans } \Omega^s, \\ \boldsymbol{\sigma}^{s,1} = \mathbb{C}^s : \boldsymbol{\varepsilon}^{s,1} \text{ dans } \Omega^s, \\ \mathbf{u}^{s,1} = \overline{\varepsilon}^1\cdot\mathbf{x} + \mathbf{u}^{\#,1} \ (\mathbf{u}^{\#,1} \text{ périodique}). \end{cases} \tag{5.5}$$

où l'exposant ^{1} fait référence au problème $(\mathcal{P}_1)$. Le problème $(\mathcal{P}_1)$ n'est rien d'autre que le problème micromécanique d'un milieu poreux vide, pour lequel nous pouvons lier du fait de sa

linéarité la déformation microscopique à la déformation macroscopique par le tenseur d'ordre 4 de localisation :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^1 = \mathbb{A} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^1, \tag{5.6}$$

où l'état initial en contrainte et en déformation initiales a été pris en compte. On a $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^1 = \langle \boldsymbol{\varepsilon}^1 \rangle = \langle \mathbb{A} \rangle : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^1$ et donc $\langle \mathbb{A} \rangle = \mathbb{I}$ où $\mathbb{I}$ est le tenseur d'identité d'ordre 4 défini par $I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$ avec δ_{ij} le symbole de Kronecker. Ainsi, les moyennes intrinsèques de $\langle \mathbb{A} \rangle_s$ et $\langle \mathbb{A} \rangle_f$ sur les domaines solide et pore vérifient la relation :

$$\langle \mathbb{A} \rangle = (1 - \phi_0)\langle \mathbb{A} \rangle_s + \phi_0 \langle \mathbb{A} \rangle_f = \mathbb{I}. \tag{5.7}$$

La première équation macroscopique correspondante est donnée par :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^1 = \langle \boldsymbol{\sigma}^1 \rangle = (1 - \phi_0)\langle \mathbb{C}^s : \mathbb{A} \rangle_s : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^1, \tag{5.8}$$

où $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^1$ est la contrainte macroscopique associée au problème $(\mathcal{P}_1)$. L'utilisation de (5.7) dans (5.8) nous permet de définir le tenseur de rigidité effectif du milieu poreux vide comme suit :

$$\mathbb{C}^{eff} = \mathbb{C}^s : (\mathbb{I} - \phi_0 \langle \mathbb{A} \rangle_f), \tag{5.9}$$

dans le cas d'une phase solide homogène, c'est à dire $\mathbb{C}^s$ est constant dans Ω^s. La seconde équation s'obtient en évaluant la variation de la porosité :

$$\phi_1 - \phi_0 = \phi_0 \mathrm{Tr} \langle \boldsymbol{\varepsilon}^1 \rangle_f \tag{5.10}$$

où ϕ_0 est la porosité initiale. Notons que,

$$\phi_0 \mathrm{Tr} \langle \boldsymbol{\varepsilon}^1 \rangle_f = \phi_0 \mathbf{1} : \langle \boldsymbol{\varepsilon}^1 \rangle_f = \phi_0 \mathbf{1} : \langle \mathbb{A} \rangle_f : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^1 \tag{5.11}$$

L'Eq. (5.11) nous permet de définir le tenseur d'ordre 2 de Biot saturé par,

$$\mathbf{B} = \phi_0 \mathbf{1} : \langle \mathbb{A} \rangle_f. \tag{5.12}$$

A partir des précédents dévéloppements les équations constitutives homogénéisées associées au problème $(\mathcal{P}_1)$ sont les suivantes :

$$\begin{cases} \bar{\boldsymbol{\sigma}}^1 = \mathbb{C}^{eff} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^1, \\ \phi_1 - \phi_0 = \mathbf{B} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^1. \end{cases} \tag{5.13}$$

5.2.2 Sous-problème $(\mathcal{P}_2)$: $p^l \neq 0,\ \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{0}, p^v = \gamma^{lv} = 0$

Dans le second cas de chargement nous considérons que seule la pression dans le phase liquide est non nulle :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\alpha,2} = \mathbf{0} \text{ dans } \Omega^\alpha,\ \alpha = s, l, \\ \boldsymbol{\sigma}^{s,2} = \mathbb{C}^s : \boldsymbol{\varepsilon}^s \text{ dans } \Omega^s, \\ \boldsymbol{\sigma}^{l,2} = -p^l \mathbf{1} \text{ dans } \Omega^l, \\ \boldsymbol{\sigma}^{s,2} \cdot \mathbf{n}^l = p^l \mathbf{n}^l \text{ sur } \Gamma^{sl}, \\ \mathbf{u}^2 = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^2 \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}^{\#,2} \ (\mathbf{u}^{\#,2} \text{ périodique}). \end{cases} \tag{5.14}$$

où l'exposant ^{2} fait référence au problème $(\mathcal{P}_2)$. La contrainte macroscopique correspondante $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^2$ est la moyenne de $\boldsymbol{\sigma}^2$ sur Ω. La détermination de $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^2$ se fait par le biais du Lemme de Hill-Mandel (Dormieux et al., 2006; Suquet, 1987) appliqué au champ de déformations microscopiques $\boldsymbol{\varepsilon}^1$ (du problème $(\mathcal{P}_1)$ où $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \neq 0$) et à celui du champ de contraintes microscopiques $\boldsymbol{\sigma}^2$:

$$\langle \boldsymbol{\sigma}^2 : \boldsymbol{\varepsilon}^1 \rangle = \bar{\boldsymbol{\sigma}}^2 : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^1. \tag{5.15}$$

Le terme de droite de l'Eq. (5.15) peut être réécrit sous la forme :

$$\langle \boldsymbol{\sigma}^2 : \boldsymbol{\varepsilon}^1 \rangle = (1 - \phi_0) \langle \boldsymbol{\varepsilon}^2 : \mathbb{C}^s : \boldsymbol{\varepsilon}^1 \rangle_s - p^l S_r \phi_0 \langle \mathbf{1} : \boldsymbol{\varepsilon}^1 \rangle_l, \tag{5.16}$$

où $S_r = |\Omega^l|/|\Omega^f|$ est le degré de saturation en liquide. En observant que dans ce cas de chargement $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^2 = 0$ et en utilisant une seconde fois le lemme de Hill-Mandel pour le champ de déformations $\boldsymbol{\varepsilon}^2$ et le champ de contrainte $\boldsymbol{\sigma}^1 = \mathbb{C}^s : \boldsymbol{\varepsilon}^1$ nous avons $(1 - \phi_0)\langle \boldsymbol{\varepsilon}^2 : \mathbb{C}^s : \boldsymbol{\varepsilon}^1 \rangle_s = 0$ et

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^2 = -p^l S_r \phi_0 \mathbf{1} : \langle \mathbb{A} \rangle_l : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^1, \tag{5.17}$$

où $S_r \phi_0$ est la fraction volumique de la phase liquide. L'Eq. (5.17), correspondant à une application directe du théorème de Levin (Dormieux et al., 2006; Laws, 1973; Levin, 1967), nous permet de définir le tenseur d'ordre 2 de Biot associé à la phase volumique liquide noté dans la suite par,

$$\mathbf{B}^l = S_r \phi_0 \mathbf{1} : \langle \mathbb{A} \rangle_l, \tag{5.18}$$

qui dépend de la moyenne intrinsèque du tenseur de localisation en condition vide (voir Eq. (5.6)) sur le domaine Ω^l. La connaissance du tenseur de localisation $\mathbb{A}$ sur le domaine Ω^l et de la forme géométrique du domaine liquide Ω^l suffit pour déterminer ce tenseur de Biot liquide. Ces deux pré-requis, comme nous le verrons dans la suite limitent sérieusement l'application des estimateurs micromécaniques analytiques courants dans le cadre de la non saturation.

La seconde équation s'obtient en évaluant la variation de la porosité en fonction de la seule pression en liquide imposée :

$$\phi_2 - \phi_0 = \phi_0 \mathrm{Tr} \langle \boldsymbol{\varepsilon}^2 \rangle_f. \tag{5.19}$$

Pour ce faire utilisons le fait que $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^2 = \mathbf{0}$, ce qui implique que :

$$\phi_0 \langle \boldsymbol{\varepsilon}^2 \rangle_f = -(1-\phi_0)\langle \boldsymbol{\varepsilon}^2 \rangle_s. \tag{5.20}$$

L'Eq. (5.20) nous permet d'exprimer $\langle \boldsymbol{\varepsilon}^2 \rangle_f$ en fonction de p^l. En effet, l'utilisation de la loi de comportement dans la phase solide nous permet d'écrire,

$$(1-\phi_0)\langle \boldsymbol{\varepsilon}^2 \rangle_s = (1-\phi_0)(\mathbb{C}^s)^{-1} : \langle \boldsymbol{\sigma}^2 \rangle_s. \tag{5.21}$$

La règle de moyenne apparente de la contrainte nous donne :

$$(1-\phi_0)\langle d\boldsymbol{\sigma}^2 \rangle_s = p^l(S_r\phi_0\mathbf{1} - \mathbf{B}^l). \tag{5.22}$$

Alors,

$$\phi_2 - \phi_0 = \mathbf{1} : (\mathbb{C}^s)^{-1} : (\mathbf{B}^l - S_r\phi_0\mathbf{1})p^l, \tag{5.23}$$

à partir de laquelle nous pouvons définir le module de Biot liquide N^l, par :

$$\frac{1}{N^l} = \mathbf{1} : (\mathbb{C}^s)^{-1} : (\mathbf{B}^l - S_r\phi_0\mathbf{1}). \tag{5.24}$$

Ce module de Biot dépend par son lien avec le tenseur de Biot liquide $\mathbf{B}^l$ de la morphologie de la phase liquide. Ainsi, comme pour le tenseur de Biot liquide, cela rend difficile l'utilisation des estimateurs micromécaniques analytiques classiques.

A partir des précédents dévéloppements les équations constitutives homogénéisées associées au problème $(\mathcal{P}_2)$ sont les suivantes :

$$\begin{cases} \bar{\boldsymbol{\sigma}}^2 = -\mathbf{B}^l p^l, \\ \phi_2 - \phi_0 = \frac{p^l}{N^l}. \end{cases} \tag{5.25}$$

5.2.3 Sous-problème $(\mathcal{P}_3)$: $p^v \neq 0$, $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{0}, p^l = \gamma^{lv} = 0$

Par analogie au cas de chargement précédent nous obtenons :

$$\begin{cases} \bar{\boldsymbol{\sigma}}^3 = -\mathbf{B}^v p^v, \\ \phi_3 - \phi_0 = \frac{p^v}{N^v}, \end{cases} \tag{5.26}$$

avec

$$\begin{cases} \mathbf{B}^v = (1-S_r)\phi_0\mathbf{1} : \langle \mathbb{A} \rangle_v, \\ \frac{1}{N^v} = \mathbf{1} : (\mathbb{C}^s)^{-1} : \left[\mathbf{B}^v - (1-S_r)\phi_0\mathbf{1}\right], \end{cases} \tag{5.27}$$

où $\mathbf{B}^v$ et N^v sont le tenseur et le module de Biot associés à la phase vapeur. Comme dans le cas de chargement précédent ces propriétés poroélastiques dépendent de la morphologie du domaine occupé par la vapeur et du tenseur de localisation associé, qui sont difficiles à approcher avec les estimateurs de la micromécanique analytique classique. Par ailleurs il est intéressant de

constater que $\mathbf{B}^l + \mathbf{B}^v = \phi_0 \mathbf{1} : [S_r \langle \mathbb{A} \rangle_l + (1 - S_r) \langle \mathbb{A} \rangle_v]$ alors que $\langle \mathbb{A} \rangle_f = S_r \langle \mathbb{A} \rangle_l + (1 - S_r) \langle \mathbb{A} \rangle_v$ ce qui fait que :

$$\mathbf{B}^l + \mathbf{B}^v = \phi_0 \mathbf{1} : \langle \mathbb{A} \rangle_f. \tag{5.28}$$

Ainsi selon la définition de $\mathbf{B}$ (Eq. (5.12)) nous avons :

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}^l + \mathbf{B}^v. \tag{5.29}$$

En introduisant la notion de pression capillaire telle que $p_c = p^v - p^l$ nous obtenons :

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}}^2 + \overline{\boldsymbol{\sigma}}^3 = \mathbf{B}^l p_c - \mathbf{B} p^v. \tag{5.30}$$

Cela se traduit directement pour les modules de Biot liquide et vapeur par,

$$\frac{1}{N} = \frac{1}{N^l} + \frac{1}{N^v} = \mathbf{1} : (\mathbb{C}^s)^{-1} : [\mathbf{B} - \phi_0 \mathbf{1}] \tag{5.31}$$

où N est le module de Biot en condition saturée. En utilisant l'Eq. (5.31) la variation du volume de l'espace poreux dans le cas des deux pressions différentes $p^l \neq p^v$ et non nulles peut aussi être exprimée en fonction de la pression capillaire par

$$(\phi_2 - \phi_0) + (\phi_3 - \phi_0) = -\frac{p_c}{N^l} + \frac{p^v}{N}, \tag{5.32}$$

ce qui est parfaitement cohérent avec l'idée de la pression capillaire seulement dans la phase liquide et la pression de vapeur dans tout le domaine poreux utilisé pour décrire le problème global $(\mathcal{P})$ donné en Eq. (5.1).

5.2.4 Sous problème $(\mathcal{P}_4)$: $\gamma^{lv} \neq 0$, $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{0}, p^l = p^v = 0$

Dans le dernier cas de chargement nous considérons que seule la tension capillaire aux interfaces solide-vapeur et liquide-vapeur est non nulle :

$$\begin{cases} \nabla \cdot d\boldsymbol{\sigma}^{s,4} = \mathbf{0} \text{ dans } \Omega^s, \\ d\boldsymbol{\sigma}^{s,4} = \mathbb{C}^s : d\boldsymbol{\varepsilon}^{s,4} \text{ dans } \Omega^s, \\ (d\boldsymbol{\sigma}^{\alpha} - d\boldsymbol{\sigma}^{\beta}) \cdot \mathbf{n}^{\beta} = d\gamma^{\alpha\beta} \mathcal{C} \mathbf{n}^{\beta} \text{ dans } \Gamma^{\alpha\beta}, \alpha\beta = sv, lv, \\ d\mathbf{u} = d\overline{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{x} + d\mathbf{u}^{\#,4} \ (d\mathbf{u}^{\#,4} \text{ périodique}). \end{cases} \tag{5.33}$$

avec l'incrément de tension de surface $d\gamma^{\alpha\beta}$ sur l'interface $\Gamma^{\alpha\beta}$ donné par les Eqs. (4.19)-(4.21). Nous conservons la formulation incrémentale pour ce sous-problème puisque dans la configuration de référence complètement saturée, la tension de surface solide-liquide est non nulle ($\gamma^{sl} \neq 0$) avec un état macroscopique de contrainte et de déformation nulles. Cependant, la contrainte microscopique de référence dans le squelette solide est non nulle ($\boldsymbol{\sigma}^{s,ref} = 0$) et est auto-équilibrée avec le chargement induit par γ^{sl} (voir Eq. (4.14)). L'utilisation du Théorème de Levin nous permet d'écrire :

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}}^4 = \left[\frac{|\Gamma^{sv}|}{|\Omega|}cos(\theta)\langle \mathbf{1}_T : \mathbb{A}\rangle_{sv} + \frac{|\Gamma^{lv}|}{|\Omega|}\langle \mathbf{1}_T : \mathbb{A}\rangle_{lv}\right]\gamma^{lv}, \tag{5.34}$$

introduisant $\mathbf{B}^{lv}$ tel que,

$$\mathbf{B}^{lv} = \left[\frac{|\Gamma^{sv}|}{|\Omega|}cos(\theta)\langle \mathbf{1}_T : \mathbb{A}\rangle_{sv} + \frac{|\Gamma^{lv}|}{|\Omega|}\langle \mathbf{1}_T : \mathbb{A}\rangle_{lv}\right]. \tag{5.35}$$

Le tenseur de second ordre $\mathbf{B}^{lv}$, appelé tenseur de Biot liquide-vapeur, est associé aux effets des tensions de surface $\gamma^{\alpha\beta}$. A partir de cette définition du coefficient de Biot liquide-vapeur, on comprend tout de suite l'impact sur le comportement macroscopique de l'angle de contact θ. En effet, dans le cas d'un liquide mouillant comme c'est le cas pour l'eau sur la phase solide du gel de C-S-H, l'hypothèse de la phase liquide parfaitement mouillante $\theta = 0^\circ$ est le cas le plus défavorable puisque $cos(\theta) = 1$; alors que pour des angles de mouillage intermédiaires $0^\circ < \theta < \pi/2^\circ$ de la phase liquide, nous avons $0 < cos(\theta) < 1$, ce qui réduit la contribution de l'interface solide-vapeur dans le calcul du coefficient de Biot liquide-vapeur. Aussi, même si nous négligeons les effets de l'adsorption dans cette thèse, nous pouvons constater qu'elle aura pour impact de modifier les tensions de surface solide-vapeur et solide-liquide, ce qui se traduit pendant le séchage par une variation de l'angle de mouillage (selon la loi de Young), alors cela reviendrait à réduire l'impact des effets de surface dans le comportement macroscopique.

La seconde équation d'état dans cette configuration s'obtient en évaluant :

$$\phi_4 - \phi_0 = \phi_0 \mathrm{Tr}\langle d\boldsymbol{\varepsilon}^4\rangle_f. \tag{5.36}$$

L'utilisation du même raisonnement que dans le cas des problèmes $(\mathcal{P}_2)$ et $(\mathcal{P}_3)$, nous permet de définir un module de Biot liquide-vapeur par

$$\frac{1}{N^{lv}} = \mathbf{1} : (\mathbb{C}^s)^{-1} : \left[\mathbf{B}^{lv} - \left(\frac{|\Gamma^{sv}|}{|\Omega|}cos(\theta)\langle \mathbf{1}_T\rangle_{sv} + \frac{|\Gamma^{lv}|}{|\Omega|}\langle \mathbf{1}_T\rangle_{lv}\right)\right] \tag{5.37}$$

Au terme de l'ensemble des 4 cas de chargement les lois de comportement macroscopique de la particule solide (Fig. 4.1-b), du milieu poreux non saturé s'obtiennent en écrivant $\overline{\boldsymbol{\sigma}} = \sum_{i=1}^4 \overline{\boldsymbol{\sigma}}^i$ et $\phi - \phi_0 = \sum_{i=1}^4(\phi_i - \phi_0)$:

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{C}^{eff} : \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} - \mathbf{B}p^v + \mathbf{B}^l p_c + \mathbf{B}^{lv}\gamma^{lv}, \tag{5.38}$$

et,

$$\phi - \phi_0 = \mathbf{B} : \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{p^v}{N} - \frac{p_c}{N^l} - \frac{\gamma^{lv}}{N^{lv}}, \tag{5.39}$$

avec les propriétés poroélastiques $\mathbb{C}^{eff}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{B}^l$, $\mathbf{B}^{lv}$, N, N^l et N^{lv} non saturées définies par les Eqs. (5.9), (5.12), (5.18), (5.35), (5.31), (5.24) et (5.37), respectivement. En particulier, les tenseurs et modules de Biot $\mathbf{B}^l$, $\mathbf{B}^{lv}$, N^l et N^{lv}, sont difficiles à approcher par des estimateurs micromécaniques analytiques tels que les **schémas dilué et de Mori-Tanaka**, utilisés au chapitre 4, puisque leur définition dépend de la connaissance de la morphologie du domaine

occupé par la phase liquide et de celle des interfaces solide-vapeur et liquide-vapeur et aussi des tenseurs de localisation appropriés dans ces différents domaines. Ainsi, la méthodologie numérique LBM-FEM proposée au chapitre 4 se montre alors très appropriée pour estimer pour des microstructures à morphologie quelconque ces propriétés matériaux. Aussi, l'Eq. (5.38) correspond à un modèle macroscopique utile pour la modélisation du retrait/gonflement élastique des microstructures poreuses.

5.3 Homogénéisation numérique de l'élasticité non saturée par la méthodologie LBM-FEM

5.3.1 Définitions des cas de chargement numérique et des propriétés poroélastiques associées

Comme évoqué précédemment les propriétés poroélastiques $\mathbf{B}^l$, $\mathbf{B}^{lv}$, N^l et N^{lv} ne peuvent être estimées avec précision que par une approche numérique. Nous proposons dans cette thèse l'utilisation de l'approche combinant la méthode de Boltzmann sur réseau , et la méthode des éléments finis, développée aux chapitres 3-4, pour traiter les cas de chargement faisant apparaître ces différentes propriétés matériaux. Ces cas de chargement sont définis comme suite :

Tenseur de rigidité effectif pour un espace poreux vide : La composante C^{eff}_{ijkl} du tenseur de rigidité effectif s'obtient dans le cas de chargement $\bar{\varepsilon}_{kl} = 1$, $\bar{\varepsilon}_{ij} = p^v = p^l = \gamma^{lv} = 0$ $(ij \neq kl)$ en effectuant la moyenne apparente du tenseur de contrainte de la phase solide :

$$C^{eff}_{ijkl} = \frac{(1-\phi_0)}{|\Omega^s|} \int_{\Omega^s} \sigma^s_{ij}(\mathbf{x}) dv. \tag{5.40}$$

Tenseur et module de Biot en condition saturée : Le tenseur $\mathbf{B}$ et le module N de Biot en condition saturée s'obtiennent dans le cas d'un chargement $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{0}$, $\gamma^{lv} = 0$ et $p^v = 1$ dans Ω^f comme suit :

$$\mathbf{B} = -\frac{(1-\phi_0)}{|\Omega^s|} \int_{\Omega^s} \boldsymbol{\sigma}^s(\mathbf{x}) dv + \phi_0 \mathbf{1}, \tag{5.41}$$

$$\frac{1}{N} = \phi_0 \mathrm{Tr} \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_f, \tag{5.42}$$

où la définition de la moyenne de la déformation du fluide est donnée par l'Eq. (4.12).

Tenseur et module de Biot liquide : Le tenseur $\mathbf{B}^l$ et le module N^l de Biot liquide en condition partiellement saturé s'obtiennent dans le cas d'un chargement $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{0}$, $\gamma^{lv} = p^v = 0$ et $p_c = 1$ dans Ω^l par

$$\mathbf{B}^l = \frac{(1-\phi_0)}{|\Omega^s|} \int_{\Omega^s} \boldsymbol{\sigma}^s(\mathbf{x}) dv + \phi_0 S_r \mathbf{1}. \tag{5.43}$$

Noter que N^l se calcule exactement comme N sauf que p_c existe seulement dans la phase liquide alors que p^v est dans le cas saturé non nul dans tout l'espace poreux.

Tenseur et module de Biot liquide-vapeur : Le tenseur $\mathbf{B}^{lv}$ et le module N^{lv} de Biot liquide-vapeur en condition partiellement saturée s'obtiennent dans le cas d'un chargement $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = 0$, $\gamma^{lv} = 1$ sur Γ^{lv} et Γ^{sv}, $p_c = p^v = 0$ en effectuant la moyenne apparente suivante :

$$\mathbf{B}^{lv} = \frac{(1-\phi_0)}{|\Omega^s|}\int_{\Omega^s} \boldsymbol{\sigma}^s(\mathbf{x})dv + \frac{1}{|\Omega|}\left[\int_{\Gamma^{lv}} \mathbf{1}_T(\mathbf{x})ds + cos(\theta)\int_{\Gamma^{sv}} \mathbf{1}_T(\mathbf{x})ds\right], \tag{5.44}$$

et N^{lv} se détermine exactement comme N et N^l pour le cas de chargement $\gamma^{lv} = 1$.

Dans toutes les applications qui suivent nous adoptons l'hypothèse de la phase liquide parfaitement mouillante, c'est à dire $\theta = 0^\circ$.

5.3.2 Microstructure périodique contenant des pores allongés selon $\mathbf{e}_3$

Dans cette partie nous étudions une microstructure d'un milieu poreux périodique constitué de pores ellipsoïdaux de revolution et allongés selon $\mathbf{e}_3$ (Fig. 3.12). La phase solide de la microstructure a un comportement élastique linéaire et isotrope avec un module de Young $E_s = 50GPa$ et un coefficient de Poisson $\nu_s = 0.25$. Les calculs d'équilibre thermodynamique des phases fluides, liquide et vapeur sont fait comme nous l'avons déjà décrit à la section 3.4.5.

Pore vide en présence d'une tension de surface sur toute l'interface solide-fluide : Comme en section 4.4.1, nous présentons ici l'évolution des module et tenseur de Biot liquide-vapeur en fonction de la porosité initiale ϕ_0, d'une microstructure périodique contenant des pores allongés selon $\mathbf{e}_3$. Dans cette application nous comparons les valeurs du module et du tenseur de Biot liquide-vapeur calculées par éléments finis, et par des estimateurs micromécaniques analytiques classiques. Comme précédemment, il s'agit des schémas dilué et de Mori-tanaka. Dans le cas du pore vide en présence d'une tension de surface à l'interface solide-fluide, nous avons à partir de l'Eq. (5.35) et sous l'hypothèse d'une phase liquide parfaitement mouillante :

$$\mathbf{B}^{lv} = \frac{|\Gamma^{sv}|}{|\Omega|}\langle \mathbf{1}_T : \mathbb{A}\rangle_{sv}, \tag{5.45}$$

$$\frac{1}{N^{lv}} = \mathbf{1} : (\mathbb{C}^s)^{-1} : \left(\mathbf{B}^{lv} - \frac{|\Gamma^{sv}|}{|\Omega|}\langle \mathbf{1}_T\rangle_{sv}\right). \tag{5.46}$$

Les schémas analytiques proposés ici, s'appuient sur la forte hypothèse suivante :

$$\mathbb{A} \simeq \langle \mathbb{A}\rangle_f, \tag{5.47}$$

avec $\mathbb{A}$ le tenseur de localisation de l'Eq. (5.45). Ainsi, nous obtenons :

$$\mathbf{B}^{lv} \simeq \frac{|\Gamma^{sv}|}{|\Omega|}\langle \mathbf{1}_T\rangle_{sv} : \langle \mathbb{A}\rangle_f. \tag{5.48}$$

Comme déjà souligné à la section 4.4.1, les estimateurs micromécaniques analytiques consistent à approcher $\langle \mathbb{A} \rangle_f$, dans le cas du schéma dilué par,

$$\langle \mathbb{A} \rangle_f \simeq \mathbb{A}^{dil}, \tag{5.49}$$

et dans celui du schéma de Mori-tanaka par,

$$\langle \mathbb{A} \rangle_f \simeq \mathbb{A}^{mt}, \tag{5.50}$$

avec $\mathbb{A}^{dil}$ et $\mathbb{A}^{mt}$ donnés par (4.90) et (4.91), respectivement. Dans le cas du pore à forme d'ellipsoïde de révolution allongée nous réécrivons $\mathbf{B}^{lv}$ sous la forme suivante,

$$\mathbf{B}^{lv} \simeq \phi_0 \mathbf{\Gamma} : \langle \mathbb{A} \rangle_f, \tag{5.51}$$

avec,

$$\mathbf{\Gamma} = \frac{1}{V_p} \int_{\Gamma^{sv}} \mathbf{1}_T ds \tag{5.52}$$

où V_p est le volume du pore.

Les détails du calcul de $\mathbf{\Gamma}$ sont donnés par (Dormieux et al., 2006). Pour déterminer $\mathbf{\Gamma}$ adoptons un système de coordonnées cylindriques, tel que $\mathbf{e}_\theta = \mathbf{e}_z \wedge \mathbf{e}_r$. La symétrie du problème montre que $\mathbf{\Gamma}$ est un tenseur isotrope transverse :

$$\mathbf{\Gamma} = G \left[\lambda \left(\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r + \mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{e}_\theta \right) + \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z \right]. \tag{5.53}$$

En notant que $\mathrm{Tr}\mathbf{\Gamma} = 2S_p/V_p$ avec S_p la surface du pore, nous avons la relation suivante, entre G et λ :

$$G(1 + 2\lambda) = 2S_p/V_p. \tag{5.54}$$

Déterminons d'abord G puis λ sera déduit de la relation donnée par l'Eq. (5.54). Notons par $\mathbf{t}$ le vecteur tangent à la partie supérieur de Γ^{sf}, notée Γ^{sf}_+ dans le plan de normale $\mathbf{e}_\theta$:

$$\mathbf{t} = \frac{r/R_x^2 \mathbf{e}_z - z/R_z^2 \mathbf{e}_r}{\sqrt{r^2/R_x^2 + R_z^2/c^4}}, \tag{5.55}$$

où R_x et R_z sont le petit rayon et le grand rayon de l'ellipsoïde de revolution allongé, tandis que (r, z) sont les coordonnées définies selon le répère donné sur la Fig. 3.12-b. Le tenseur identité $\mathbf{1}_T$ du plan tangent à l'interface est défini par :

$$\mathbf{1}_T = \mathbf{t} \otimes \mathbf{t} + \mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{e}_\theta. \tag{5.56}$$

En observant que $G = \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{\Gamma} \cdot \mathbf{e}_z$, une combinaison de l'Eq. (5.56) et (5.53) nous donne :

$$G = \frac{2}{V_p} \int_{\Gamma^{sf}_+} (\mathbf{t} \cdot \mathbf{e}_z)^2 ds. \tag{5.57}$$

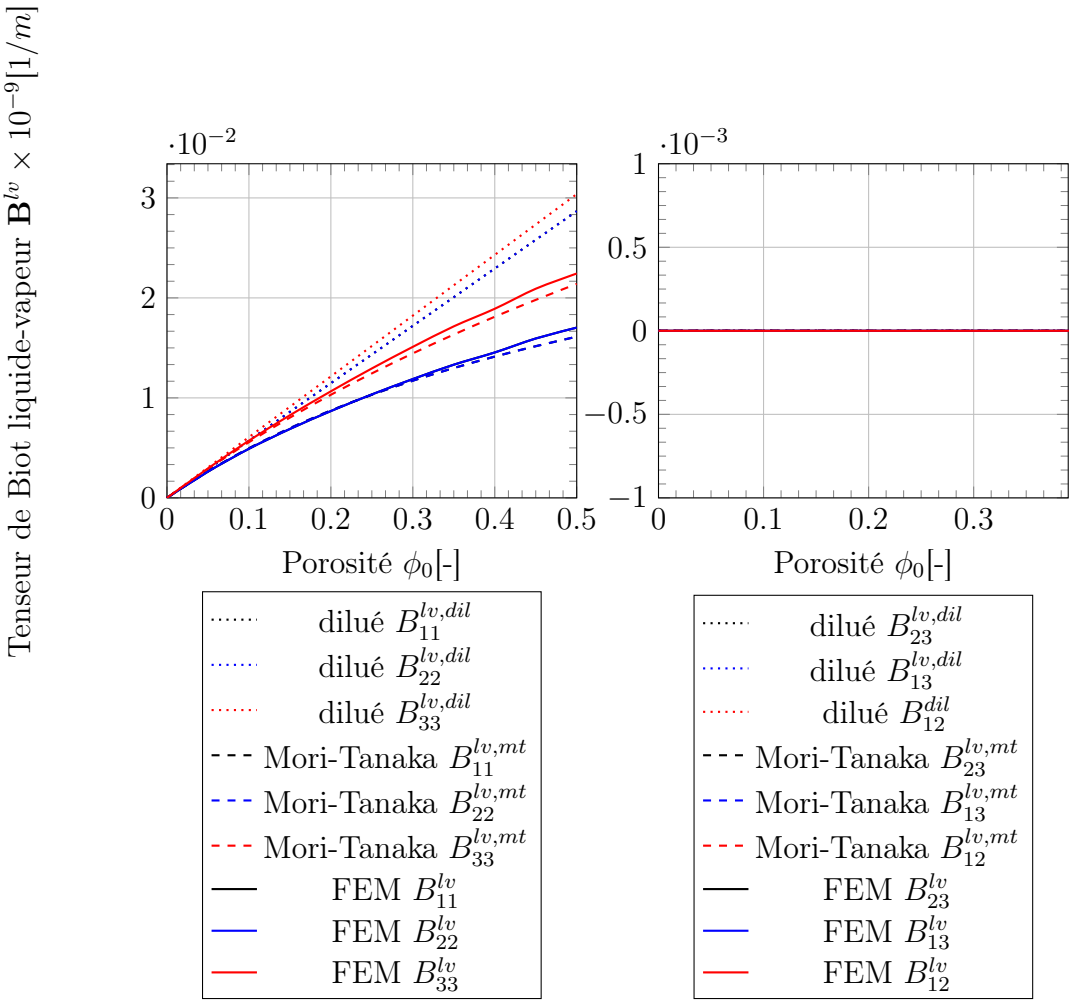


Fig 5.2 – Composantes du tenseur de Biot liquide-vapeur (seulement les effets de l'interface solide-vapeur) d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'ellipsoïde de révolution allongé.

Sur la portion supérieure de l'interface Γ_+^{sf} de l'ellipsoïde de révolution allongée, l'élément de surface est $ds = \delta(u)d\theta dz$ avec $u = z/R_z$ et $\delta(u) = a\sqrt{1+(\alpha^2-1)u^2}$, où $\alpha = R_x/R_z$ est le rapport d'aspect de forme de l'ellipsoïde. Cela nous donne alors

$$G = \frac{4\pi ac}{V_p}\int_0^1 \frac{1-u^2}{\sqrt{1+(\alpha^2-1)u^2}}du, \tag{5.58}$$

dans le cas du pore vide en présence de tension de surface sur toute l'interface solide-fluide. Enfin la surface et le volume du pore sont fournis par :

$$V_p = \frac{4}{3}\pi R_x^2 R_z, \tag{5.59}$$

$$S_p = 2\pi R_x \left[R_x + R_z \frac{\arcsin\left(\frac{\sqrt{R_z^2 - R_x^2}}{R_z}\right)}{\left(\frac{\sqrt{R_z^2 - R_x^2}}{R_z}\right)} \right]. \tag{5.60}$$

A partir des Eqs. (5.58), (5.54), (5.60), (5.53), (5.51) et (5.46), nous pouvons obtenir les approximations diluée et de Mori-Tanaka, du module et du tenseur de Biot liquide-vapeur.

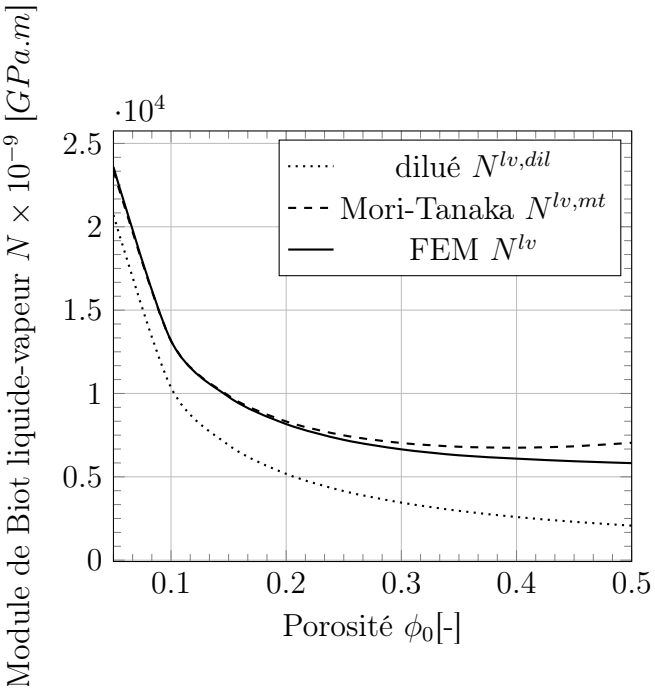


Fig 5.3 – Module de Biot liquide-vapeur d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'ellipsoïde de révolution allongé.

Nous présentons sur la Fig. 5.2, l'évolution des composantes du tenseur de Biot liquide-vapeur dans le cas d'un pore en forme d'ellipsoïde de révolution allongé vide en présence d'une tension de surface à l'interface solide-fluide. Nous y comparons les valeurs obtenues à partir des éléments finis décrit au chapitre 4 et noté FEM, à celles obtenues par les estimations du schéma dilué et de Mori-tanaka. Nous observons comme au chapitre 4, une bonne concordance des trois méthodes de calcul aux faibles porosités ou rapports surface sur volume. Pour les grandes porosités , les résultats FEM et du schéma de Mori-Tanaka restent proches. Nous pouvons en conclure que nous avons une nouvelle validation de notre implémentation des conditions aux limites périodiques, de nos algorithmes développés pour correctement imposer la contrainte de membrane à l'interface solide-fluide et pour faire le calcul de la moyenne de contrainte, en particulier celle de la contrainte de membrane. Sur le plan physique, on constate que, lorsque le rapport surface sur le volume du VER augmente, les valeurs non nulles du tenseur de Biot liquide-vapeur augmentent aussi, donnant d'avantage de l'importance aux effets de surfaces

dans le comportement macroscopique du milieu. On peut remarquer aussi que ce tenseur de Biot liquide-vapeur a une dimension $1/m$ du fait de sa dépendance au rapport surface sur volume, et donc pour des systèmes de pore nanométrique ou sub-nanométrique les termes de surface peuvent devenir non négligeables. Les mêmes observations de validations et physiques sont faites sur la Fig. 5.2, présentant le module de Biot liquide-vapeur.

Pore partiellement saturé : Contrairement aux cas limites saturé, vide ou vide en présence d'une tension de surface sur toute l'interface solide-fluide abordés précédemment (section 5.2, premier paragraphe de la section 5.3.2), nous nous intéressons maintenant au cas non saturé.

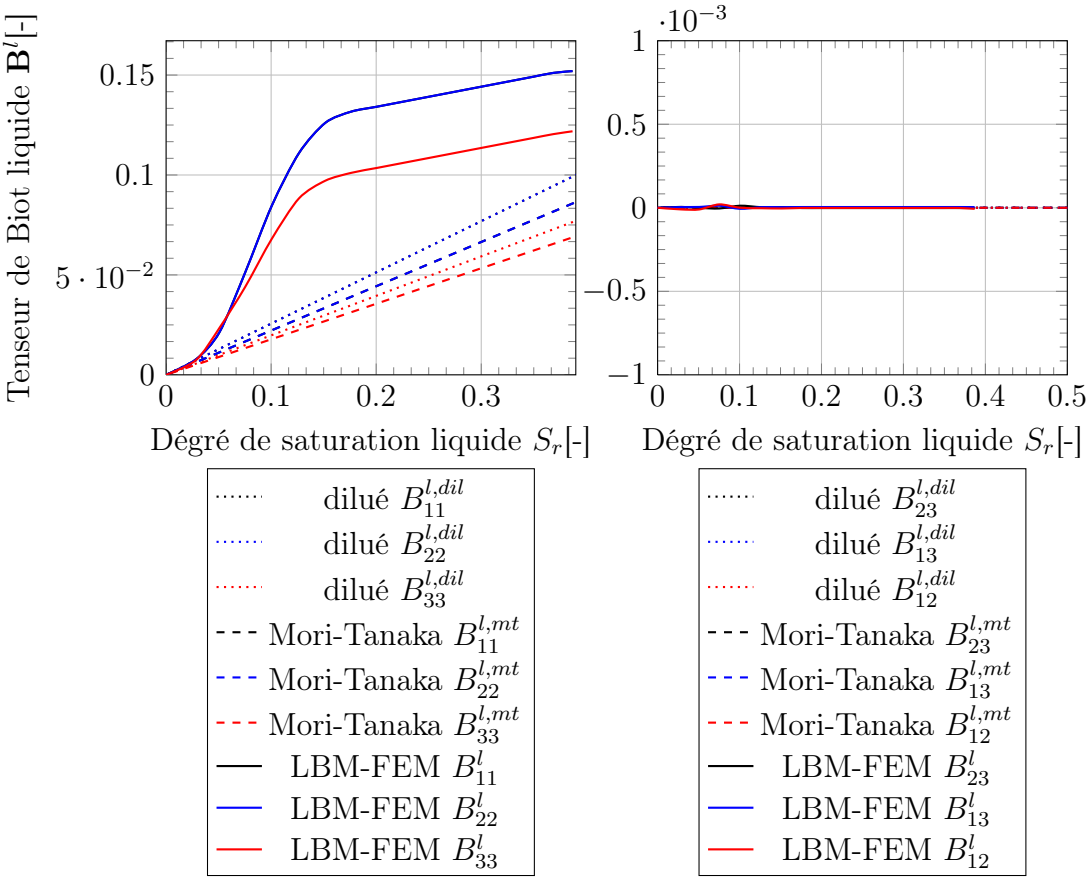


Fig 5.4 – Composantes du tenseur de Biot liquide en fonction du degré de saturation liquide d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'ellipsoïde de révolution allongé.

En effet, dans ce paragraphe nous étudions l'évolution du tenseur de Biot liquide $\mathbf{B}^l$ et de Biot liquide-vapeur $\mathbf{B}^{lv}$ en fonction du degré de saturation en liquide $S_r = \frac{|\Omega^l|}{|\Omega|}$, et ce dans le cas du pore de forme ellipoïdale allongée. Nous n'abordons pas l'étude des modules puisque comme nous l'avons précédemment montré ils se déduisent des tenseurs de Biot par les Eqs. (5.24)-(5.37), alors toutes les conclusions que nous pourrons faire pour le tenseur de Biot tiennent pour l'inverse des modules de Biot. Moyennant l'hypothèse couramment utilisée d'isomorphologie des

domaines liquide Ω^l et vapeur Ω^v, nous comparons nos résultats numériques aux estimations des schémas, dilué et de Mori-Tanaka. L'hypothèse d'isomorphologie se traduit par,

$$\langle \mathbb{A} \rangle_l \simeq \langle \mathbb{A} \rangle_v \simeq \langle \mathbb{A} \rangle_f. \tag{5.61}$$

Ainsi en faisant une approximation de $\langle \mathbb{A} \rangle_f$ par les tenseurs de localisation des schémas dilué et de Mori-Tanaka, nous pouvons estimer le tenseur Biot liquide par $\mathbf{B}^l \simeq S_r \mathbf{B}$ connus à partir de l'Eq. (5.12), et en déduire le module de Biot liquide N^l à partir de l'Eq. (5.24).

La Fig. 5.4 montre la comparaison entre les composantes du tenseur de Biot associé à la phase liquide, calculées par la méthodologie FEM-LBM, et par les schémas dilué et de Mori-Tanaka. Nous observons conformément à la morphologie du réseau poreux que le tenseur de Biot liquide calculé avec les trois méthodes est bien isotrope transverse, avec $B^l_{33} < B^l_{11} = B^l_{22}$. Néanmoins, l'hypothèse faite par les estimateurs analytiques montre ses limites puisqu'il ne se résume que par une relation linéaire entre le tenseur de Biot liquide et le degré de saturation contrairement à la méthode LBM-FEM. De plus, nous constatons que les estimateurs sous-estiment la contribution de la phase liquide au comportement macroscopique.

Par ailleurs, en ce qui concerne la contribution des effets de surface, à partir de cette hypothèse comme au paragraphe précédent, des Eq. (5.35) et (5.37), et de l'hypothèse de la phase liquide complètement mouillante, le tenseur et le module de Biot liquide-vapeur, $\mathbf{B}^{lv}$ et N^{lv} sont donnés par :

$$\mathbf{B}^{lv} \simeq \phi_0 \mathbf{\Gamma} : \langle \mathbb{A} \rangle_f, \tag{5.62}$$

$$\frac{1}{N^{lv}} \simeq \mathbf{1} : (\mathbb{C}^s)^{-1} : \left[\mathbf{B}^{lv} - \phi_0 \mathbf{\Gamma} \right] \tag{5.63}$$

avec

$$\mathbf{\Gamma} = \frac{1}{V_p} \int_{\Gamma^{sv} \cup \Gamma^{lv}} \mathbf{1}_T ds. \tag{5.64}$$

Á la différence du paragraphe précédent $\mathbf{\Gamma}$ considère les interfaces solide-vapeur et liquide-vapeur due à la non saturation.

Pour déterminer ce tenseur le même raisonnement qu'au paragraphe précédent est utilisé mais en prenant bien en compte la contribution des deux portions solide-vapeur et liquide-vapeur. Ainsi, selon (Dormieux et al., 2006), nous obtenons :

$$G = \frac{4\pi R_x R_z}{V_p} \int_0^{u_\star} \frac{1 - u^2}{\sqrt{1 + (\alpha^2 - 1) u^2}} du + \frac{4\pi R_0^2}{V_p} \int_0^{\beta} \sin^3 \delta d\delta, \tag{5.65}$$

$$\lambda = \frac{2|\Gamma^{sv}_+ \cup \Gamma^{lv}_+|}{V_p G} - \frac{1}{2}, \tag{5.66}$$

où $u_\star = z_\star / R_z$, R_0 et β sont décris sur la Fig. 3.12 ; nous avons

$$R_0 = R_x\sqrt{1+(\alpha^2-1)u_\star^2}, \tag{5.67}$$

$$\cos\beta = \frac{\alpha u_\star}{\sqrt{1+(\alpha^2-1)u_\star^2}}, \tag{5.68}$$

$$|\Gamma_+^{sv} \cup \Gamma^l v_+| = 2\pi R_x R_z \int_0^{u_\star} \sqrt{1+(\alpha^2-1)u^2}du + 2\pi R_0^2 \int_0^{\beta} \sin\delta d\delta. \tag{5.69}$$

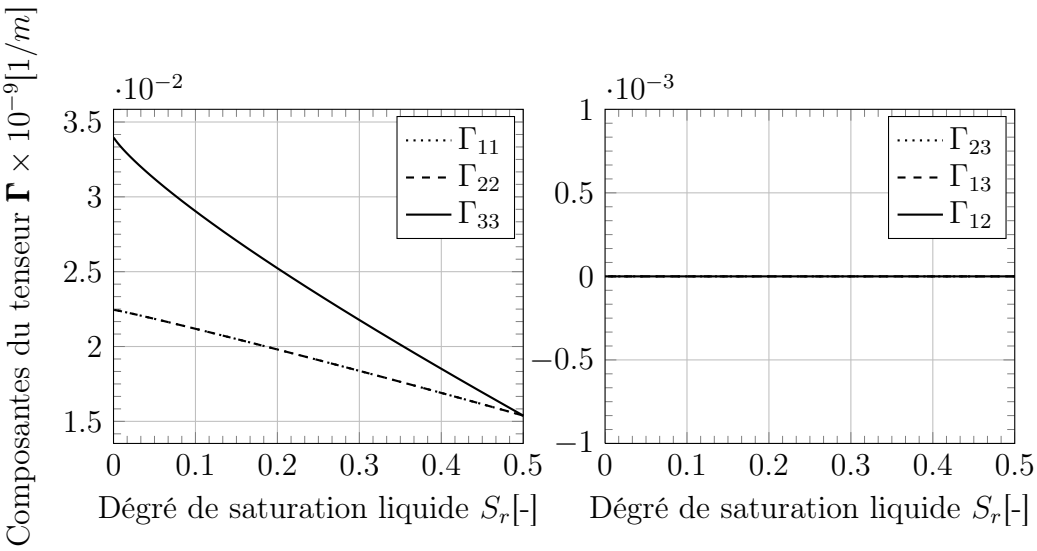


Fig 5.5 – Composantes du tenseur $\mathbf{\Gamma}$ (Eq. (5.64)) en fonction du degré de saturation liquide d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'ellipsoïde de révolution allongé, $\alpha = 1/2$.

Enfin $\mathbf{\Gamma}$ est donné par (5.53), et le degré de saturation S_r quand à lui, est exprimé par l'Eq. (3.70). La Fig 5.5, présente les composantes du tenseur $\mathbf{\Gamma}$ en fonction du degré de saturation S_r, et on y observe bien l'isotropie transverse de la contribution des effets de surface à la contrainte macroscopique aux basses saturations. On retrouve l'isotropie lorsqu'on a une bulle de vapeur sphérique qui a un contact ponctuel (ligne) avec l'interface solide-fluide. Cette dernière situation correspond à la formation d'une bulle de vapeur de rayon R_x, aussi pour les bulles de vapeur de rayon inférieur($< R_x$) la contribution de surface est isotrope et ne correspond qu'à la contribution associée à l'interface liquide-vapeur.

Il est aussi intéressant d'analyser la contribution des interfaces solide-vapeur et liquide-vapeur à la contribution totale de surface à la contrainte macroscopique. Pour ce faire, la Fig. 5.6 montre l'évolution des surfaces liquide-vapeur $|\Gamma^{lv}|$ et solide-vapeur $|\Gamma^{sv}|$ en fonction du degré de saturation en liquide S_r. Vers $S_r = 17\%$, nous observons que la surface de l'interface liquide-vapeur devient plus importante que celle de l'interface solide-vapeur. Cette observation est intéressante puisqu'elle nous permet de mieux appréhender le changement de pente observé

au-delà de cette saturation en liquide concernant les composantes du Biot liquide, Fig. 5.4. En effet, à partir de la Fig. 5.4, ce changement de pente pourrait se traduire physiquement par le fait que les effets de la surface solide-vapeur deviennent négligeables face à la pression capillaire à l'interface solide-liquide. Ceci se traduit pour le Biot liquide-vapeur par le fait que la contribution de l'interface liquide-vapeur devient prépondérante comparée à celle de l'interface solide-vapeur, Fig. 5.7.

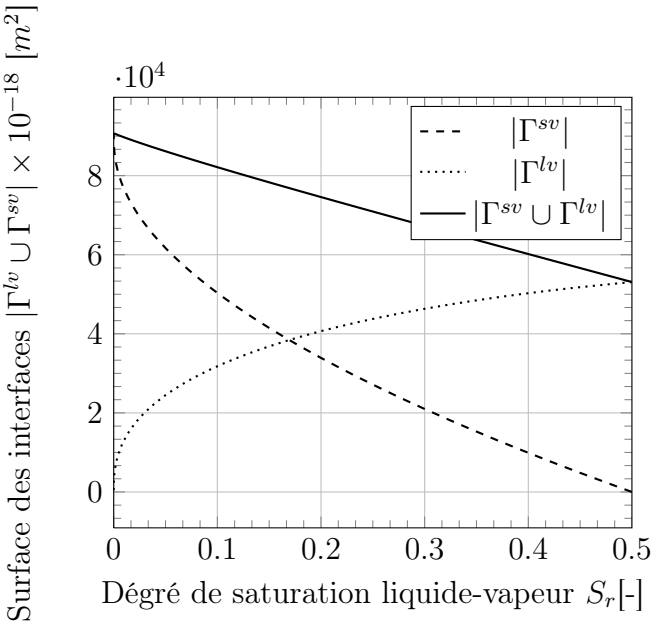


Fig 5.6 – Surface des interfaces liquide-vapeur $|\Gamma^{lv}|$ et solide-vapeur $|\Gamma^{sv}|$, $\alpha = 1/2$.

Sur la Fig. 5.7, nous montrons l'évolution du tenseur de Biot liquide-vapeur en fonction du degré de saturation en liquide. Comme dans le cas du Biot liquide nous observons bien l'isotropie transverse du matériau liée à sa morphologie aux basses saturations en liquide et ce avec $B^{lv}_{33} > B^{lv}_{11} = B^{lv}_{22}$. Sur le plan physique nous expliquons que la contribution B^{lv}_{33} des effets de surface soit plus importante que celle des deux autres directions par le fait que :

— la courbure locale signée dans cette direction soit plus grande,

— alors que cela se traduit pour les effets volumiques du liquide par une faible contribution au comportement macroscopique dans cette direction puisque cette direction est beaucoup plus rigide que les deux autres.

Les schémas dilué et de Mori-Tanaka sous-estiment la contribution des effets de surface et négligent complètement les différents régimes liés aux proportions des contributions associées aux différentes phases fluides et ce, du fait de l'hypothèse d'isomorphologie. On observe aussi sur la Fig. 5.7, un changement de pente lié au fait qu'en dessous d'une certaine saturation la contribution de l'interface liquide-vapeur devient plus importante. Ce seuil de saturation sur la

Fig. 5.7 se situe à environ $S_r = 12\%$ contrairement à $S_r = 17\%$ présenté sur la Fig. 5.6, cette différence vient du fait que la saturation sur la Fig. 5.6, est calculée à partir de l'Eq. 3.70 qui néglige complètement les épaisseurs des films que l'on a par la méthode LBM-FEM.

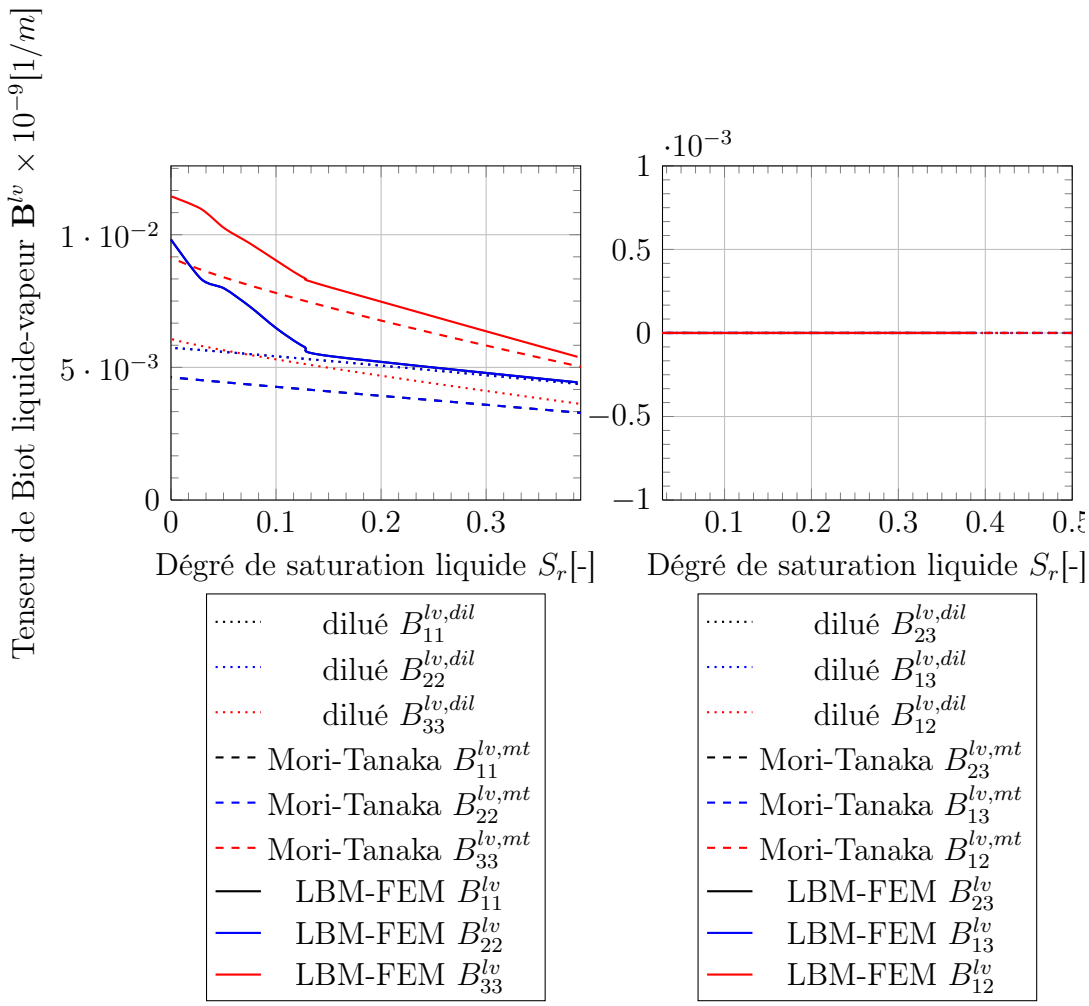


Fig 5.7 – Composantes du tenseur de Biot liquide-vapeur en fonction du degré de saturation liquide d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'ellipsoïde de révolution allongé $\alpha = 1/2$.

La Fig. 5.8, montre une comparaison des contributions des effets capillaires de volume $p_c \mathrm{Tr}\mathbf{B}^l$ et de surface $\gamma^{lv}\mathrm{Tr}\mathbf{B}^{lv}$ au comportement macroscopique donné par l'Eq. (5.38). Comme nous le soupçonnions déjà en observant les précédentes courbes, les effets de surface deviennent plus importants comparés aux effets volumiques de la capillarité seulement en desous de $S_r = 12\%$. Et comme déjà expliqué c'est en dessous de ce seuil que la contribution de l'interface solide-vapeur dévient aussi plus importante que celle de l'interface liquide-vapeur au comportement macroscopique.

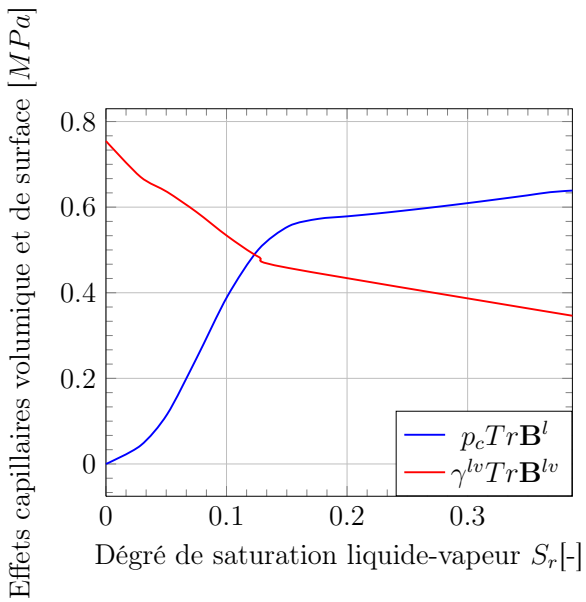


Fig 5.8 – Comparaison des effets capillaires de volume $p_c \mathrm{Tr}\mathbf{B}^l$ et de surface $\gamma^{lv}\mathrm{Tr}\mathbf{B}^{lv}$ d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'ellipsoïde de révolution allongé $\alpha = 1/2$.

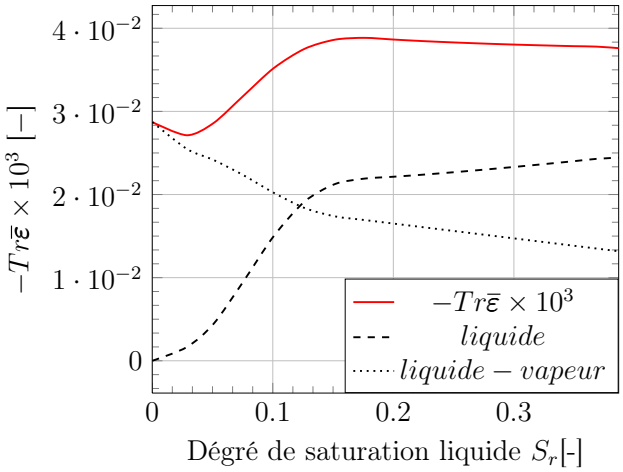


Fig 5.9 – Variation de volume induite par le séchage d'une microstructure périodique contenant des pores avec une forme d'ellipsoïde de révolution allongé $\alpha = 1/2$.

Enfin, pour conclure sur l'analyse du comportement non saturé des microstructures périodiques contenant des pores avec une forme d'ellipsoïde de révolution allongé (ici avec un rapport d'aspect de forme $\alpha = 1/2$), nous présentons sur la Fig. 5.9, la variation de volume induite lors du séchage d'une telle microstructure. La variation de volume induite lors du séchage en absence de contrainte macroscopique s'obtient à partir de l'Eq. 5.38 par :

$$\mathrm{Tr}\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = -\mathbf{1} : (\mathbb{C}^{eff})^{-1} : (p_c\mathbf{B}^l + \gamma^{lv}\mathbf{B}^{lv}), \tag{5.70}$$

où nous avons négligé la contribution associée à la pression de vapeur.

Nous observons au vu du signe négatif de la variation du volume par rapport à la configuration de référence, un retrait. Cependant, de la cinétique de ce retrait sur la Fig. 4.4 depuis l'état saturé jusqu'à l'état complètement vide, nous avons un retrait de $S_r = 10\%$ à environ $S_r = 12\%$, ensuite un gonflement jusqu'à environ $S_r = 6\%$. Dans la plage de saturation allant de $S_r = 12\%$ à $S_r = 6\%$ le gonflement est dû au fait que la pression capillaire n'a plus suffisamment de surface d'application à l'interface solide-fluide (l'interface solide-liquide tend vers zero) pour engendrer du retrait et que la tension de surface à l'interface solide-fluide n'a pas encore suffisamment de surface d'application (interface solide-vapeur et liquide-vapeur encore trop faible) pour le faire. Néanmoins, en dessous du second seuil de $S_r = 6\%$, la surface d'application de la tension de surface devient suffisante pour permettre à nouveau le retrait de la microstructure.

5.3.3 Microstructure périodique à morphologie cubique centrée

Considérons une microstructure périodique dont la phase solide a une morphologie cubique centrée comme illustrée sur la Fig. 3.15 soumis à un cycle de séchage/humidification. Nous entendons par cycle de séchage/humidification les trajets de pression capillaire présentés sur la Fig. 5.10. Les calculs de LBM sont réalisés selon la procédure déjà présentée à la section 3.4.6.1. Les propriétés élastiques de la phase solide sont, $E_s = 50\,GPa$ pour le module de Young et $\nu_s = 0.25$ pour le cœfficient de Poisson.

Hystérésis de la courbe capillaire : Pour ce système de pores nanométriques dont les caractéristiques du réseau poreux sont décrites à la Fig. 3.16, nous pouvons atteindre aux faibles saturations des pressions capillaires de l'ordre de 150 MPa. La Fig. 5.10 présente les chemins de séchage et d'humidification définis à partir des résultats de nos simulations de LBM. On y observe une hystérésis de la courbe de la pression capillaire en fonction du degré de saturation.

La Fig. 5.11 montre les champs de densité à l'échelle du pore à la même saturation sur le chemin de séchage (Fig. 5.11-a) et le chemin d'humidification (Fig. 5.11-b). L'observation de ces deux champs de densité des phases fluides nous permet d'expliquer en partie l'hystérésis des courbes capillaires par les effets de bouteilles d'encre. En effet, les ménisques liquides se situent dans les grands pores avec l'accroche de ceux-ci et des courbures de l'interface liquide-vapeur dans les petits pores vides pendant le séchage tandis qu'ils se situent dans les petits pores pendant l'humidification inversement avec leur accroche et les courbures des interfaces liquide-vapeur situés dans les grands pores.

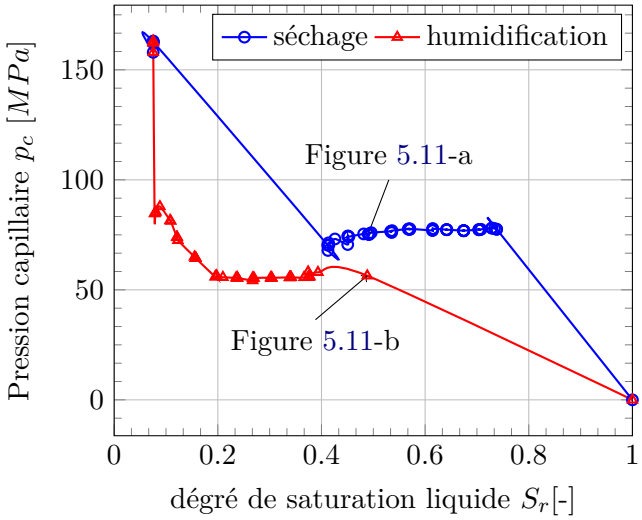


Fig 5.10 – Hystérésis d'un cycle de séchage/humidification d'une microstrcuture cubique centrée dont le VER à les dimensions $100 \times 100 \times 100\ nm^3$.

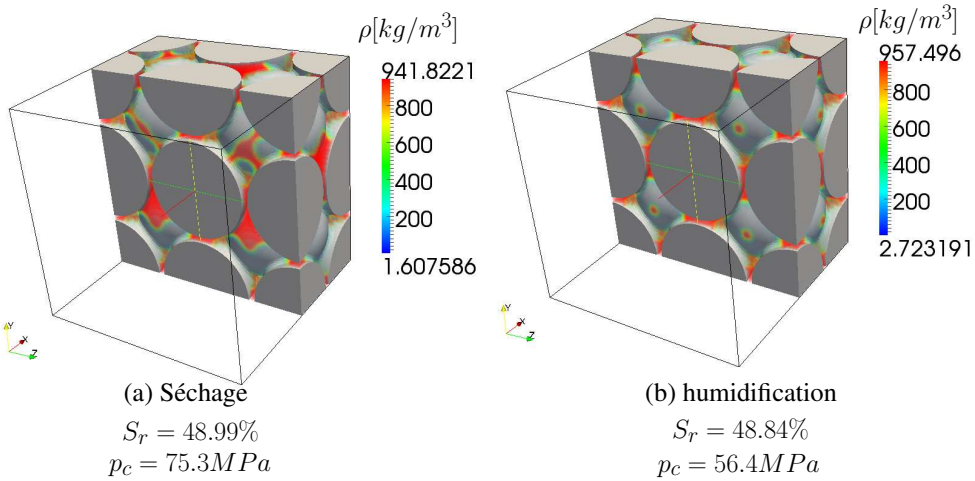


Fig 5.11 – Hystérésis de la courbe capillaire et distribution locale des ménisques liquides dans l'espace poreux.

Pour plus de clarté nous proposons une interprétation de l'hystérésis capillaire, lors des processus d'humidification/séchage, comme le remplissage et la vidange de pores microscopiques de forme sphéroïdale avec des rayons distincts. Les pores sont liés les uns avec les autres par de petits tubes capillaires comme c'est le cas pour la microstructure cubique centrée. Le volume de ces tubes capillaires est négligeable alors ces derniers influent très peu sur le degré de saturation macroscopique, néanmoins ils jouent un rôle primordial dans l'analyse de l'hystérésis.

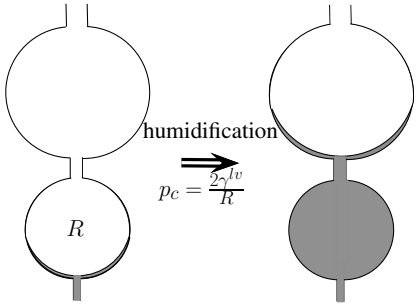


Fig 5.12 – Selon la loi de Laplace le remplissage d'un pore donné se produit lorsque la pression capillaire correspond au rayon R du pore.

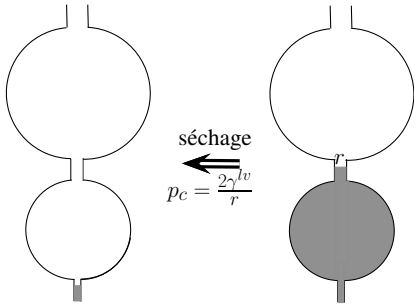


Fig 5.13 – Selon la loi de Laplace la vidange d'un pore donné se produit lorsque la pression capillaire correspond au rayon r d'accès.

Selon la loi de Laplace, le remplissage d'un pore donné se produit lorsque la pression capillaire correspond au rayon R du pore, Fig. 5.12, alors que, la vidange du même pore se produit lorsque la pression capillaire correspond au rayon r d'accès, Fig. 5.13. Ainsi, la faible contribution au degré de saturation des tubes capillaires de connexion des gros pores, fait que pour le même degré de saturation liquide, la pression capillaire est plus grande en séchage comparée à celle qu'on a en humidification.

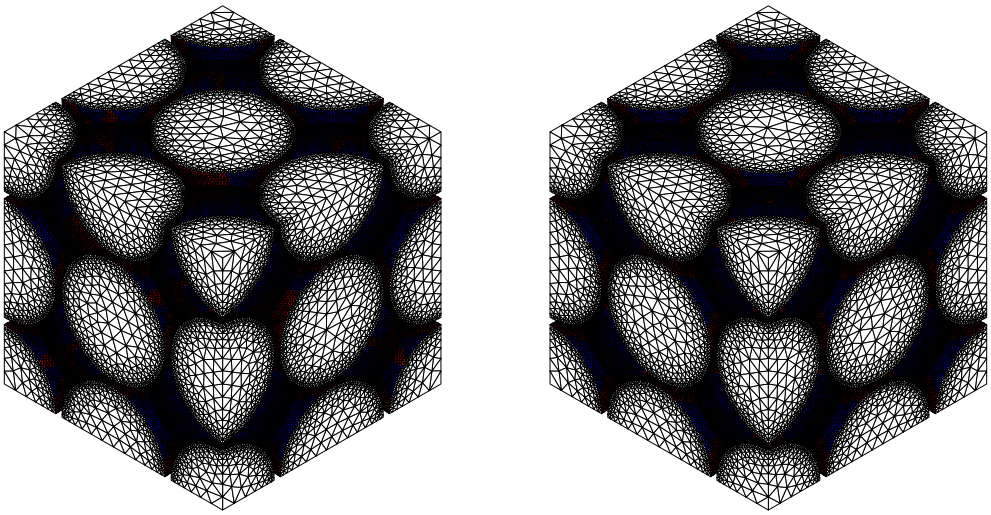
Équations d'état macroscopique : Les propriétés poroélastiques en condition non saturée de notre microstructure sont obtenues à partir de la méthodogie LBM-FEM. Une illustration des maillages utilisés pour les obtenir est donnée par la Fig. 5.14. Du fait de la symétrie de cette microstructure poreuse, les tenseurs de Biot sont isotropes :

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{C}^{eff} : \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} + p_c b^l \mathbf{1} + \gamma^{lv} b^{lv} \mathbf{1} - p^v b \mathbf{1}, \tag{5.71}$$

$$\phi - \phi_0 = b \operatorname{tr} \overline{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{p_c}{N^l} - \frac{\gamma^{lv}}{N^{lv}} + \frac{p^v}{N}. \tag{5.72}$$

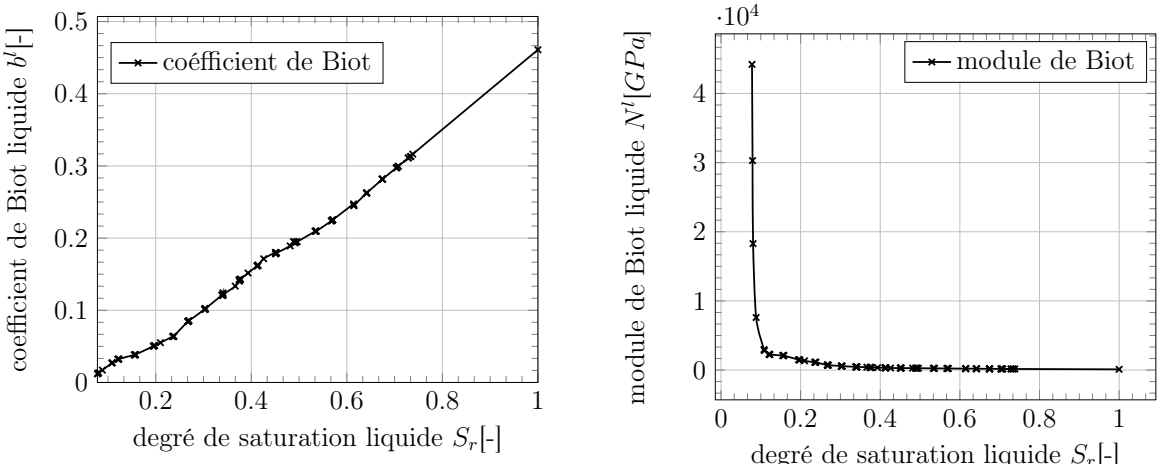
où b, b^l et b^{lv} sont les coefficients de Biot saturé, liquide et liquide-vapeur. Le tenseur de rigidité $\mathbb{C}^{eff}$ a une symétrie cubique par conséquent est entièrement déterminé par $C^{eff}_{1111} = C^{eff}_{2222} =$

$C^{eff}_{3333} = 34\,GPa$, $C^{eff}_{1212} = C^{eff}_{1313} = C^{eff}_{2323} = 24\,GPa$ et $C^{eff}_{1122} = C^{eff}_{1133} = C^{eff}_{2233} = 9\,GPa$. Le coefficient de Biot saturé est donné par $b = 0.461$.



(a) Séchage $S_r = 48.99\%$ (b) Humidification $S_r = 48.84\%$

Fig 5.14 – Maillage périodique utilisé dans les calculs LBM-FEM, constitué de tétrahèdres linéaires : 341842 nœuds, 1838095 tétrahèdres : interface solide-vapeur Γ^{sv} en bleu et interface solide-liquide Γ^{sl} en rouge.

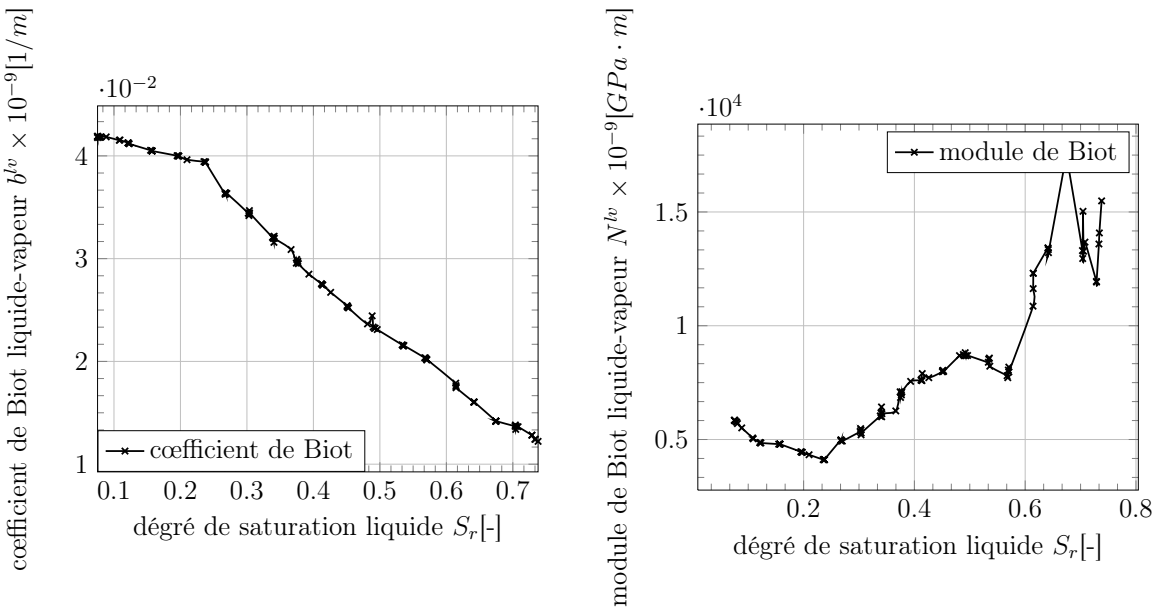


(a) Coefficient de Biot liquide (b) Module de Biot liquide

Fig 5.15 – Évolution du cœfficient (a) b^l et du module (b) N^l de Biot liquide en fonction du degré de saturation en liquide d'une microstructure cubique centrée.

La Fig. 5.15 montre que la contribution de la phase liquide au comportement macroscopique est indépendante dans le cas de la microstructure cubique centrée des processus de séchage et d'humidification. En effet, les distributions d'équilibre des ménisques pendant les processus de

séchage/humidification ont été considérés dans le calcul du coefficent et du module de Biot. Il est important de noter qu'il n'est pas nécessaire de faire un calcul incrémental dans le cas de l'élasticité et ce, pour une microstructure dont la phase solide est connectée. Aussi, nous nous rapprochons pour cette microstructure idéale cubique centrée de l'hypothèse d'isomorphologie des phases fluides présentées dans le cas de la microstructure contenant des pores allongés, puisque nous avons une relation quasi-linéaire entre le coefficient de Biot liquide et le degré de saturation. Il en est de même pour le module de Biot liquide.



(a) Cœfficient de Biot liquide-vapeur

(b) Module de Biot liquide-vapeur

Fig 5.16 – Évolution du cœfficient (a) b^{lv} et du module (b) N^{lv} de Biot liquide-vapeur en fonction du degré de saturation en liquide d'une microstructure cubique centrée.

La Fig. 5.16, montre que la contribution des effets de la tension de surface au comportement macroscopique est indépendante dans le cas de la microstructure cubique centrée des processus de séchage et d'humidification. Aussi, le coefficient de Biot liquide-vapeur est linéaire par morceau par rapport au degré de saturation, en présentant deux pentes. Nous pensons que la pente observée aux faibles degrés de saturation correspond au fait qu'il y ait une contribution non négligeable de l'interface solide-vapeur au comportement de la tension de surface à l'échelle macroscopique, tandis qu'au-delà d'environ $S_r = 22\%$, nous avons une nouvelle pente qui correspond au fait que la contribution de la tension de surface au comportement macroscopique soit entièrement dominée par l'interface liquide-vapeur. Le module de Biot liquide-vapeur présente une évolution en fonction de la saturation avec un bruit important. Néanmoins, force est de constater que nous y retrouvons bien les deux régimes précédemment identifiés dans le cas du coefficient de Biot liquide-vapeur.

Mécanismes et déformations induites par les processus de séchage/humidification : Dans ce paragraphe nous présentons le retrait/gonflement d'une microstructure cubique centrée. D'abord, pour comprendre le chargement, nous présentons sur la Fig. 5.17 les effets capillaires de volume $p_c b^l$ et de surface $\gamma^{lv} b^{lv}$ en fonction du degré de saturation en liquide.

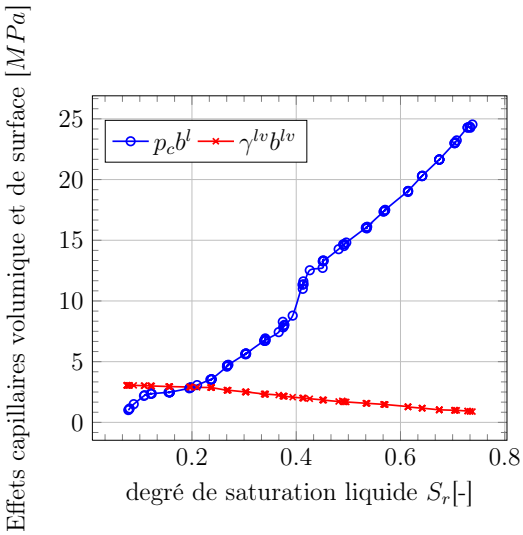
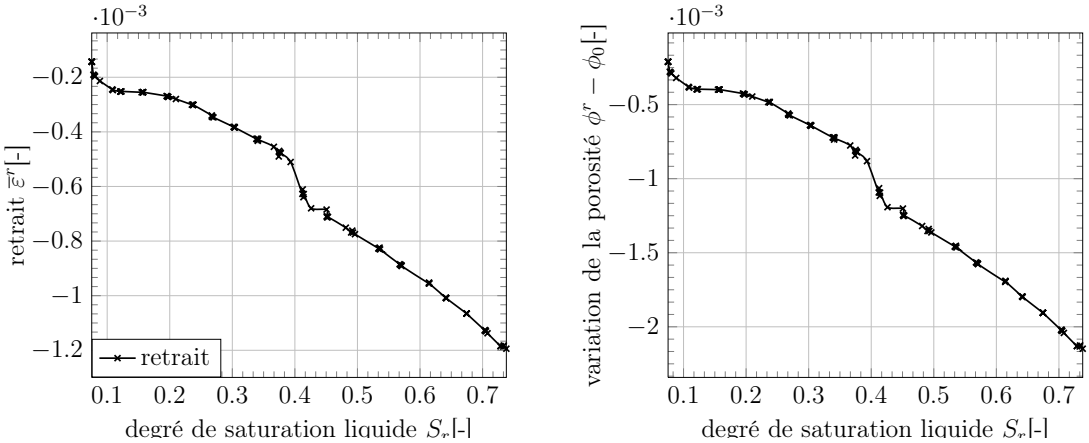


Fig 5.17 – Comparaison des effets capillaires de volume $p_c b^l$ et de surface $\gamma^{lv} b^{lv}$ d'une microstructure cubique centrée.



(a) retrait (b) variation de la porosité

Fig 5.18 – Variation de volume induite par le séchage d'une microstructure cubique centrée.

La Fig. 5.17, montre que les effets de la tension de surface dominent à faible degré de saturation, tandis que les effets de la pression capillaires deviennent prépondérants pour les hauts degrés de saturation en liquide. Les effets capillaires de volume et de surface sont dans

notre cas indépendants des processus de séchage et humidification. Par ailleurs, nous pouvons constater que les effets de la pression capillaire diminuent à mesure qu'on baisse le degré de saturation en liquide. Cela s'explique physiquement par le fait que, même si la pression capillaire atteint des valeurs très importantes (jusqu'à environ 150 MPa), les ménisques liquides sont très localisés à mesure que le degré de saturation décroît. Autrement dit, l' interface solide-liquide où s'applique la pression capillaire au solide devient quasiment ponctuelle aux très faibles degrés de saturation. Les effets de surfaces quant à eux deviennent importants à mesure que le degré de saturation en liquide diminue. En dessous du seuil de $S_r = 20\%$, nous observons que les effets de la tension de surface deviennent plus importants que ceux de la pression capillaire. Ce seuil du degré de saturation en liquide dépend du rapport surface sur volume ($|\Gamma^{sf}|/|\Omega|$, la surface spécifique) , de la morphologie du réseau poreux et donc de celle des ménisques liquides. Pour les microstructures comme celles du gel de C-S-H, où ce rapport surface sur volume est grand, ce seuil peut être plus grand que $Sr = 20\%$.

La Fig. 5.18 montre la déformation induite par un processus de séchage/humidification. Dans le cas du séchage, on rappelle que l'état de référence est choisi pour être l'état saturé pour une déformation et une contrainte macroscopique nulle sous l'hypothèse de mouillabilité parfaite de la phase liquide. La déformation de retrait ε^r et la variation de la porosité $\phi^r - \phi_0$ sont données par les expressions suivantes :

$$\overline{\varepsilon}^r = -(p_c b^l + \gamma^{lv} b^{lv}) \frac{\mathrm{Tr}(\mathbb{C}^{eff} : \mathbf{1})}{3}, \tag{5.73}$$

où nous négligeons la contribution de la pression de vapeur. La déformation $\overline{\varepsilon}^r$ est alors la déformation macroscopique volumique induite par la variation des termes capillaires de volume et de surface en condition de contrainte macroscopique libre. La variation de la porosité quant à elle est donnée par :

$$\phi^r - \phi_0 = 3b\overline{\varepsilon}^r - \frac{p_c}{N^l} - \frac{\gamma^{lv}}{N^{lv}}. \tag{5.74}$$

Puisque $\overline{\varepsilon}^r < 0$ et $\phi^r - \phi_0 < 0$, la pression capillaire et la tension de surface induisent du retrait. Dans le cas particulier de la microstructure poreuse cubique centrée, ce retrait est plus important pour les hautes saturations comparé aux faibles saturations en liquide. Cela finalement du point de vue de la cinétique de ce retrait depuis l'état saturé jusqu'à l'état vide, s'apparente à un retrait initial très important puis à un gonflement jusqu'à ce qu'on vide le reseau poreux.

5.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons proposé une application de la méthodologie LBM-FEM pour effectuer l'homogénéisation non saturée des microstructures poreuses à morphologie quelconque. Nous avons montré que la prise en compte de la morphologie réelle des ménisques du liquide capillaire dans le réseau poreux peut conduire à des régimes de retrait/gonflement variables

selon l'intensité de la pression capillaire, de la tension de surface et des surfaces de chargement sur le squelette solide. L'hypothèse courante sur la morphologie des phases fluides faite dans le cadre de l'application des méthodes d'homogénéisation analytique a montré ses limites. D'abord, elle n'est applicable que pour des morphologies simplifiées du réseau poreux tel que le cas de la microstructure périodique contenant des pores en forme d'ellipsoïde de revolution. Ensuite, parce qu'elle se résume à une relation de linéarité entre les tenseurs de Biot et le degré de saturation en liquide. Cette simplification comme nous l'avons montré dans le cas de l'ellipsoïde de revolution allongé n'arrive pas à correctement reproduire la physique du retrait. Enfin, nous avons au travers de l'exemple de la microstructure cubique centrée montré que notre méthodologie est applicable à des microstructures plus réalistes. Au chapitre 6, nous aborderons l'application de notre méthodologie pour simuler de manière unifiée les mécanismes de fluage et de retrait.

Chapitre 6

Modélisation unifiée des mécanismes de fluage et de retrait dans les microstructures poreuses à morphologie quelconque

Sommaire

6.1 Introduction **188**

6.2 Premières simulations par éléments finis sous Code_Aster de la théorie MPS **188**

6.2.1 simulations du fluage propre 189

6.2.2 simulations de l'effet Pickett 192

6.3 Homogénéisation numérique de la viscoélasticité linéaire vieillissante dans les microstructures poreuses vides ou saturées **194**

6.3.1 Microstructure périodique contenant des pores allongés selon $\mathbf{e}_3$ 195

6.3.2 Microstructure périodique à morphologie cubique centrée 199

6.4 Vers un modèle unifié pour les mécanismes de fluage et de retrait . . . **201**

6.5 Conclusion **202**

6.1 Introduction

Dans ce chapitre, la modélisation unifiée du fluage et du retrait des microstructures poreuses à morphologie quelconque est discutée sous l'angle de l'homogénéisation numérique. Nous proposons dans un premier temps de montrer que notre implémentation de la théorie MPS utilisée pour simuler un certain nombre de mécanismes élémentaires du fluage et du retrait dans la phase solide des microstructures poreuses est utilisable dans le cadre de calculs par la méthode des éléments finis. Nous proposons de façon heuristique des définitions de propriétés poro-viscoélastiques en régime non saturé pour un squelette solide homogène dont le comportement est viscoélastique vieillissant. Puis nous évaluons dans le cadre d'exemples numériques, la relaxation effective et le tenseur de Biot saturé. Sur la base de ces résultats préliminaires nous menons une discussion qui aboutit à une proposition de modèles empiriques permettant de modéliser de façon unifiée le fluage et le retrait du gel de C-S-H.

6.2 Premières simulations par éléments finis sous Code_Aster de la théorie MPS

Dans cette partie nous souhaitons valider notre implémentation Mfront de la théorie MPS sous Code_Aster. Pour ce faire nous reproduisons les tendances, présentées dans le cadre de simulations de la reponse d'un point matériel sous Mtest (voir section 4.4.4) ; en faisant cette fois-ci des calculs par éléments finis sur une éprouvette cylindrique. Le maillage utilisé pour ce calcul est présenté dans la Fig. 6.1. Ce maillage en 3D n'est volontairement pas optimisé (en toute rigueur un modèle 2-D axisymétrique de faible hauteur de la moitié de l'éprouvette suffirait), puisque nous souhaitons réutiliser la mise en donnée sous Code_Aster de ce cas, dans nos futurs calculs concernant des microstructures poreuses dont le maillage comporte un grand nombre d'éléments (plus d'un million de tétrahèdres).

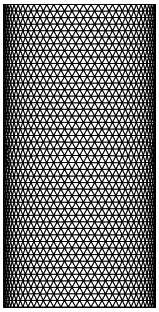


Fig 6.1 – Maillage linéaire d'une éprouvette cylindrique de diamètre 16 cm et de hauteur 32 cm (11217 noeuds et 54983 tetrahèdres).

Nous nous intéressons à la réponse en fluage uniaxial de cette éprouvette pour différents

trajets de chargement. L'éprouvette est alors soumise à une histoire de pression uniforme sur sa face supérieure (notée "haut") $p(x, y, z = z_{max}, t) = p(t)$, $u_3(x, y, z = z_{min}) = 0$ sur la face inférieure (notée "bas") et $u(x = 0, y = 0, z = zmin) = 0$, pour éviter les mouvements de corps rigide. Il est important de souligner qu'une pression négative correspond à une traction et une pression positive à une compression contrairement à la convention en mécanique des solides. Les données matériaux utilisées dans les calculs qui suivent sont les mêmes que celles des Tab. 4.1 et 4.5. Dans toutes les simulations qui suivent, nous ne resolvons pas de problème de séchage dans l'épaisseur de l'éprouvette cylindrique. Pour nos calculs nous considérons un état d'humidité homogène dans toute l'éprouvette.

6.2.1 simulations du fluage propre

Sur la Fig. 6.2, nous présentons les effets de l'âge du matériau sur la réponse en fluage de l'éprouvette cylindrique. Nous présentons sur les Fig. 6.2 (a) et (b), la discrétisation des histoires de la pression et de l'humidité utilisée dans les calculs par éléments finis. Nous pouvons constater une évolution exponentielle du pas de temps de calcul, montrant la capacité de l'algorithme exponentiel à intégrer dans le cadre d'un calcul par éléments finis la réponse du matériau pour des pas de temps de plus en plus grand et ce, avec une très bonne précision (Bazant, 1971).

De plus, nous montrons sur les Fig. 6.2 (c) et (d), les composantes non nulles ε_{11}, ε_{22} et ε_{33} de la déformation pour ce cas. L'effet du vieillissement du matériau sur sa réponse en fluage propre est correctement reproduit par le calcul aux éléments finis.

La Fig. 6.3 montre la réponse de l'éprouvette cylindrique pour des cycles de charge/décharge de la pression imposée (Fig. 6.3-a). Nous remarquons que nous obtenons les tendances attendues par le modèle.

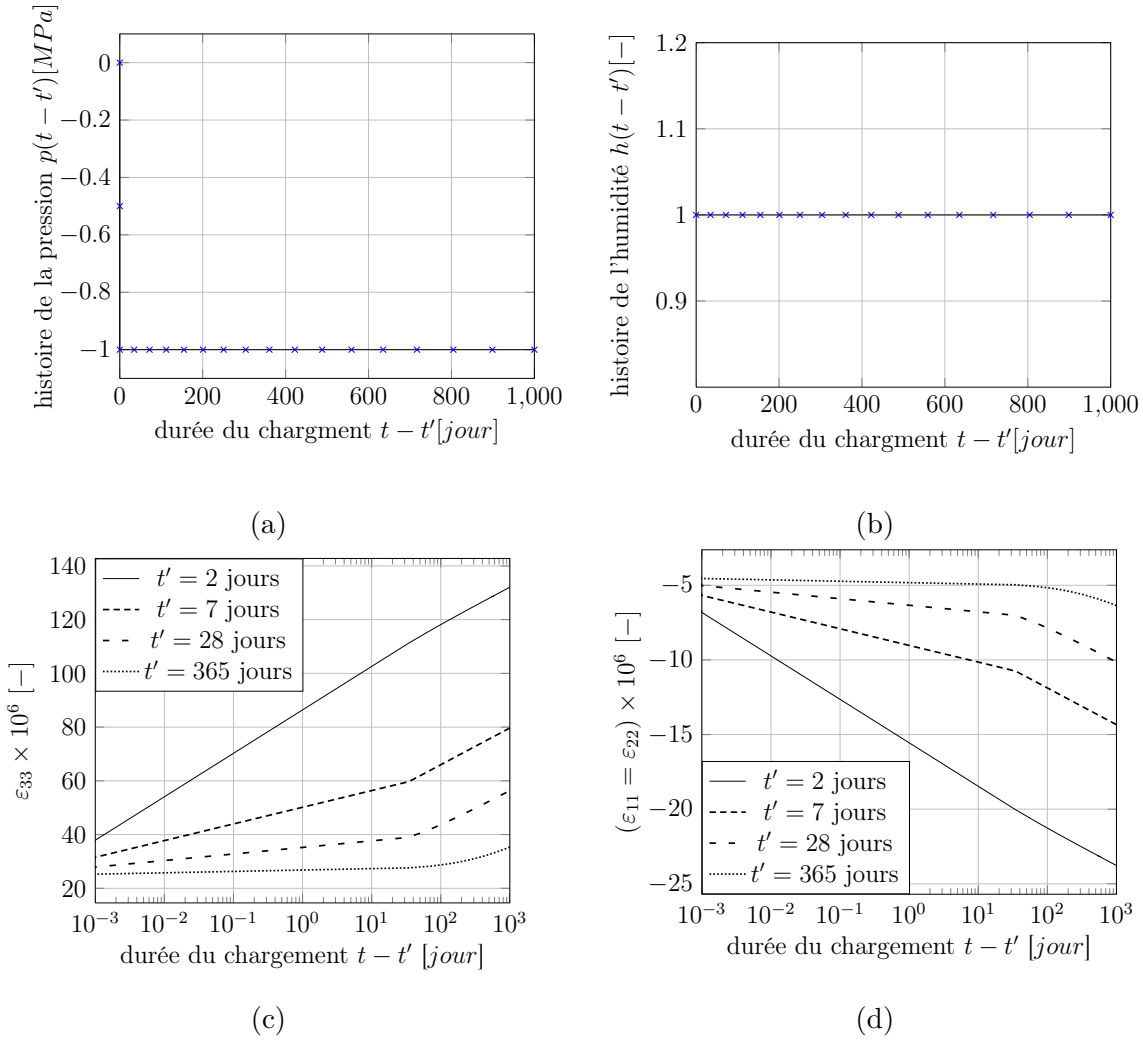


Fig 6.2 – Effet du vieillissement du matériau sur sa réponse en fluage propre.(a) histoire de la pression, (b) histoire de l'humidité, (c) composante ε_{33} de la déformation et (d) les composantes ε_{11}, ε_{22} de la déformation.

.

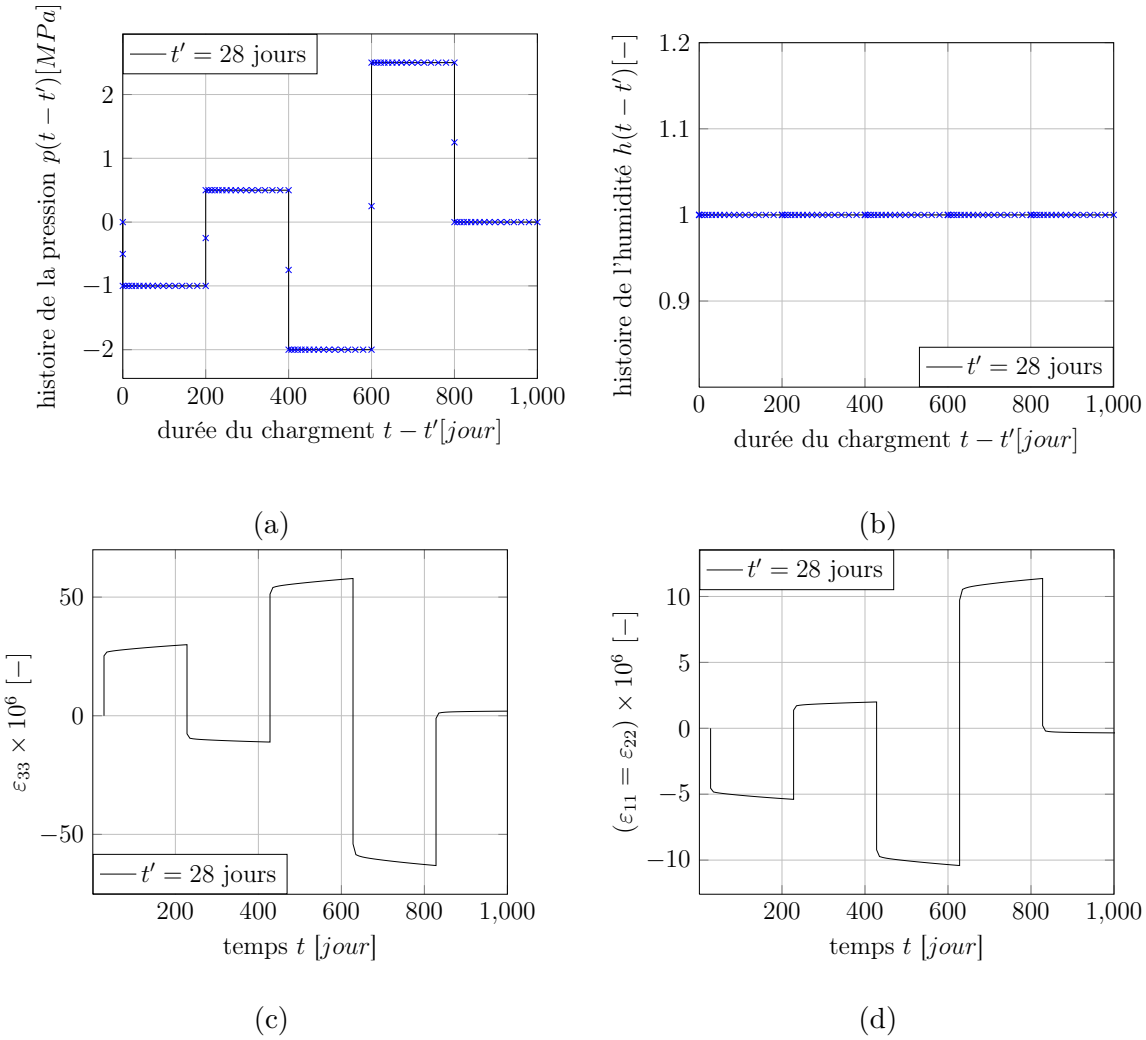


Fig 6.3 – Réponse de l'éprouvette pour des cycles de charge-décharge de la pression.(a) histoire de la pression ; (b) histoire de l'humidité ; (c) composante ε_{33} de la déformation et (d) les composantes ε_{11}, ε_{22} de la déformation.

.

6.2.2 simulations de l'effet Pickett

Dans cette partie nous proposons de réaliser des simulations avec la même éprouvette cylindrique et les mêmes conditions aux limites, mais nous nous plaçons dans le cas d'une humidité variable ou constante mais avec $h \leq 100\%$. L'idée est de montrer que même dans le cas du calcul par éléments finis le modèle reproduit bien l'effet Pickett, c'est à dire la réponse en fluage propre est plus faible aux basses humidités internes, pourtant elle est plus grande dans le cas du fluage avec séchage simultané. Pour ce faire, nous rajoutons le terme de déformation de retrait élastique donné par l'Eq. (4.109) au modèle.

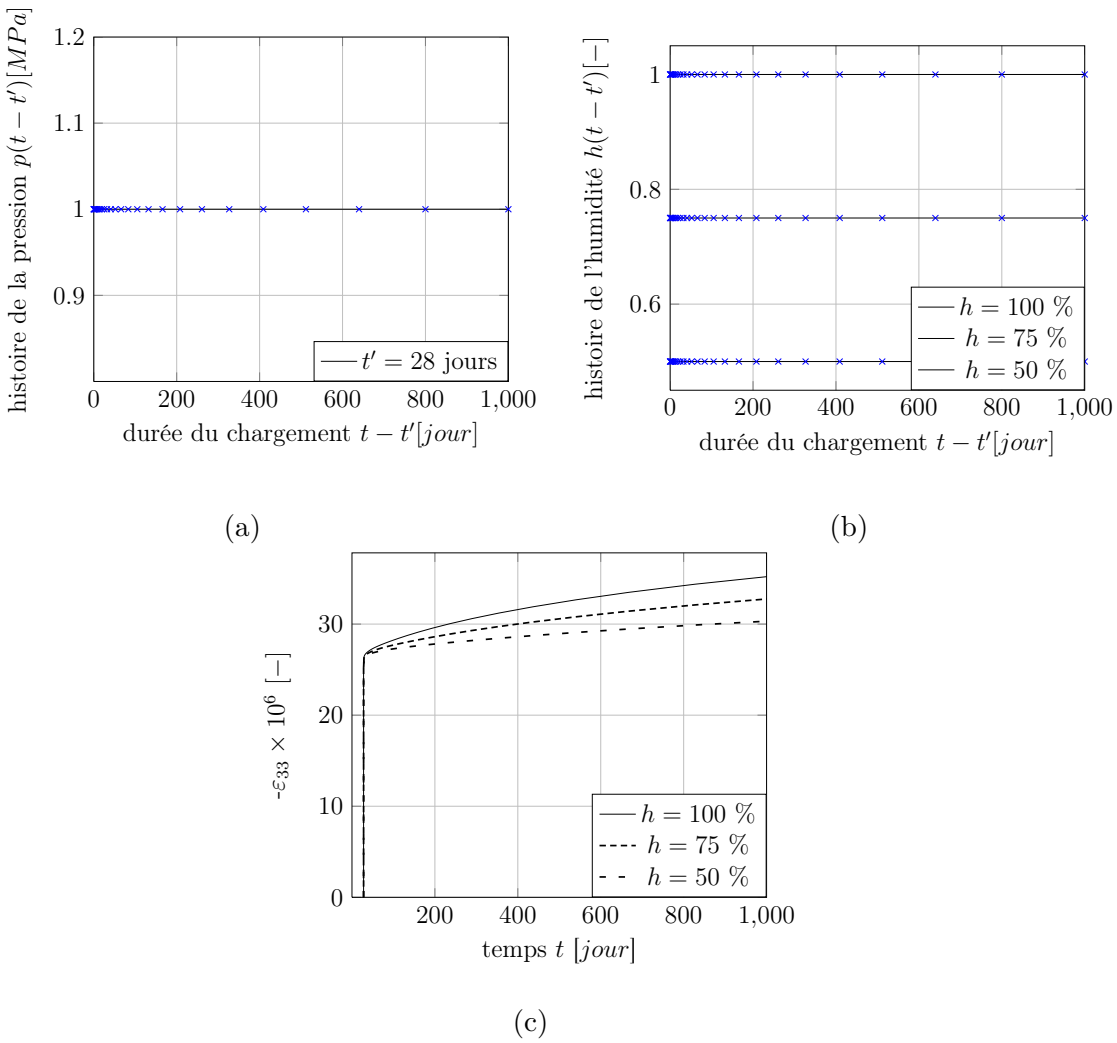


Fig 6.4 – Réponse en fluage propre de l'éprouvette à différentes humidités.(a) histoire de la pression, (b) histoire de l'humidité, (c) composante ε_{33} de la déformation.

.

Sur la Fig. 6.4, nous présentons la réponse en fluage propre de l'éprouvette pour différentes humidités internes de celle-ci. Nous aboutissons à la conclusion attendue qui est qu'aux basses

humidités le fluage propre est plus faible. Physiquement, cela correspond au mécanisme de réduction du processus de glissement de cisaillement à l'échelle des C-S-H qui est prépondérant par rapport à la réduction de l'hydratation qui a l'effet contraire d'accroître le fluage.

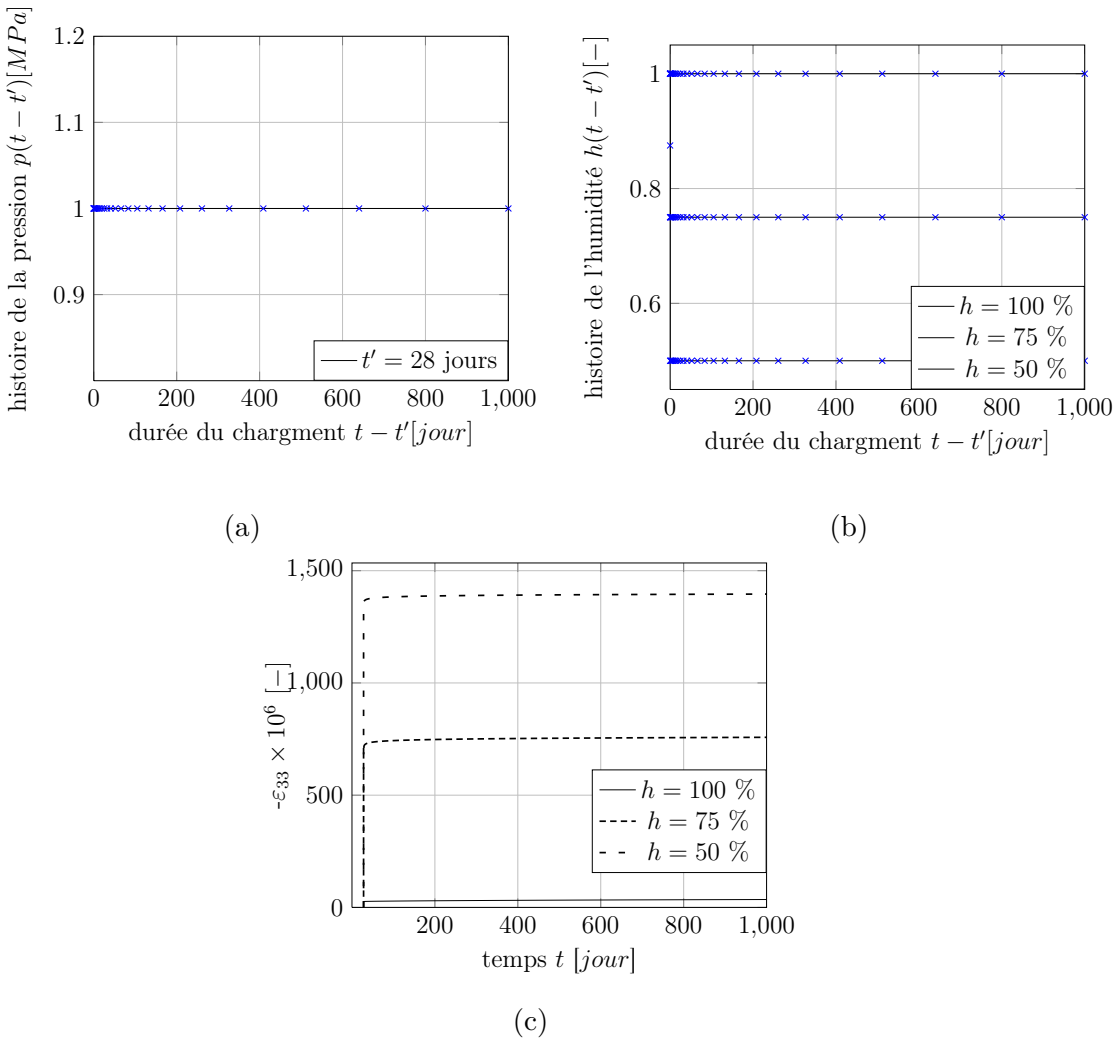


Fig 6.5 – Réponse en fluage et retrait de l'éprouvette avec un séchage initial de $h = 100\%$ à $h = 75,50\%$.(a) histoire de la pression, (b) histoire de l'humidité, (c) composante ε_{33} de la déformation.

.

La Fig 6.5, compare la réponse en fluage séchant de l'éprouvette dans le cas d'un fluage à $h = 100\%$ et dans le cas d'un fluage avec un séchage simultané initial de $h = 100\%$ à $h = 75,50\%$ pendant 10^{-3} jours. Ensuite, l'humidité est maintenue constante. Nous observons comme attendu une déformation totale beaucoup plus importante que le fluage à $h = 100\%$, en raison du séchage initial qui accélère le processus de glissement de cisaillement des C-S-H. Cela se fait par le biais de la microprécontrainte comme cela a été détaillé dans la section 4.4.4.2 et au chapitre 1.

6.3 Homogénéisation numérique de la viscoélasticité linéaire vieillissante dans les microstructures poreuses vides ou saturées

Nous avons utilisé dans la section précédente, notre implémentation de la théorie MPS dans le cadre de premiers calculs aux éléments finis très simples, ou nous avons pu montrer que notre implémentation est bien utilisable sous Code_Aster et que nous reproduisons bien la physique attendue. Dans cette partie, nous nous intéressons à l'homogénéisation numérique de microstructures poreuses à phase solide homogène dont les équations constitutives sont données par la théorie MPS.

Nous souhaitons étendre les définitions des propriétés de la poroélasticité en condition non saturée (chapitre 5) au cas de la viscoélasticité linéaire vieillissante. En raison de la linéarité du problème nous pouvons le faire dans le cas de l'espace poreux vide en passant de la rigidité effective $\mathbb{C}^{eff}$ au tenseur de relaxation effectif $\mathbb{R}^{eff}$. Cependant, dans les cas saturé et non saturé, pour les tenseurs de Biot saturé $\mathbf{B}$, liquide $\mathbf{B}^l$ et liquide-vapeur $\mathbf{B}^{lv}$, il faudrait établir un fondement théorique clair qui à notre connaissance ne l'est pas encore. Ainsi, nous les définirons de façon empirique tout en restant conscient qu'un développement théorique est nécessaire.

Sauf pour le cas de la relaxation effective, nous proposons ci-dessous les modèles empiriques de propriétés de la poro-viscoélasticité en régime non saturé.

Tenseur de relaxation effectif pour un espace poreux vide : La composante R^{eff}_{ijkl} du tenseur de relaxation effectif s'obtient dans le cas de chargement $\overline{\varepsilon}_{kl}(t,t') = H(t-t'),\ p^v = p^l = \gamma^{lv} = 0$, (avec H la fonction de Heaviside) en effectuant la moyenne apparente de l'histoire du tenseur de contrainte de la phase solide :

$$R^{eff}_{ijkl}(t,t') = \frac{(1-\phi_0)}{|\Omega^s|}\int_{\Omega^s} \sigma^s_{ij}(\mathbf{x},t,t')dv. \tag{6.1}$$

Tenseur et module de Biot en régime saturé : Le tenseur $\mathbf{B}$ et le module N de Biot en condition saturée s'obtiennent dans le cas d'un chargement $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}} = 0,\ \gamma^{lv} = 0$ et $p^v(t,t') = H(t-t')$ (avec H la fonction de Heaviside) dans Ω^f en effectuant la moyenne apparente suivante :

$$\mathbf{B}(t,t') = -\frac{(1-\phi_0)}{|\Omega^s|}\int_{\Omega^s} \boldsymbol{\sigma}^s(\mathbf{x},t,t')dv + \phi_0\mathbf{1}, \tag{6.2}$$

$$\frac{1}{N(t,t')} = \phi_0 \mathrm{Tr}\langle \boldsymbol{\varepsilon}(t,t')\rangle_f, \tag{6.3}$$

où la définition de la moyenne de la déformation du fluide est donnée par l'Eq. (4.12).

Tenseur et module de Biot liquide : Le tenseur $\mathbf{B}^l$ et le module N^l de Biot liquide en condition partiellement saturée s'obtiennent dans le cas d'un chargement $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}} = 0,\ \gamma^{lv} = p^v = 0$

et $p_c = H(t-t')$ (avec H la fonction de Heaviside) dans Ω^l en effectuant la moyenne apparente suivante :

$$\mathbf{B}^l(t,t') = \frac{(1-\phi_0)}{|\Omega^s|}\int_{\Omega^s} \boldsymbol{\sigma}^s(\mathbf{x},t,t')dv + \phi_0 S_r(t)\mathbf{1}, \tag{6.4}$$

et N^l se calcule exactement comme N sauf que p_c existe seulement dans la phase liquide alors que p^v est dans le cas saturé non nul dans tout l'espace poreux.

Tenseur et module de Biot liquide-vapeur : Le tenseur $\mathbf{B}^{lv}$ et le module N^{lv} de Biot liquide-vapeur en condition partiellement saturée s'obtiennent dans le cas d'un chargement $\bar{\varepsilon} = 0$, $\gamma^{lv} = H(t-t')$ (avec H la fonction de Heaviside) sur Γ^{lv} et Γ^{sv}, $p_c = p^v = 0$ en effectuant la moyenne apparente suivante :

$$\mathbf{B}^{lv}(t,t') = \frac{(1-\phi_0)}{|\Omega^s|}\int_{\Omega^s} \boldsymbol{\sigma}^s(\mathbf{x},t,t')dv + \frac{1}{|\Omega|}\left[\int_{\Gamma^{lv}(t)} \mathbf{1}_T(\mathbf{x})ds + cos(\theta)\int_{\Gamma^{sv}(t)} \mathbf{1}_T(\mathbf{x})ds\right], \tag{6.5}$$

et N^{lv} se calcule exactement comme N et N^l pour le cas de chargement $\gamma^{lv} = H(t-t')$.

Par la suite, nous considérons seulement le cas d'un espace poreux vide ou complètement saturé, et étudions le tenseur de relaxation effectif et le tenseur de Biot saturé. Aussi nous proposons d'analyser la réponse des microstructures poreuses pour des histoires plus complexes de la déformation macroscopique et de la pression du fluide de l'espace poreux dans le cas saturé.

6.3.1 Microstructure périodique contenant des pores allongés selon $\mathbf{e}_3$

Dans cette section, nous proposons de présenter la relaxation effective et le tenseur de Biot saturé d'une microstructure poreuse contenant des pores ellipsoïdaux et sa réponse à un trajet complexe de chargement. La Fig. 6.6 présente les composantes non nulles de la relaxation effective de cette microstructure, et ce pour deux porosités initiales $\phi_0 = 10$ % et $\phi_0 = 20$ %.

Partant d'une phase solide isotrope, nous aboutissons comme dans le cas de l'élasticité à un tenseur de relaxation effectif isotrope transverse. Aussi, nous observons que la porosité réduit la relaxation effective, et donc par analogie elle amplifie le fluage. En comparant la relaxation locale de la phase solide et la relaxation effective, il est très intéressant de constater que dans cette situation où la phase solide est homogène la porosité ne modifie pas la cinétique de la réponse viscoélastique. Cette observation nous permet dans notre situation de justifier le fait que nous utilisons un modèle de comportement normalement destiné à l'échelle du béton à l'échelle du gel de C-S-H. Il est néanmoins probable que la prise en compte simultanée d'inclusions rigides dans la phase solide ou les différents changements d'échelles, allant du gel de C-S-H jusqu'à l'échelle du béton, cette hypothèse pourrait être mise en défaut.

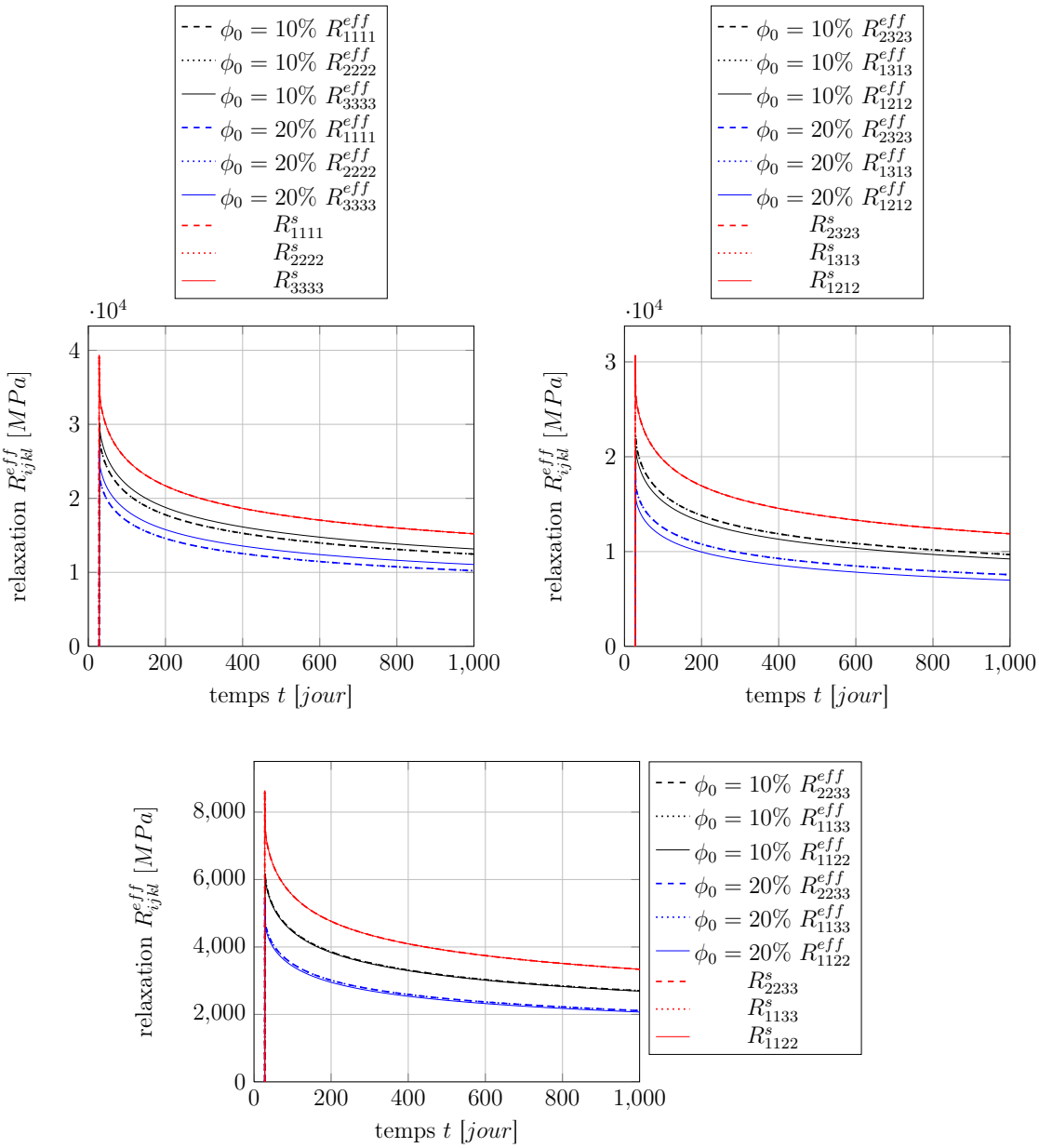


Fig 6.6 – Composantes $R^{eff}_{ijkl}(t,t')$ ($t' = 28$ jours) du tenseur de relaxation effectif d'une microstructure périodique contenant des pores ellipsoïdaux allongés. En rouge les composantes du tenseur de relaxation de la phase solide $R^s_{ijkl}(t,t')$ ($t' = 28$ jours).

.

Nous présentons sur la Fig. 6.7, l'évolution en fonction du temps du tenseur de Biot saturé et ce, pour différentes porosités du matériau au chargement initial $t' = 28, 90$ jours.

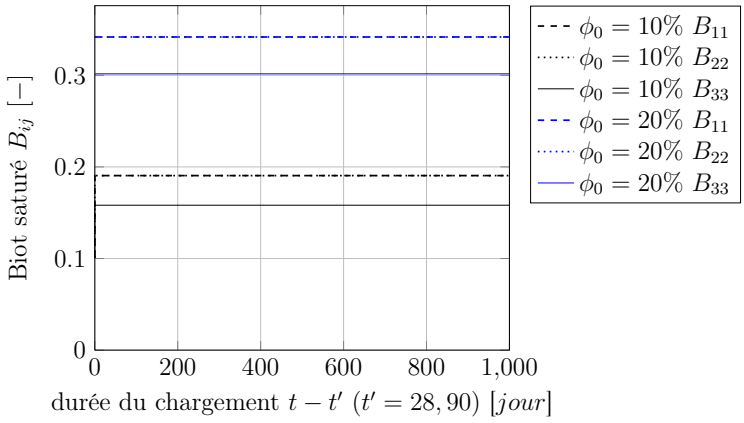
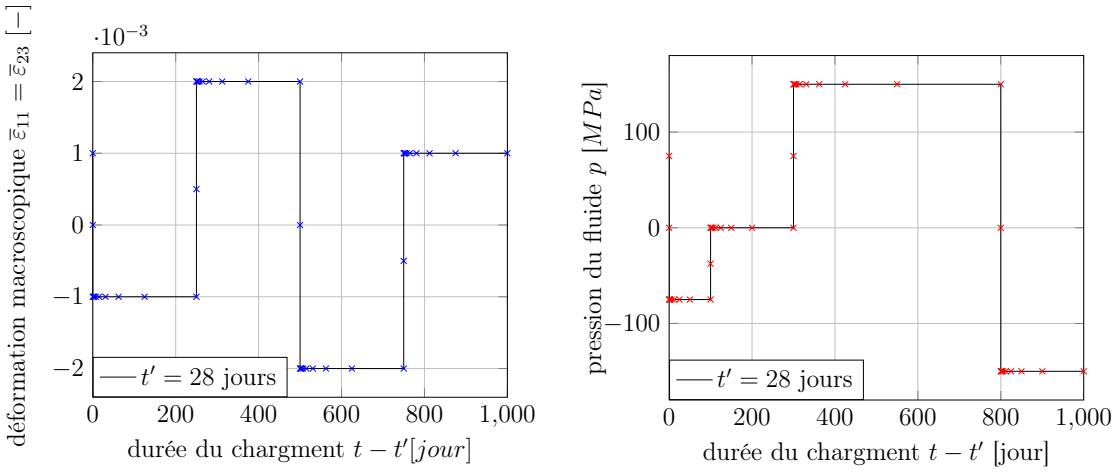


Fig 6.7 – Composantes $B_{ij}(t, t')$ ($t' = 28, 90$ jours) du tenseur de Biot saturé d'une microstructure périodique contenant des pores ellipsoïdaux allongés.

.



(a) (b)

Fig 6.8 – Trajet complexe de chargement : (a) composante non nulle de la déformation macroscopique $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$, (b) pression du fluide saturant l'espace poreux p.

.

Le premier constat frappant que nous pouvons faire est que le tenseur de Biot saturé ne dépend absolument pas du comportement viscoélastique de la phase solide. Aussi il ne dépend pas de l'effet du vieillissement du comportement de la phase solide. Ainsi, le tenseur de Biot saturé tel qu'il a été défini est constant. Il est une propriété qui ne dépend que de la porosité, de la morphologie de l'espace poreux et du coefficient de Poisson (ici en fluage) qui est égal au coefficient de Poisson élastique. Son éventuelle dépendance au temps serait alors seulement due à sa dépendance au coefficient de Poisson. En effet, cette dépendance entre le tenseur de Biot,

le coefficient de Poisson et la porosité peut être montrée par simple analyse micromécanique analytique en utilisant la définition donnée par l'Eq. (5.12), et en montrant par résolution du problème d'Eshelby par exemple dans le cas de la viscoélasticité non-vieillissante que la moyenne du tenseur de localisation sur l'espace poreux ne dépend que de la porosité et du coefficient de Poisson de la phase solide homogène. Dans le cas vieillissant, ce travail est beaucoup plus délicat d'où notre prudence sur la définition des tenseurs de Biot qui est faite ici.

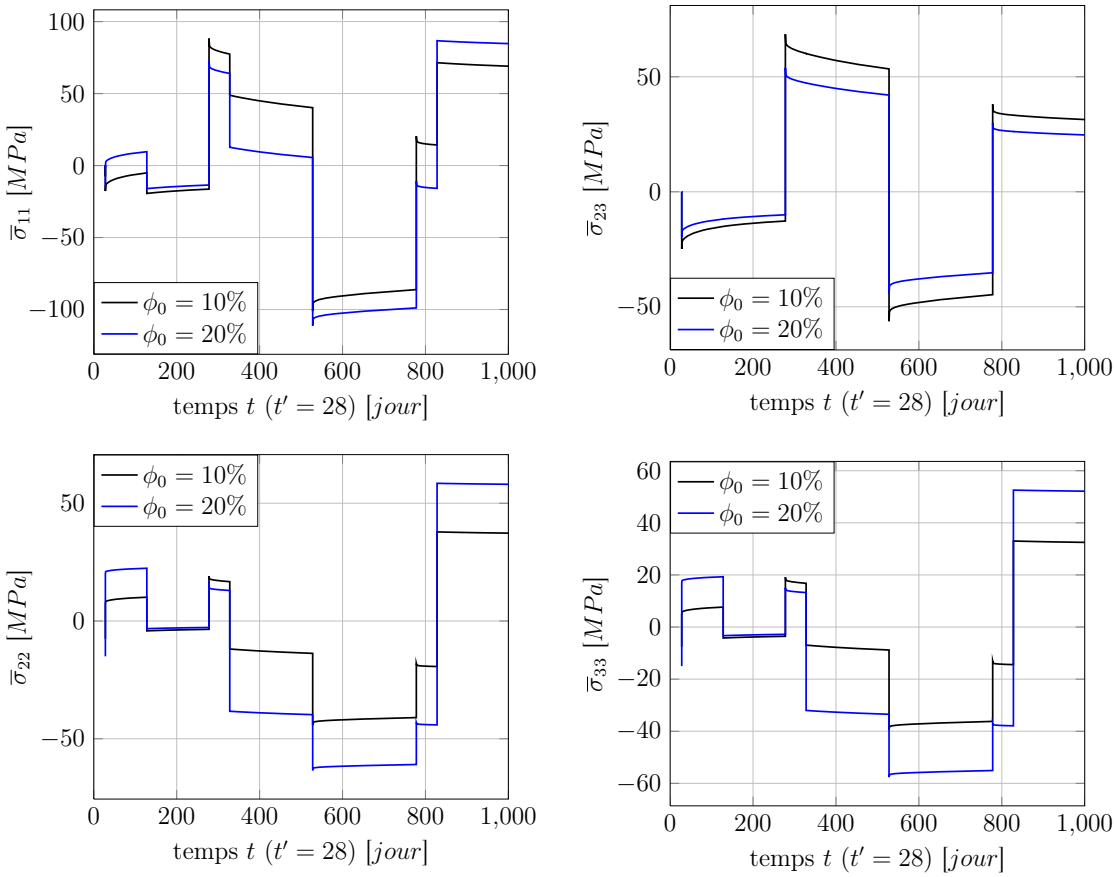


Fig 6.9 – Réponse de la microstructure périodique contenant des pores ellipsoïdaux allongés au trajet de chargement complexe : composantes non nulles de la contrainte macroscopique totale $\overline{\sigma}_{11}$, $\overline{\sigma}_{23}$, $\overline{\sigma}_{22}$, $\overline{\sigma}_{33}$.

.

Les Fig. 6.8 et 6.9, montrent un exemple de trajet de chargement (histoires de la déformation macroscopique et de la pression du fluide) complexe et la réponse de la microstructure périodique contenant des pores ellipsoïdaux allongés. Nous illustrons bien le fait que notre méthodologie parvient à suivre des trajets de chargement complexe et ce, pour des convergences à chaque pas de chargement en seulement 2 ou 3 itérations. Sur la figure présentant le chargement nous avons volontairement indiqué en bleu la discrétisation associée à l'histoire de la déformation macroscopique et en rouge celle de la pression du fluide. Notons au passage que la discrétisation

en temps est ici non uniforme pour prendre en compte les variations en temps des déformations macroscopiques et de la pression du fluide. Il est important de noter qu'ici, bien que le tenseur de Biot saturé soir constant, on obtient néanmoins une contribution viscoélastique associée à la pression du fluide.

6.3.2 Microstructure périodique à morphologie cubique centrée

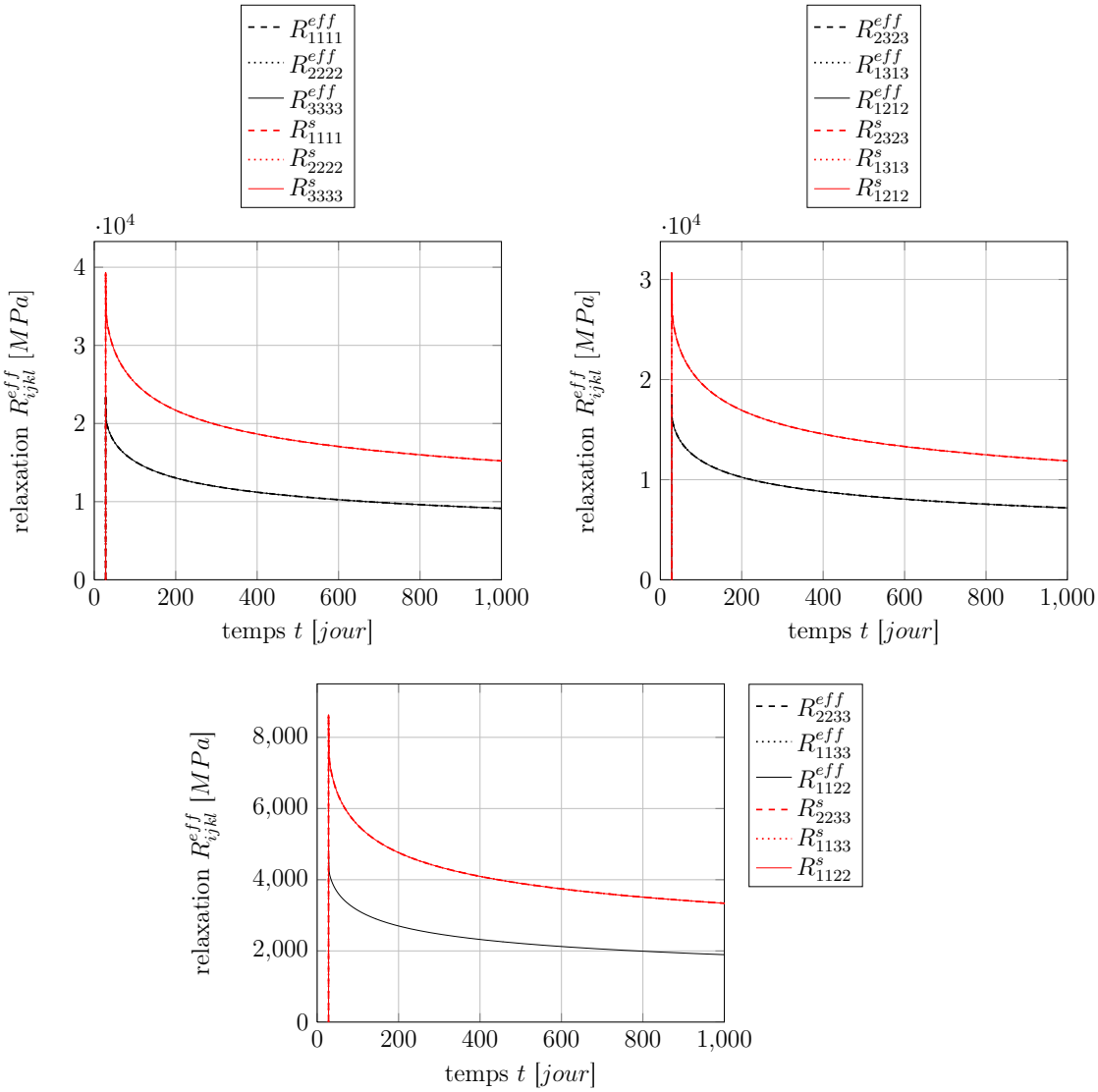


Fig 6.10 – Composantes $R^{eff}_{ijkl}(t,t')$ ($t' = 28$ jours) du tenseur de relaxation effectif d'une microstructure périodique à squelette solide cubique centré. En rouge la composante du tenseur de relaxation de la phase solide $R^{s}_{ijkl}(t,t')$ ($t' = 28$ jours).

.

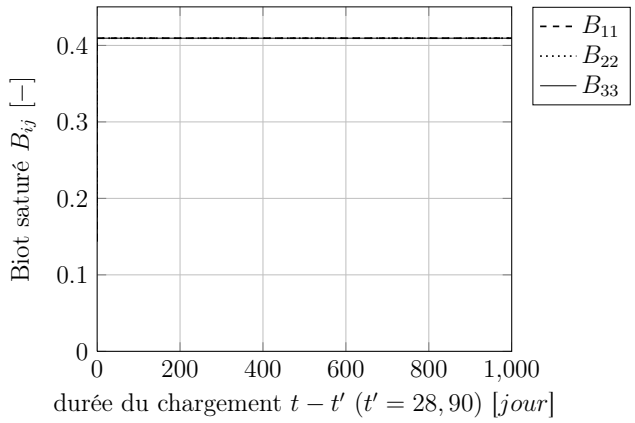


Fig 6.11 – Composantes $B_{ij}(t, t')$ ($t' = 28, 90$ jours) du tenseur de Biot saturé d'une microstructure périodique à squelette solide cubique centré.

.

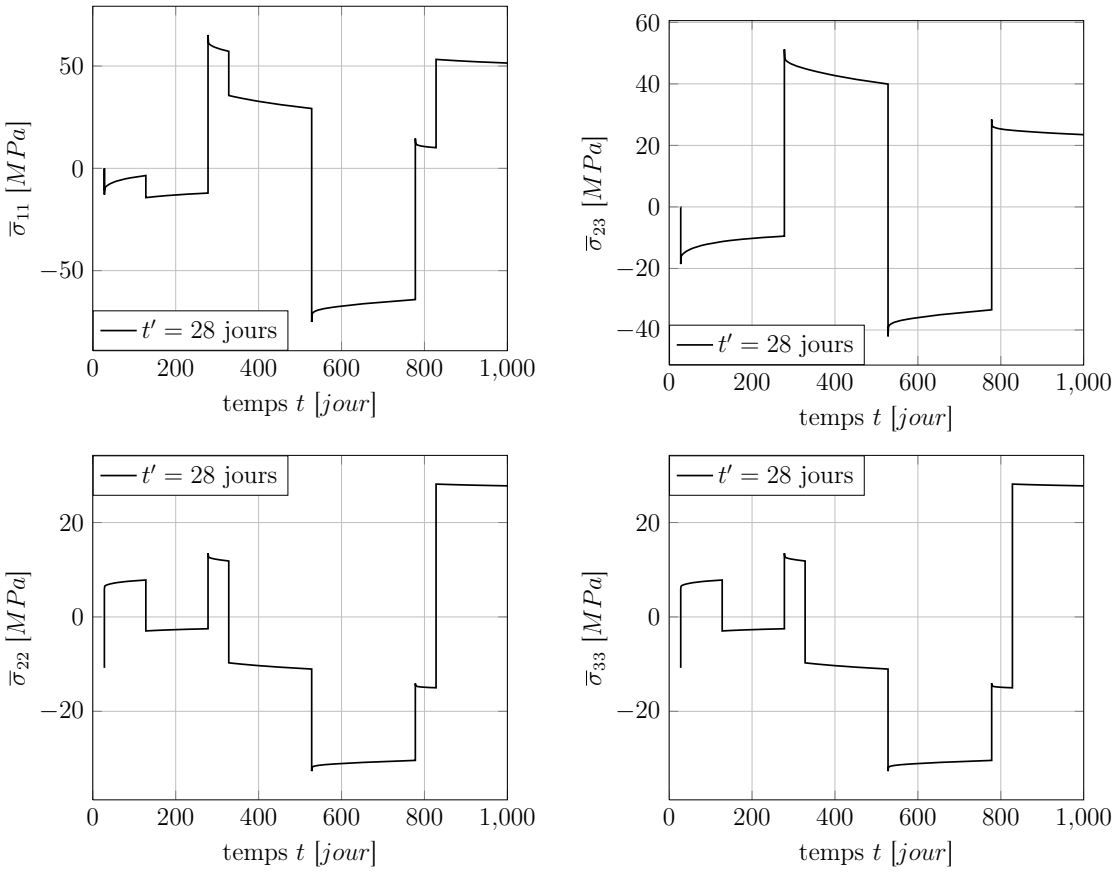


Fig 6.12 – Réponse de la microstructure périodique à squelette solide cubique centré au trajet de chargement complexe : composantes non nulles de la contrainte macroscopique totale $\overline{\sigma}_{11}$, $\overline{\sigma}_{23}$, $\overline{\sigma}_{22}$, $\overline{\sigma}_{33}$.

.

Comme précédemment, nous commençons par présenter la relaxation effective obtenue dans le cas de la microstructure cubique centrée dans la Fig. 6.10. En effet, celle-ci présente une symétrie cubique (trois termes indépendants $R^{eff}_{1111} = R^{eff}_{2222} = R^{eff}_{3333}$, $R^{eff}_{1212} = R^{eff}_{1313} = R^{eff}_{2323}$ et $R^{eff}_{1122} = R^{eff}_{1133} = R^{eff}_{2233}$). Comme on peut s'y attendre la porosité rend plus souple le comportement d'ensemble. Enfin, en ce qui concerne la relaxation effective nous constatons aussi que sa cinétique est conservée au travers du processus d'homogénéisation.

Sur la Fig. 6.11, le tenseur de Biot saturé de la microstructure cubique centrée est isotrope et constant et ce, pour deux âges au chargement initial ($t' = 28,90$ jours) de la phase solide. De même que précédemment, on peut montrer qu'il dépend seulement du coefficient de Poisson, de la porosité et de la morphologie de l'espace poreux. Ainsi, l'hypothèse du coefficient de Poisson constant en fluage faite ici, justifie le fait que le tenseur de Biot soit constant.

Enfin, sur la Fig. 6.12, nous avons imposé le même trajet de chargement complexe sur cette microstructure dont la morphologie est légèrement plus complexe que la précédente pour bien souligner le fait notre méthodologie est applicable à des morphologies quelconques.

6.4 Vers un modèle unifié pour les mécanismes de fluage et de retrait

Même si nos définitions des tenseurs de Biot saturé $\mathbf{B}$, et non saturé, liquide $\mathbf{B}^l$ et liquide-vapeur $\mathbf{B}^{lv}$ ne soient pas encore justifiées théoriquement nous pouvons d'ores et déjà avoir une discussion à partir des résultats préliminaires concernant la relaxation effective et le tenseur de Biot saturé. Faute de temps nous nous permettons de faire des conjectures en ce qui concerne l'évolution des tenseurs de Biot liquide et liquide-vapeur. Selon les définitions de ces propriétés données dans ce chapitre, nous pensons qu'ils seront aussi pour une saturation donnée, constants comme le tenseur de Biot saturé et qu'ils ne dépendront que de la porosité, du degré de saturation, de la morphologie de l'espace poreux (des ménisques liquides) et du coefficient de Poisson de la phase solide. Si nous adoptons ces affirmations comme une hypothèse, nous pouvons proposer une formulation poromécanique permettant de modéliser de façon unifiée les phénomènes de fluage et de retrait au moins en ce qui concerne l'échelle du gel de C-S-H :

— En fluage :

$$\overline{\varepsilon}(t) = \int_{t'=-\infty}^{t} \mathbb{F}^{eff}(t,t') : \dot{\overline{\boldsymbol{\sigma}}}^{eff}(t')dt', \tag{6.6}$$

— En relaxation :

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}}^{eff}(t) = \int_{t'=-\infty}^{t} \mathbb{R}^{eff}(t,t') : \dot{\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}}(t')dt', \tag{6.7}$$

où $\overline{\boldsymbol{\sigma}}^{eff}$ est la contrainte macroscopique effective définie par,

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}}^{eff} = \overline{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{B}^l p_c - \mathbf{B}^{lv}\gamma^{lv} + \mathbf{B}p^v. \tag{6.8}$$

Les tenseurs de Biot saturé, liquide et liquide-vapeur sont les tenseurs de Biot déterminés dans le cas de la phase solide élastique avec un coefficient de Poisson élastique égal à celui du fluage ou à celui de la relaxation mais constant dans le temps. Nous tenons à rappeler que cette proposition reste un modèle empirique qui doit être théoriquement démontré mais donnant une très bonne représentation du comportement dans le cas d'une phase solide homogène à coefficient de Poisson constant en viscoélasticité vieillissante.

Dans ces propositions de formulation pour la modélisation unifiée du fluage et du retrait, le tenseur de Biot liquide, le tenseur de Biot liquide-vapeur, la pression capillaire et la pression de vapeur dépendent du temps au travers du séchage/humidification (humidité h ou saturation S_r) seulement puisque nous négligeons la perte d'équilibre thermodynamique des phases fluide qui pourrait être induite par la déformation du squelette solide. Ainsi, nous conservons même dans cette approche macroscopique le découplage entre la résolution du séchage et celle de la réponse mécanique. Aussi, le tenseur de Biot liquide-vapeur pourrait dépendre du temps au travers de l'angle de contact θ qui varie pendant le séchage si l'on considère les phénomènes d'absorption à l'interface solide-vapeur qui modifieraient la tension de surface solide-vapeur en fonction de l'épaisseur de la couche adsorbée. Enfin, puisque nous constatons que la relaxation effective et donc par analogie le fluage effectif garde la même cinétique que celle du squelette solide par homogénéisation nous pouvons réutiliser la théorie MPS pour simuler le fluage effectif dans l'Eq. (6.6).

6.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons proposé une extension des définitions des propriétés poroélastiques non saturées au cas de la poroviscoélasticité vieillissante non saturée. Bien que notre proposition ne se base pas encore sur une justification théorique claire en ce qui concerne les tenseurs de Biot saturé et non saturé, nous avons pu en analysant la relaxation effective et le tenseur de Biot saturé proposer une formulation macroscopique qui permettrait de modéliser de façon unifiée le fluage et retrait. Dans notre modèle empirique et avec les hypothèses faites, le tenseur de Biot saturé dans le cas viscoélastique et vieillissant ne dépend que de la porosité, de la morphologie de l'espace poreux et du coefficient de Poisson en fluage ou en relaxation de la phase solide. Alors que dans le cas non saturé ils correspondent aux tenseurs de Biot liquide et liquide-vapeur obtenue en élastcité et alors leur dépendance au temps vient des procéssus de séchage/humidification au travers du degré de saturation. Ces tendances sont possibles à cause du coefficient de Poisson supposé constant. En effet, cela nous permet d'adopter la formulation poroviscoélastique proposée dans ce chapitre. Puisque la relaxation effective et par analogie le fluage effectif garde la même cinétique que celle de la phase solide, nous proposons de réutiliser la théorie MPS avec la formulation en fluage pour modéliser de façon unifiée le fluage et le retrait du gel de C-S-H.

Conclusion générale et perspectives

Nous avons dans cette thèse étudié les phénomènes de fluage et de retrait, qui sont les déformations différées des matériaux cimentaires sous l'action combinée d'un chargement mécanique (force) et environnemental (humidité). Ces phénomènes se produisent dès la construction des ouvrages en béton et se poursuivent pendant toute la durée de vie de ces ouvrages. Dans le cas des enceintes de confinement, en béton armé et précontraint, les phénomènes de fluage et de retrait tendent à réduire la force de précontrainte initialement prévue pour maintenir le béton dans un état de compression dans le but de limiter la fissuration de ces ouvrages. Ainsi, les études des déformations de fluage et de retrait des bétons sont de première importance dans le domaine du génie civil.

Depuis de nombreuses années, différentes études rapportées dans la littérature témoignent de progrès dans ce domaine. Les études partent du principe de la décomposition de la déformation différée en quatre composantes : retrait endogène, retrait de dessiccation, fluage propre, fluage de dessiccation. L'approche souvent utilisée dans les études consiste à se baser sur l'expérimentation et à établir, à partir des résultats d'essais, des modèles empiriques de comportement du béton. Ceux-ci sont limités à la reproduction des essais et ne permettent pas de lier de façon rigoureuse la compréhension des mécanismes physiques associés, qui ont lieu à l'échelle de la microstructure, aux modèles de comportement macroscopique utilisés pour faire des études de structures. En particulier, il est très difficile de comprendre et de prendre en compte dans les modèles macroscopiques les interactions entre les réponses (fluage et retrait) aux sollicitations mécaniques et hydriques appliquées aux bétons.

L'objectif de notre travail de thèse était alors de proposer une méthodologie de modélisation unifiée à l'échelle microscopique sous les effets des chargements mécanique et hydrique, de façon à améliorer la compréhension des interactions entre fluage et retrait d'une part, et de pouvoir proposer ou améliorer les modèles de comportement macroscopique utilisés pour faire des études de structure en béton d'autre part.

D'abord, nous avons fait une étude bibliographique sur les phénomènes de fluage et de retrait dans les matériaux cimentaires. Dans cette étude, nous avons souligné les tendances observées de ces phénomènes et présenté les théories concernant les mécanismes pouvant les expliquer. Sur la base de discussions sur les observations et les théories concernant les mécanismes élémentaires, nous avons retenu des mécanismes et les échelles pertinentes du matériaux où ils se produisent. Ainsi, particulièrement intéressés par les interactions entre fluage et retrait, nous avons proposé de focaliser notre démarche sur l'échelle de la microstructure du gel de C-S-H.

A cette échelle, nous avons proposé une approche de modélisation couplant la méthode des éléments finis et la méthode de Lattice Boltzmann sur réseau. La méthode de Lattice Boltzmann est une résolution numérique de l'équation de Boltzmann provenant de la physique statistique ou théorie cinétique et donc permet de directement prendre en compte les forces d'interactions

entre les particules fluide à l'origine des phénomènes de capillarité et de mouillabilité des phases du fluide. Cette approche nous permet entre autre de simuler les fluides diphasiques à l'échelle du pore pour des réseaux poreux à morphologie quelconque sans avoir recours à des techniques numériques pour traquer les interfaces entre les phases liquide et vapeur. Au cours de cette thèse, nous avons entièrement développé et capitalisé un code s'appyant sur la méthode de Lattice Boltzmann.

La méthode des éléments finis est utilisée, pour la simulation du comportement du squelette solide des microstructures poreuses avec toutes les difficultés techniques que pourraient présenter la microstructure du gel de C-S-H. Il s'agit entre autre du maillage du squelette solide, des efforts induits à l'interface solide-fluide par le fluide diphasique et de la modélisation des mécanismes élémentaires retenus dans la phase solide. La première difficulté pour obtenir la réponse du squelette solide est la modélisation du chargement mécanique lié à la présence d'un fluide diphasique dans l'espace poreux. Pour la surmonter, nous avons d'abord analysé et compris le chargement induit et ensuite développé des techniques permettant de correctement imposer le chargement mécanique provenant du fluide diphasique dans l'espace poreux. La seconde difficulté réside dans la modélisation des mécanismes élémentaires se produisant dans la phase solide. Pour la surmonter, nous avons proposé d'utiliser la théorie de microprécontrainte-solidification. Ainsi, nous avons entièrement développé sous le formalisme Mfront cette théorie dans le but de l'utiliser avec Code_Aster. Enfin en ce qui concerne la méthodologie de modélisation unifiée du fluage et du retrait dans les microstructures poreuses, nous avons proposé et implémenté une technique capable de prendre en compte des conditions aux limites périodiques avant de présenter les opérations de moyennes appropriées à effectuer sur l'ensemble de la microstructure poreuse en condition non saturée pour avoir la réponse macroscopique de ces microstructures.

Nous avons utilisé notre méthodologie dans le cadre d'une première application pour étendre la microporoélasticité au cas des microstructures poreuses à morphologie quelconque. Dans cette application nous avons souligné la limite des approches analytiques en ce qui concerne la forte hypothèse faite pour estimer les tenseurs et les modules de Biot associés à la phase liquide et aux effets des tensions de surface. Nous avons montré que la prise en compte de la morphologie réelle des ménisques du liquide capillaire dans le réseau poreux peut conduire à des régimes de retrait/gonflement selon l'intensité de la pression capillaire, de la tension de surface et des répartitions des surfaces de chargement associées sur le squelette solide.

Enfin nous avons proposé une extension de la microporoélasticité en régime non saturé au cas de microporoviscoélasticité non saturée vieillissante. Bien que notre extension ne s'appuie pas pour l'instant sur des définitions théoriquement justifiées, nous pouvons faire une discussion intéressante sur les résultats préliminaires obtenus dans les cas du réseau poreux vide et saturé. En somme, en adoptant un certain nombre d'hypothèses restant à vérifier nous proposons des formulations poroviscoélastiques pouvant modéliser de façon unifiée le fluage et le retrait du gel de C-S-H.

Les développements menés dans cette thèse nous ont permis de nous rapprocher au mieux

dans le temps imparti de l'objectif de la thèse. Néanmoins, du fait de la majorité du temps consacré aux développements de la méthodologie et des outils permettant sa mise en œuvre, l'analyse physique nécessaire pour la construction rigoureuse d'un modèle unifiant le fluage et retrait n'a pas pu être mené jusqu'à son terme.

Nous pensons donc que l'amélioration de notre travail de thèse doit commencer par des analyses physiques beaucoup plus poussées dans le cadre de la poroélasticité non saturée puis dans le cas de la poroviscoélasticité vieillissante non saturée. Notamment, en prenant en compte des morphologies de réseau poreux beaucoup plus réaliste, et surtout en considérant au moins deux échelles pour prendre en compte le maximum de tailles de pores possibles. Aussi, la prise en compte d'au moins deux échelles permettraient de rendre compte du fait que lors de l'étude de la grande échelle les pores de petites tailles sont complètement saturés et subissent l'effet de la dépression capillaire des pores de grandes tailles partiellement saturés. Ce effet est à notre avis non négligeable dans la modélisation du retrait. Par ailleurs, dans le cas particulier de la phase solide viscoélastique vieillissante un travail théorique de définition des propriétés poromécaniques reste à faire pour utiliser de façon efficace la méthodologie mise en œuvre dans cette thèse.

Dans ce travail nous nous sommes intéressés seulement aux mécanismes actifs à l'échelle du gel de C-S-H qui, comme expliqué au chapitre 1, constituent seulement une partie des mécanismes importants pendant les essais de fluage séchant. Les effets d'échelle ou microfissurations jouent un rôle très important si nous souhaitons construire un modèle complet. Ainsi, après le travail rigoureux qui nous permettrait de justifier notre formulation poromécanique unifiant le fluage et le retrait du gel de C-S-H, il faudrait rendre compte aux échelles pertinentes des effets de la microfissuration sur la formulation poromécanique obtenue à partir de l'étude du gel de C-S-H. Les échelles pertinentes sont celles de type matrice-inclusion, il s'agit de la microstructure de la pâte de ciment, de celle du mortier et de celle du béton. Á ces échelles, le séchage est non homogène dans la matrice et cette non uniformité de la saturation ou de l'humidité est à l'origine de contraintes de traction qui engendrent les microfissurations. Pour ce faire il faudrait développer à ces échelles, un modèle de séchage dit "macroscopique" contrairement à la méthode de Lattice Boltzmann qui concerne le séchage à l'échelle du réseau poreux et ajouter à la formulation poromécanique du fluage et du retrait un modèle d'endommagement s'appuyant par exemple sur la méthode des champs de phases pour initier et propager les microfissures pour des chargements mécanique et hydrique combinés. Enfin, une nouvelle procédure d'homogénéisation numérique devra être définie dans ce cadre.

Annexe A

Annexe : La méthode de Boltzmann sur réseau pour la modélisation d'un fluide mono-phasique

Sommaire

A.1 Éléments de théorie cinétique 209

A.1.1 Théorème de Liouville 209

A.1.2 Hierarchie BBGKY 210

A.1.3 Intégrale de collision de Boltzmann 211

A.2 Discrétisation de l'équation de Boltzmann 213

A.2.1 Polynômes d'Hermite 213

A.2.2 Quadrature de Gauss-Hermite 214

A.1 Éléments de théorie cinétique

A.1.1 Théorème de Liouville

Le nombre total de systèmes dans un ensemble étant conservé, le nombre de points représentatifs quittant tout volume dans l'espace des phases $\mathbf{\Gamma}$ à chaque instant doit être égal au taux de réduction du nombre de points représentatifs dans le même volume. soit Ω un volume arbitraire dans l'espace $\mathbf{\Gamma}$ et $\partial\Omega$ sa surface. Si nous notons par $\dot{\mathbf{x}} \equiv (\dot{\mathbf{x}}_1, \cdots, \dot{\mathbf{x}}_N)$ et $\dot{\boldsymbol{\xi}} = (\dot{\boldsymbol{\xi}}_1, \cdots, \dot{\boldsymbol{\xi}}_N)$ et par $\mathbf{n}$ la normale locale à la surface $\partial\Omega$, alors :

$$-\frac{d}{dt}\int_{\Omega} d\Omega f^N = \int_{\partial\Omega} d(\partial\Omega)\mathbf{n}\cdot(\dot{\mathbf{x}}, \dot{\boldsymbol{\xi}}) f^N$$

L'application du théorème de la divergence nous donne :

$$\int_{\omega} d\Omega\{\frac{\partial f^N}{\partial t} + \nabla\cdot[(\dot{\mathbf{x}}, \dot{\boldsymbol{\xi}}) f^N]\} = 0 \tag{A.1}$$

où $\nabla \equiv (\nabla_{\mathbf{x}_1}, \cdots, \nabla_{\mathbf{x}_N}; \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1}, \cdots, \nabla_{\boldsymbol{\xi}_N})$.

Comme Ω est un volume quelconque de $\mathbf{\Gamma}$, l'Eq. A.1 donne :

$$\begin{aligned}
-\frac{\partial f^N}{\partial t} &= \nabla \cdot \{(\dot{\mathbf{x}}, \dot{\boldsymbol{\xi}}) f^N\}, \\
&= \sum_{i=1}^{N} [\nabla_{\mathbf{x}_i}(\dot{\mathbf{x}}_i f^N) + \nabla_{\boldsymbol{\xi}_i}(\dot{\boldsymbol{\xi}}_i f^N)], \\
&= \sum_{i=1}^{N} (\nabla_{\mathbf{x}_i} f^N \cdot \dot{\mathbf{x}}_i + \nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} f^N \cdot \dot{\boldsymbol{\xi}}_i) + \sum_{i=1}^{N} f^N (\nabla_{\mathbf{x}_i} \dot{\mathbf{x}}_i + \nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} \dot{\boldsymbol{\xi}}_i).
\end{aligned}$$

Selon l'Eq. 2.1 de la dynamique microscopique nous avons :

$$\nabla_{\mathbf{x}_i} \dot{\mathbf{x}}_i + \nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} \dot{\boldsymbol{\xi}}_i = 0 \ (i = 1, \cdots, N).$$

Alors

$$-\frac{\partial f^N}{\partial t} = \sum_{i=1}^{N} (\nabla_{\mathbf{x}_i} f^N \cdot \dot{\mathbf{x}}_i + \nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} f^N \cdot \dot{\boldsymbol{\xi}}_i).$$

Le théorème 1 de Liouville est équivalent à $\frac{df^N}{dt} = 0$.

A.1.2 Hierarchie BBGKY

Le théorème 1 de Liouville à partir des Eq. 2.1 de la dynamique microscopique, peut être écrit sous la forme :

$$\frac{\partial f^N}{\partial t} + \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{N} (\nabla_{\mathbf{x}_i} f^N \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} H - \nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} f^N \cdot \nabla_{\mathbf{x}_i} H) = 0$$

A partir de l'Eq. 2.3 nous avons :

$$\nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} H = m \boldsymbol{\xi}_i \, ; \, \nabla_{\mathbf{x}_i} H = -\mathbf{f}_i - \frac{1}{2} \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N} \mathbf{k}_{ij}$$

Ainsi nous pouvons réécrire l'équation de Liouville sous cette forme :

$$\frac{\partial f^N}{\partial t} + \sum_{i=1}^{N} [\nabla_{\mathbf{x}_i} f^N \cdot \boldsymbol{\xi}_i + \nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} f^N \cdot (\frac{\mathbf{f}_i}{m} + \frac{1}{2m} \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N} \mathbf{k}_{ij})] = 0$$

Soient $\mathbf{g}_i = \frac{\mathbf{f}_i}{m}$ et $\mathbf{a}_{ij} = \frac{\mathbf{k}_{ij}}{m}$ les accélérations de la particule i induite par les champs de forces $\mathbf{f}_i$ et $\mathbf{k}_{ij}$, définissons l'opérateur h_N tel que :

$$\begin{aligned}
h_N(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) &= \textstyle\sum_{i=1}^{N} S_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N} P_{ij} \\
S_i &\equiv \boldsymbol{\xi}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}_i} + \mathbf{g}_i \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} \\
P_{ij} &\equiv \mathbf{a}_{ij} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} + \mathbf{a}_{ji} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_j} \qquad = \mathbf{a}_{ij} \cdot (\nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} - \nabla_{\boldsymbol{\xi}_j})
\end{aligned} \tag{A.2}$$

avec la forme suivante pour l'équation de Liouville :

$$[\frac{\partial}{\partial t} + h_N] f^N = 0 \tag{A.3}$$

Nous pouvons isoler les termes de $\mathbf{h}_N$ qui impliquent les coordonnées $\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_s$:

$$\begin{aligned} h_N(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) &= \sum_{i=1}^{s} S_i + \sum_{i=s+1}^{N} S_i + \tfrac{1}{2}[\sum_{\substack{i,j=1 \\ i\neq j}}^{s} P_{ij} + \sum_{\substack{i,j=s+1 \\ i\neq j}}^{N} P_{ij} + 2\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=s+1}^{N} P_{ij}] \\ &= h_s(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_s, \boldsymbol{\xi}_1, \cdots, \boldsymbol{\xi}_s, t) + h_{N-s}(\mathbf{x}_{s+1}, \cdots, \mathbf{x}_N, \boldsymbol{\xi}_{s+1}, \cdots, \boldsymbol{\xi}_N, t) \\ &\quad + \sum_{i=1}^{s}\sum_{j=s+1}^{N} P_{ij} \end{aligned} \tag{A.4}$$

Pour déterminer l'équation d'évolution de f^s nous nous appuyons sur sa définition donnée par l'Eq. 2.15 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f^s}{\partial t} &= \frac{N!}{(N-s)!}\int \frac{\partial f^N}{\partial t} d\mathbf{x}_{s+1}\cdots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_{s+1}\cdots d\boldsymbol{\xi}_N \\ &= -\frac{N!}{(N-s)!}\int h_N f^N d\mathbf{x}_{s+1}\cdots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_{s+1}\cdots d\boldsymbol{\xi}_N \\ &= -h_s f^s - \frac{N!}{(N-s)!}\int h_{N-s} f^N d\mathbf{x}_{s+1}\cdots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_{s+1}\cdots d\boldsymbol{\xi}_N \\ &\quad -\frac{N!}{(N-s)!}\int \sum_{i=1}^{s}\sum_{j=s+1}^{N} P_{ij} f^N d\mathbf{x}_{s+1}\cdots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_{s+1}\cdots d\boldsymbol{\xi}_N \end{aligned} \tag{A.5}$$

h_{N-s} est un opérateur composé des gradients $\nabla_{\boldsymbol{\xi}_i}$ avec des coefficients indépendants de $\boldsymbol{\xi}_j, j \neq i$, et des gradients $\nabla_{\mathbf{x}_i}$ avec coefficients indépendants de $\mathbf{x}_j, j \neq i$ on a donc

$$\int h_{N-s} f^N d\mathbf{x}_{s+1}\cdots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_{s+1}\cdots d\boldsymbol{\xi}_N = 0 \tag{A.6}$$

Sachant que $\sum_{j=s+1}^{N} P_{ij} = (N-s)P_{is+1}$ (est la somme de $N-s$ termes identiques) calculons maintenant l'intégrale du dernier terme de l'Eq. A.5 :

$$\begin{aligned} &\frac{N!}{(N-s)!}\int \sum_{i=1}^{s}\sum_{j=s+1}^{N} P_{ij} f^N d\mathbf{x}_{s+1}\cdots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_{s+1}\cdots d\boldsymbol{\xi}_N \\ &= \sum_{i=1}^{s}\int P_{is+1} d\mathbf{x}_{s+1} \frac{N!}{(N-s+1)!} f^N d\mathbf{x}_{s+2}\cdots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_{s+1}\cdots d\boldsymbol{\xi}_N \\ &= \sum_{i=1}^{s}\int P_{is+1} f^{s+1} d\mathbf{x}_{s+1} d\boldsymbol{\xi}_{s+1} \\ &= \sum_{i=1}^{s}\int \mathbf{a}_{is+1}\cdot\nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} f^{s+1} d\mathbf{x}_{s+1} d\boldsymbol{\xi}_{s+1} \end{aligned} \tag{A.7}$$

En remplaçant l'Eq. A.7 dans l'Eq. A.5 donne la hiérarchie $BBGKY$:

$$[\frac{\partial}{\partial t} + h_s] f^s = -\int \sum_{i=1}^{s} \mathbf{a}_{is+1}\cdot\nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} f^{s+1} d\mathbf{x}_{s+1} d\boldsymbol{\xi}_{s+1} \tag{A.8}$$

A.1.3 Intégrale de collision de Boltzmann

Pour simplifier le calcul du terme de collision, commençons par ignorer les accélérations $\mathbf{g}_i = \mathbf{0}$ et $\mathbf{a}_{ij} = \mathbf{0}$ en dehors de la zone de collision, c'est à dire quand $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\| \geq r_0$. Nous obtenons à partir des équations (2.19) et (2.20) :

$$(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1\cdot\nabla_{\mathbf{x}_1}) f^1(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t) = -\int_{r_0} \mathbf{a}_{12}\cdot\nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} f^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, t) d\mathbf{x}_2 \equiv \frac{\partial f^1}{\partial t}|_{coll}, \tag{A.9}$$

$$[\tfrac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1\cdot\nabla_{\mathbf{x}_1} + \boldsymbol{\xi}_2\cdot\nabla_{\mathbf{x}_2} + \tfrac{1}{2}\mathbf{a}_{12}\cdot(\nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} - \nabla_{\boldsymbol{\xi}_2})] f^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, t) = 0. \tag{A.10}$$

Pour l'évaluation de $\frac{\partial f^1}{\partial t}|_{coll}$ nous avons besoin de f^2 dans la région où les particules entrent en collision à savoir où $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\| < r_0$. Dans cette région, utilisons des coordonnées totale et

relative définies comme suite :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Xi} &= \boldsymbol{\xi}_1 + \boldsymbol{\xi}_2 \quad \boldsymbol{\xi} = \tfrac{\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1}{2}, \\ \mathbf{X} &= \tfrac{\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2}{2} \quad \mathbf{x} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1. \end{aligned} \tag{A.11}$$

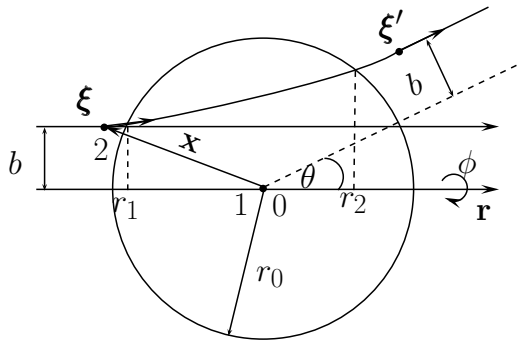


Fig A.1 – Illustration du comportement d'une fonction de distribution à deux particules f^2. Le vecteur distance entre les deux particules est donné par $\mathbf{x}$, et l'impulsion relative est $\boldsymbol{\xi}$. Les deux particules sont corrélées seulement dans la plage des forces d'interactions intermoléculaires, indiquées par la sphère de rayon r_0. Hors de cette sphère c'est la fonction de distribution à 2 particules est le produit des fonctions de distribution à une particule f^1 de chacune des particules.

Alors l'Eq. A.10 devient :

$$\begin{aligned} &[\tfrac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\Xi} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + \mathbf{a}(\mathbf{x}) \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}}] f^2(\mathbf{X}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Xi}, \boldsymbol{\xi}, t) = 0, \\ &\mathbf{a}(\mathbf{x}) = -\nabla_{\mathbf{x}} V(\mathbf{x}). \end{aligned} \tag{A.12}$$

Transformons le système en système au centre de masse en mettant $\boldsymbol{\Xi} = 0$. l'Eq. A.12 peut être réécrite, au premier ordre en dt, comme la condition de propagation :

$$f^2(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} dt, \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}(\mathbf{x}) dt, t + dt) = f^2(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t), \tag{A.13}$$

l'Eq. A.13 traduit le fait que les impulsions entrant dans la sphère de rayon r_0 avec un paramètre d'impact spécifique doivent quitter la sphère avec un angle de dispersion correct, et vice versa.

$$\begin{aligned} \tfrac{\partial f^1}{\partial t}|_{coll} &\equiv -\textstyle\int_{r_0} \mathbf{a}_{12} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} f^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, t) d\mathbf{x}_2, \\ &= -\tfrac{1}{2} \textstyle\int_{r_0} \mathbf{a}_{12} \cdot (\nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} - \nabla_{\boldsymbol{\xi}_2}) f^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, t) d\mathbf{x}_2, \\ &= \textstyle\int_{r_0} (\boldsymbol{\xi}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_1} + \boldsymbol{\xi}_2 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_2}) f^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, t) d\mathbf{x}_2. \end{aligned} \tag{A.14}$$

En utilisant les coordonnées définies en équation (A.11), et en négligeant $\nabla_{\mathbf{X}}$ on obtient :

$$\begin{aligned} \tfrac{\partial f^1}{\partial t}|_{coll} &= -\textstyle\int d\boldsymbol{\xi}_2 \int_{\mathbf{x} < r_0} (\boldsymbol{\xi}_1 - \boldsymbol{\xi}_2) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f^2 d\mathbf{x}, \\ &= \textstyle\int d\boldsymbol{\xi}_2 |\boldsymbol{\xi}_1 - \boldsymbol{\xi}_2| \int d\phi \, b \, db \int_{r_1}^{r_2} \tfrac{\partial f^2}{\partial \mathbf{x}} d\mathbf{x}. \end{aligned} \tag{A.15}$$

où b et ϕ représentent respectivement le paramètre d'impact et l'angle azimuthal entre les impulsions avant et après la collision. Et en utilisant le fait que r_0 soit presque nul et les hypothèses du chao moléculaire pour écrire :

$$f^2(r_1) = f^1(\boldsymbol{\xi}_1)f^1(\boldsymbol{\xi}_2),$$

$$f^2(r_2) = f^1(\boldsymbol{\xi}'_1)f^1(\boldsymbol{\xi}'_2).$$

$\boldsymbol{\xi}'_1$ et $\boldsymbol{\xi}'_2$ sont les vitesses post-collision des particules 1 et 2. En utilisant la définition de la section transversale différentielle σ(Eq. A.16) avec Ω l'angle solide :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = b\,db\,d\phi. \tag{A.16}$$

Nous obtenons la forme finale de l'intégrale collision :

$$\frac{\partial f^1}{\partial t}|_{coll} = \int |\boldsymbol{\xi}_1 - \boldsymbol{\xi}_2|(\frac{d\sigma}{d\Omega})[f^1(\boldsymbol{\xi}'_1)f^1(\boldsymbol{\xi}'_2) - f^1(\boldsymbol{\xi}_1)f^1(\boldsymbol{\xi}_2)]\,d\Omega\,d\boldsymbol{\xi}_2. \tag{A.17}$$

A.2 Discrétisation de l'équation de Boltzmann

A.2.1 Polynômes d'Hermite

En coordonnées cartésiennes de dimension D , la fonction poids (de $\boldsymbol{\xi}$) associée aux polynômes d'Hermite est :

$$\omega(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}}exp(\frac{-\xi^2}{2}) \tag{A.18}$$

où $\xi^2 = \boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\xi}$. Le polynôme d'Hermite d'ordre n est définie par :

$$\mathcal{H}^{(n)}_{\boldsymbol{i}}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{(-1)^n}{\omega(\boldsymbol{\xi})}\nabla^{(n)}_{\boldsymbol{\xi_i}}\omega(\boldsymbol{\xi}) = \frac{(-1)^n}{\omega(\boldsymbol{\xi})}\frac{\partial^n\omega(\boldsymbol{\xi})}{\partial_{\xi_{i_1}}\cdots\partial_{\xi_{i_n}}} \tag{A.19}$$

qui est un tenseur symétrique d'ordre n et n est aussi le degré polynômial en $\boldsymbol{\xi}$. L'indice $\boldsymbol{i}$ est une abréviation pour les multiples indices $\{i_1,\cdots,i_n\}$ et le produit représente la contraction sur tous les n indices. Les valeurs des polynômes d'Hermite jusqu'à l'ordre 3 sont données par :

$$\mathcal{H}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) = 1 \tag{A.20}$$

$$\mathcal{H}^{(1)}_i(\boldsymbol{\xi}) = \xi_i \tag{A.21}$$

$$\mathcal{H}^{(2)}_{ij}(\boldsymbol{\xi}) = \xi_i\xi_j - \delta_{ij} \tag{A.22}$$

$$\mathcal{H}^{(3)}_{ijk}(\boldsymbol{\xi}) = \xi_i\xi_j\xi_k - \xi_i\delta_{jk} - \xi_j\delta_{ik} - \xi_k\delta_{ij} \tag{A.23}$$

δ_{ij} est le symbole de Kronecker. La relation de récurrence des Polynômes d'Hermite est :

$$\xi_i\mathcal{H}^{(n)}_{i_1\cdots i_n} = \mathcal{H}^{(n+1)}_{i_1\cdots i_n} + \sum_{k=1}^{n}\delta_{ii_k}\mathcal{H}^{(n-1)}_{i_1\cdots i_{k-1}i_{k+1}i_n} \tag{A.24}$$

Les polynômes d'Hermite forment une base orthogonale de l'espace de Hilbert des fonctions de $\boldsymbol{\xi}$ avec le produit interne $\langle f, g\rangle = \int \omega f g d\boldsymbol{\xi}$. La relation suivante d'orthogonalité est satisfaite :

$$\int \omega \mathcal{H}_{\boldsymbol{i}}^{(n)} \mathcal{H}_{\boldsymbol{j}}^{(m)} d\boldsymbol{\xi} = \delta_{mn} \delta_{\boldsymbol{ij}}^{n} \tag{A.25}$$

où $\delta_{\boldsymbol{ij}}^{n} = 1$ si $\boldsymbol{i} = \{i_1, \cdots, i_n\}$ est une permutation de $\boldsymbol{j} = \{j_1, \cdots, j_m\}$ et $\delta_{\boldsymbol{ij}}^{n} = 0$ ailleurs. Toute fonction , $f(\boldsymbol{\xi})$, qui est de carré intégrale peut être développée sous forme de polynôme d'Hermite,

$$f(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{\boldsymbol{i}}^{(n)} \mathcal{H}_{\boldsymbol{i}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) \tag{A.26}$$

où la notation de sommation de Einstein fait référence ici à tous les indices aux multiples indices $\{i_1, \cdots, i_n\}$. En multipliant l'Eq. A.26 par $\omega(\boldsymbol{\xi})\mathcal{H}_{\mathbf{i}}^{(m)}$ et en intégrant, nous obtenons :

$$\int \omega(\boldsymbol{\xi}) f(\boldsymbol{\xi}) \mathcal{H}_{\mathbf{i}}^{(m)} d\boldsymbol{\xi} = a_{\boldsymbol{i}}^{(m)} \delta_{\boldsymbol{ij}}^{m} = m! a_{\boldsymbol{j}}^{(m)} \tag{A.27}$$

La dernière égalité est vérifiée parce qu'il y a $m!$ permutations distinctes des indices $\boldsymbol{i} = \{i_1, \cdots, i_m\}$ et $a_{\boldsymbol{i}}^{(m)}$ est symétrique. Par ailleurs, il est plus pratique d'utiliser le développement en série d'Hermite suivant :

$$f(\boldsymbol{\xi}) = \omega(\boldsymbol{\xi}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{\boldsymbol{i}}^{(n)} \mathcal{H}_{\boldsymbol{i}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) \tag{A.28}$$

où les coefficients $a_{\boldsymbol{i}}^{(n)}$ sont donnés par :

$$a_{\boldsymbol{i}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) = \int f(\boldsymbol{\xi}) \mathcal{H}_{\boldsymbol{i}}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \tag{A.29}$$

A.2.2 Quadrature de Gauss-Hermite

Pour une fonction donnée $f(\xi)$ en 1-D, la quadrature de Gauss cherche à obtenir l'estimation la plus précise de $\int_a^b \omega(\xi) f(\xi) d\xi$ en choisissant l'ensemble optimal des nœuds de la quadrature $\xi_k, k = 1, \cdots, q$ tel que,

$$\int_a^b \omega(\xi) f(\xi) d\xi \simeq \sum_{k=1}^{q} w_k f(\xi_k) \tag{A.30}$$

où $\omega(\xi)$ est une fonction poids arbitraire et $w_k, k = 1, \cdots, q$ est un ensemble de constantes poids. La formule de quadrature de Gauss ci-dessus à un degré de précision algébrique d'ordre m, pour toute fonction f qui est un polynôme de degré jusqu'à m, l'égalité exacte s'obtient pour $\omega(\xi)$ donné par l'Eq. A.18. Le choix des ξ_k est fait pour maximiser le degré de précision algébrique pour un nombre de nœuds q donné. Le théorème fondamental de la quadrature de Gauss dit que, les nœuds optimaux de la quadrature de Gauss à q-nœuds sont déterminés comme les n racines du n-ième polynôme orthogonal associé à la formule de quadrature (polynômes d'Hermite pour la formule de Gauss-Hermite) :

$$w_k = \frac{\int \omega(\xi)\mathcal{H}^{(n-1)}\mathcal{H}^{(n-1)}d\xi}{\mathcal{H}^{(n-1)}(\xi_k)\frac{d\mathcal{H}^{(n)}}{d\xi}(\xi_k)} \tag{A.31}$$

La précision de la quadrature de Gauss-Hermite Eq. A.30 est de degré $2n-1$. En calculant la dérivée de l'Eq. A.19 on montre que :

$$\frac{d\mathcal{H}^{(n)}}{d\xi} = \xi\mathcal{H}^{(n)} - \mathcal{H}^{(n+1)} = n\mathcal{H}^{(n-1)} \tag{A.32}$$

L'utilisation des Eq. A.24 et A.32 donne, les poids correspondant suivants :

$$w_k = \frac{n!}{[n\mathcal{H}^{(n-1)}(\xi_k)]^2} \tag{A.33}$$

La formule de quadrature est notée par convention $E^q_{D,m}$, où D est la dimension de l'espace de configuration, $m = 2n-1$ (en 1-D) est la précision algébrique de la quadrature et $q = n$ (en 1-D) est le nombre de nœuds de la quadrature (voir Tab. A.1).

Quadrature	ξ_k	w_k
$E^1_{1,1}$	0	1
$E^2_{1,3}$	± 1	1/2
$E^2_{1,3}$	0	2/3
	$\pm\sqrt{3}$	1/6

Tab A.1 – Formule de quadrature Gauss-Hermite en 1-D. ξ_k et w_k sont les nœuds et les poids de la quadrature. La formule de quadrature est notée par convention $E^q_{D,m}$, où D est la dimension de l'espace de configuration, m est la précision algébrique de la quadrature et q est le nombre de nœuds de la quadrature.

La généralisation de la formule de quadrature précédente aux dimensions supérieures $D > 1$, est faite comme suite. Considérons, les intégrales multiples suivantes :

$$\frac{1}{(2\pi)^{(D/2)}} \int exp(-\xi^2/2)p(\boldsymbol{\xi})d\boldsymbol{\xi} \tag{A.34}$$

où $p(\boldsymbol{\xi})$ est un polynôme de dimension D et de degré q dont la forme générale est comme suite :

$$p(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{n_0+\cdots+n_{D-1}\leq q} a_{n_0\cdots n_{D-1}} \prod_{j=0}^{D-1} \xi_j^{n_j} \tag{A.35}$$

On note que pour chaque terme individuel, l'intégration est séparable et une approximation de l'intégrale peut être obtenue en appliquant la formule 1-D de façon répétitive. Soit $w_k^{(1)}$ et $\xi_k, k = 0\cdots q-1$ sont les poids et nœuds de la formule de quadrature 1-D de précision $2q-1$, pour chaque terme de l'équation ci-dessus nous pouvons écrire :

$$\frac{1}{(2\pi)^{(D/2)}}\int exp(-\xi^2/2)\prod_{j=0}^{D-1}\xi_j^{n_j}d\boldsymbol{\xi} = \prod_{j=0}^{D-1}(\frac{1}{(2\pi)^{(1/2)}}\int exp(-\xi_j^2/2)\xi_j^{n_j}d\xi_j) \quad (A.36)$$

$$= \prod_{j=0}^{D-1}(\sum_{k=0}^{q-1}w_k^{(1)}\xi_k^{n_j}) \quad (A.37)$$

$$= \sum_{k_0=0}^{q-1}\cdots\sum_{k_{D-1}=0}^{q-1}w_{k_0}^{(1)}\cdots w_{k_{D-1}}^{(1)}\xi_{k_0}^{n_0}\cdots\xi_{k_{D-1}}^{n_{D-1}} \quad (A.38)$$

où la dernière égalité est valide parce que $n_j \leq q$ pour tout j. Si nous définissons les nœuds comme les vecteurs $\boldsymbol{\xi}_k = (\boldsymbol{\xi}_0 \cdots \boldsymbol{\xi}_{q-1})$, et les poids correspondant comme $w_k = w_{0_0}^{(1)} \cdots w_{q-1_{D-1}}^{(1)}$, $\boldsymbol{\xi}_k = (\xi_{k_0}, \cdots, \xi_{k_{D-1}})$, et en multipliant l'Eq. A.38 par les coefficients $a_{n_0 \cdots n_{D-1}}$ et en sommant tous les termes, nous obtenons le formule de quadrature de Gauss-Hermite en D-dimension suivante :

$$\frac{1}{(2\pi)^{(D/2)}}\int exp(-\xi^2/2)p(\boldsymbol{\xi})d\boldsymbol{\xi} = \sum w_k p(\boldsymbol{\xi}_k) \quad (A.39)$$

En particulier une application de la formule à $E_{1,5}^3$ en 1-D, conduit à $E_{2,5}^9$ (voir Tab. A.2) en 2-D et à $E_{3,5}^{27}$ en 3-D.

Quadrature	$\boldsymbol{\xi}_k$	Groupe	q_i	w_k	
$E_{2,4}^6$	$(0,0)$	A	1	1/2	
	$2(cos\frac{2i\pi}{5}, sin\frac{2i\pi}{5})$	B	5	1/10	$i = 1, \cdots, 5$
$E_{2,5}^7$	$(0,0)$	A	1	1/2	
	$2(cos\frac{i\pi}{3}, sin\frac{i\pi}{3})$	B	6	1/12	$i = 1, \cdots, 6$
$E_{2,5}^9$	$(0,0)$	A	1	4/9	
	$\sqrt{3}(\pm1,0)$, $\sqrt{3}(0,\pm1)$	B	4	1/9	
	$\sqrt{3}(\pm1,\pm1)$	C	4	1/36	

Tab A.2 – Formule de quadrature de Gauss-Hermite en 2-D. $\boldsymbol{\xi}_k$ et w_k sont les nœuds et les poids de la quadrature. La formule de quadrature est notée par convention $E_{D,m}^q$, où D est la dimension de l'espace de configuration, m est la précision algébrique de la quadrature et q est le nombre de nœuds de la quadrature. Les groupes représentent les classes de symétrie et q_i est le nombre de nœuds de la quadrature par groupe.

En particulier, pour une précision de $m = 5$ en 3-D, la formule $E_{3,5}^{27}$ utilise tous les 27 nœuds de la grille cartésienne. En examinant, l'Eq. A.38, une formule de quadrature ne nécessitant pas tous les 27 nœuds peut être obtenue. nous notons le poids du nœuds $(0,0,0)$ par $w_{(0,0,0)}$, celui de $(0,0,\sqrt{3})$ par $w_{(0,0,1)}$ et ainsi de suite. A cause des exigences de symétrie, les poids des nœuds appartenant au même groupe de symétrie doivent être égaux, c'est à dire $w_{(0,0,1)} = w_{(0,0,-1)} = w_{(0,1,0)}$. Sans perte de généralité, posons $n_1 \leq n_2 \leq n_3$. Évidemment, $n_1 \leq 1$, puisque

$n_i \geq 0, i = 1,2,3$ et $n_1 + n_2 + n_3 \leq 5$. Pour $n_1 = 1$, l'intégrale est toujours nulle puisque l' intégrande est antisymétrique par rapport au plan $\xi_{1_1} = 0$. Tant que, les poids sont symétriques par rapport au plan $\xi_{1_1} = 0$, la somme du côté droit de l'Eq. A.38 est nulle et la quadrature est exacte. Dans le cas de $n_1 = 0$, ou l'intégrande est une fonction 2-D, la quadrature est exacte si et seulement si les poids se réduisent à ceux de $E^9_{2,5}$ en satisfaisant la relation suivante :

$$\begin{aligned} w_{(0,0,0)} + 2w_{(0,0,1)} &= 4/9 \\ w_{(0,0,1)} + 2w_{(0,1,1)} &= 1/9 \\ w_{(0,1,1)} + 2w_{(1,1,1)} &= 1/36 \end{aligned}$$

(A.40)

Quadrature	$\boldsymbol{\xi}_k$	Groupe	q_i	w_k
$E^{15}_{3,5}$	$(0,0,0)$	A	1	2/9
	$\sqrt{3}(\pm1,0,0)$, $\sqrt{3}(0,\pm1,0)$, $\sqrt{3}(0,0,\pm1)$	B	6	1/9
	$\sqrt{3}(\pm1,\pm1,\pm1)$	C	8	1/72
$E^{19}_{3,5}$	$(0,0,0)$	A	1	1/3
	$\sqrt{3}(\pm1,0,0)$, $\sqrt{3}(0,\pm1,0)$, $\sqrt{3}(0,0,\pm1)$	B	6	1/18
	$\sqrt{3}(\pm1,\pm1,0)$, $\sqrt{3}(\pm1,0,\pm1)$, $\sqrt{3}(0,\pm1,\pm1)$	C	12	1/36
$E^{19}_{3,5}$	$(0,0,0)$	A	1	8/27
	$\sqrt{3}(\pm1,0,0)$, $\sqrt{3}(0,\pm1,0)$, $\sqrt{3}(0,0,\pm1)$	B	6	2/27
	$\sqrt{3}(\pm1,\pm1,0)$, $\sqrt{3}(\pm1,0,\pm1)$, $\sqrt{3}(0,\pm1,\pm1)$	C	12	1/54
	$\sqrt{3}(\pm1,\pm1,\pm1)$	C	8	1/216

Tab A.3 – Formule de quadrature de Gauss-Hermite en 3-D. $\boldsymbol{\xi}_k$ et w_k sont les nœuds et les poids de la quadrature. La formule de quadrature est notée par convention $E^q_{D,m}$, où D est la dimension de l'espace de configuration, m est la précision algébrique de la quadrature et q est le nombre de nœuds de la quadrature. Les groupes représentent les classes de symétrie et q_i est le nombre de nœuds de la quadrature par groupe.

où le côté droit corresponds aux poids de $E^9_{2,5}$. En notant, qu'il y a une équation de moins comparé au nombre de variables, la solution générale s'obtient par une équation paramétrique :

$$\begin{pmatrix} w_{(0,0,0)} \\ w_{(0,0,1)} \\ w_{(0,1,1)} \\ w_{(1,1,1)} \end{pmatrix} = \frac{1}{72} \begin{pmatrix} 8(2-t) \\ 4(t-2) \\ 2t \\ 1-t \end{pmatrix}$$

(A.41)

Pour $t = 0$ et $t = 1$, nous obtenons les forumules de quadrature $E_{3,5}^{15}$ et $E_{3,19}^{19}$ utilisant 15 et 19 nœuds, respectivement. En plus, la formule de quadrature $E_{3,5}^{27}$ correspond à $t = 2/3$. Le Tab. A.3 récapitule les formules de quadrature en 3-D pour une précision de degré 5.

Annexe B

Annexe : La méthode de Boltzmann sur réseau pour la modélisation d'un fluide diphasique

Sommaire

B.1 Tenseur de contrainte du modèle SC LBM 219
B.2 Définition de la tension de surface γ^{lv} 220
B.3 Calcul de la courbure locale signée 222

B.1 Tenseur de contrainte du modèle SC LBM

Dans cette annexe nous détaillons le calcul du tenseur de contrainte du SC LBM. Pour ce faire partons de l'expression de la i^{eme} composante de la force d'intercation noté $\mathbf{f}^{int}$ ici,

$$f_i^{int}(\mathbf{x},t) = -\mathcal{G}\psi(\mathbf{x},t)\sum_k w_k\psi(\mathbf{x}+\boldsymbol{\xi}_k\Delta t,t)\xi_{k,i} \tag{B.1}$$

Considérons un état stationnaire de $\mathbf{f}^{int}$ à l'équilibre thermodynamique, c'est à dire $\mathbf{f}^{int}(\mathbf{x},t) = \mathbf{f}^{int}(\mathbf{x})$, le développement en série de Taylor de $\mathbf{f}^{int}$ jusqu'à l'ordre 3 nous donne,

$$\begin{aligned} f_i^{int}(\mathbf{x}) = -\mathcal{G}\psi(\mathbf{x})\Bigg[&\sum_k w_k\psi(\mathbf{x})\xi_{k,i} + \Delta t\sum_{k,j} w_k\frac{\partial\psi(\mathbf{x})}{\partial x_j}\xi_{k,i}\xi_{k,j} \\ &+\frac{(\Delta t)^2}{2}\sum_{k,j,l} w_k\frac{\partial^2\psi(\mathbf{x})}{\partial x_j\partial x_l}\xi_{k,i}\xi_{k,j}\xi_{k,l} + \frac{(\Delta t)^3}{6}\sum_{k,j,l,m} w_k\frac{\partial^3\psi(\mathbf{x})}{\partial x_j\partial x_l\partial x_m}\xi_{k,i}\xi_{k,j}\xi_{k,l}\xi_{k,m}\Bigg] \end{aligned} \tag{B.2}$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker. Choisissons les poids w_k de sorte à satisfaire les relations suivantes :

$$\begin{gathered} \textstyle\sum_k w_k\xi_{k,i} = 0 \\ \textstyle\sum_k w_k\xi_{k,i}\xi_{k,j} = c_s^2\delta_{ij} \\ \textstyle\sum_k w_k\xi_{k,i}\xi_{k,j}\xi_{k,l} = 0 \\ \textstyle\sum_k w_k\xi_{k,i}\xi_{k,j}\xi_{k,l}\xi_{k,m} = c_s^4(\delta_{ij}\delta_{lm}+\delta_{il}\delta_{jm}+\delta_{im}\delta_{jl}) \end{gathered} \tag{B.3}$$

Ces relations sont respectées par les poids des schémas D_2Q_9 et D_{3Q19}. Alors nous aboutissons à l'expression suivante pour la $i^{ème}$ composante de $\mathbf{f}^{int}$:

$$f_i^{int} = -\mathcal{G}\psi\Delta t c_s^2 \frac{\partial \psi}{\partial x_i} - \mathcal{G}\psi \frac{(\Delta t)^3}{2} c_s^4 \frac{\partial \Delta\psi}{\partial x_i} \tag{B.4}$$

où $\Delta\psi$ est le Laplacien de ψ. Cette expression pour la force d'intercation peut être facilement traduite en excès de contrainte en plus de l'expression de l'équation des gaz parfaits $c_s^2\rho$ en utilisant la définition,

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial c_s^2 \rho}{\partial x_i} = f_i^{int} \tag{B.5}$$

et ainsi, nous déterminons un tenseur de contrainte de la forme :

$$\sigma_{ij}(\mathbf{x}) = -\Big[c_s^2\rho(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t}{2} c_s^2 \mathcal{G}\psi^2(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t^3}{2} c_s^4 \mathcal{G}\psi(\mathbf{x})\Delta\psi(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t^3}{4} c_s^4 \mathcal{G}|\nabla\psi(\mathbf{x})|^2\Big]\delta_{ij} + \frac{\Delta t^3}{2} c_s^4 \mathcal{G} \frac{\partial \psi(\mathbf{x})}{\partial x_i}\frac{\partial \psi(\mathbf{x})}{\partial x_j} \tag{B.6}$$

Il est important de noter que comme l'expression purement théorique de la contrainte donnée en Eq. 3.28, le tenseur de contrainte discret à une contribution associée au potentiel d'interaction. Cette expression déterminée ici dépend explicitement de la plage d'interaction de la force, qui est de l'ordre de $c_s\Delta t$. La limite $\Delta t \to 0$, devrait alors faire tendre vers zéro la plage d'interaction, c'est à dire vers la limite du gaz parfait $\lim_{\Delta t \to 0} \sigma_{ij} = -c_s^2\rho\delta_{ij}$.

B.2 Définition de la tension de surface γ^{lv}

Considérons un système liquide-vapeur dans lequel il est possible de définir sans ambiguité les valeurs locales des champs thermodynamiques. Considérons le cas d'une interface liquide-vapeur plane (Fig. B.1), les champs thermodynamiques et les densités dépendent seulement de x. Considérons que ce système liquide-vapeur soit contenue dans unc cube de côté l, ainsi la section transversale est donnée par $S = l^2$. Supposons que l'origine $O(0,0,0)$ du repère soit située au centre du domaine. L'interface séparant les deux domaines volumiques liquide et vapeur est d'une épaisseur δ dans la direction $\mathbf{e}_x$. La masse totale M et l'energie libre de Helmholtz Ψ sont données par :

$$M = S\int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} \rho(x)dx, \quad \Psi = S\int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} h(x)dx \tag{B.7}$$

où ρ et h sont respectivement les densité massique et d'énergie libre de Helmholtz. A l'équilibre thermodynamique le tenseur de contrainte est définie en fonction du champ de densité par l'expression donnée en Eq. B.6.

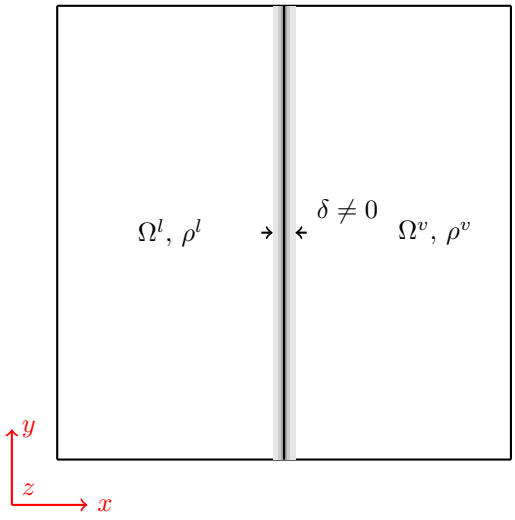


Fig B.1 – interface liquide-vapeur Γ^{lv} plane de normale $\mathbf{e}_x$ dans le système de coordonnées $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$

Ainsi, la contrainte est isotrope dans les phases volumiques et anisotrope dans l'épaisseur de l'interface. La stabilité mécanique partout dans le fluide réquiert que :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 \tag{B.8}$$

La symetrie de la surface requiert que $\boldsymbol{\sigma}$ soit un tenseur diagonal :

$$\boldsymbol{\sigma}(x) = \sigma_{xx}(x)\mathbf{e}_x \otimes \mathbf{e}_x + \sigma_{yy}(x)\mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_y + \sigma_{zz}(x)\mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z \tag{B.9}$$

avec $\sigma_{yy}(x) = \sigma_{zz}(x)$. Notons $\sigma_{nn}(x) = \sigma_{xx}(x)$ et $\sigma_{tt}(x) = \sigma_{yy}(x) = \sigma_{zz}(x)$ comme composantes normale et tengentielle de $\boldsymbol{\sigma}$ à l'interface liquide-vapeur. Si la section transversale de normale $\mathbf{e}_x$ du cube est déplacée en condition isotherme et réversible de sorte à augmenter sa surface de ΔS, cela correspond à,

$$\Delta\boldsymbol{\sigma}(x) = \Delta\sigma_{tt}(x)(\mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z) \tag{B.10}$$

et,

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}(x) = \frac{\Delta S}{2l^2}(\mathbf{e}_y \otimes \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z) \tag{B.11}$$

et donc à un travail du système égale à,

$$\Delta W_t = \int_V \Delta\boldsymbol{\sigma}(x) : \Delta\boldsymbol{\varepsilon}(x) dv = \Delta S \int_{-l/2}^{l/2} \sigma_{tt}(x) dx \tag{B.12}$$

où ΔW_t appelé travail tangentiel. Un déplacement similaire de l'une des sections en $x = \pm l/2$ de la distance $\Delta S/l$ sert à maintenir le volume constant, et requiert alors un travail normal ΔW_n,

$$\Delta\boldsymbol{\sigma}(x) = \Delta\sigma_{nn}(x)\mathbf{e}_x \otimes \mathbf{e}_x \tag{B.13}$$

et,

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}(x) = -\frac{\Delta S}{l^2}\mathbf{e}_x \otimes \mathbf{e}_x \tag{B.14}$$

et donc à un travail du système égale à,

$$\Delta W_n = \int_V \Delta\boldsymbol{\sigma}(x) : \Delta\boldsymbol{\varepsilon}(x)dv = -\Delta S \int_{-l/2}^{l/2} \sigma_{nn}(x)dx \tag{B.15}$$

Ainsi le travail total produit, et ainsi l'accroissement de l'énergie libre est :

$$\Delta\Psi = \Delta W_t + \Delta W_n = -\Delta S \int_{-l/2}^{l/2} \sigma_{nn}(x) - \sigma_{tt}(x)dx \tag{B.16}$$

Et comme nous sommes à volume, température et potentiel chimique constant en présence d'une tension de surface l'accroissement d'énergie libre de Helmoltz se réduit à :

$$\Delta\Psi = \gamma^{lv}\Delta S \tag{B.17}$$

alors nous pouvons en déduire la définition de la tension de surface liquide-vapeur,

$$\gamma^{lv} = -\int_{\Gamma^{lv}} \sigma_{nn}(x) - \sigma_{tt}(x)d\delta \tag{B.18}$$

où nous avons utilisé le fait que les $\sigma_{nn} - \sigma_{tt}$ est non nul seulement dans l'épaisseur de l'interface. Ici $d\delta$ fait référence à une intégration le long de l'épaisseur de l'interface Γ^{lv}.

B.3 Calcul de la courbure locale signée

L'opérateur de divergence surfacique donnée par l'Eq. 3.59 appliquée au tenseur d'identité tangentielle $\mathbf{1}_T$ donne,

$$\begin{aligned}
[\nabla_T \cdot \mathbf{1}_T]_i &= \frac{\partial(1_T)_{ij}}{\partial x_k}(1_T)_{jk} \\
&= -\frac{\partial(n_i n_j)}{\partial x_k}(\delta_{jk} - n_j n_k) \\
&= -(\frac{\partial n_i}{\partial x_k}n_j + n_i\frac{\partial n_j}{\partial x_k})(\delta_{jk} - n_j n_k) \\
&= -\frac{\partial n_i}{\partial x_k}n_j\delta_{jk} - n_i\frac{\partial n_j}{\partial x_k}\delta_{jk} + \frac{\partial n_i}{\partial x_k}n_j^2 n_k + n_i\frac{\partial n_j}{\partial x_k}n_j n_k \\
&= -(\delta_{jk} - n_j n_k)\frac{\partial n_j}{\partial x_k}n_i \cancel{- \frac{\partial n_i}{\partial x_k}n_k + \frac{\partial n_i}{\partial x_k}n_j^2 n_k}
\end{aligned} \tag{B.19}$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker. A parir de la dernière expression de l'Eq. (B.19), nous avons :

$$\nabla_T \cdot \mathbf{1}_T = -(\mathbf{1}_T : \nabla\mathbf{n})\mathbf{n} \text{ sur } \Gamma^{\alpha\beta} \tag{B.20}$$

Cette expression correspond à la courbure locale signée.

Annexe C

Annexe : La réponse mécanique en condition non saturée des microstructures poreuses

Sommaire

C.1 Moyenne des contraintes en présence des tensions de surface solide-liquide, solide-vapeur et liquide-vapeur 223

C.2 Tenseur d'Eshelby d'une inclusion ellipsoïdale de revolution allongée dans un milieu isotrope 225

C.1 Moyenne des contraintes en présence des tensions de surface solide-liquide, solide-vapeur et liquide-vapeur

Considérons un vecteur déplacement virtuel $\mathbf{u}'$ (respectivement $\boldsymbol{\varepsilon}'$, le tenseur de déformation d'ordre 2 correspondant) défini dans le domaine solide et étendue au domaine fluide. En utilisant la relation suivante valable pour un tenseur d'ordre 2 $\mathbf{P}$ et un vecteur $\mathbf{b}$, tous les deux quelconques :

$$(\nabla \cdot \mathbf{P}) \cdot \mathbf{b} = \nabla \cdot (\mathbf{P} \cdot \mathbf{b}) - \mathbf{P} : \nabla \mathbf{b}, \tag{C.1}$$

nous avons :

$$\int_{\Omega^\alpha} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^\alpha) \cdot \mathbf{u}' dv = \int_{\Omega^\alpha} \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}^\alpha \cdot \mathbf{u}') dv - \int_{\Omega^\alpha} \boldsymbol{\sigma}^\alpha : \nabla \mathbf{u}' dv \ \alpha = s, l, v, \tag{C.2}$$

où α fait référence dans notre cas au domaine solide, liquide et vapeur. L'application du théorème de la divergence au premier terme de droite de l'Eq. (C.4),

$$\int_{\Omega^\alpha} \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}^\alpha \cdot \mathbf{u}') dv = \int_{\partial\Omega^\alpha} \boldsymbol{\sigma}^\alpha \cdot \mathbf{u}' \cdot \mathbf{n}^{ext} ds - \sum_\beta \int_{\Gamma^{\alpha\beta}} \boldsymbol{\sigma}^\alpha \cdot \mathbf{u}' \cdot \mathbf{n}^\beta ds, \tag{C.3}$$

alors que l'utilisation de la symétrie de $\boldsymbol{\sigma}^\alpha$ nous donne pour le second terme de droite de l'Eq. (C.4) :

$$\int_{\Omega^\alpha} \boldsymbol{\sigma}^\alpha : \nabla \mathbf{u}' dv = \int_{\Omega^\alpha} \boldsymbol{\sigma}^\alpha : \boldsymbol{\varepsilon}' dv \tag{C.4}$$

où nous avons remplacé $\boldsymbol{\varepsilon}' = \frac{1}{2}[\nabla \mathbf{u}' + (\nabla \mathbf{u}')^T]$ avec l'exposant ^{T} représentant la transposition d'un tenseur. Nous aboutissons à l'égalité suivante pour chaque domaine volumique Ω^α :

$$\int_{\partial\Omega^\alpha} \boldsymbol{\sigma}^\alpha \cdot \mathbf{u}' \cdot \mathbf{n}^{ext} ds - \sum_\beta \int_{\Gamma^{\alpha\beta}} \boldsymbol{\sigma}^\alpha \cdot \mathbf{u}' \cdot \mathbf{n}^\beta ds - \int_{\Omega^\alpha} \boldsymbol{\sigma}^\alpha : \boldsymbol{\varepsilon}' dv = 0. \tag{C.5}$$

L'addition des contributions des 3 domaines $\Omega^\alpha, \alpha = s, l, v$, en notant que $\mathbf{n}^\alpha = -\mathbf{n}^\beta$ et $[\![\mathbf{u}]\!] = \mathbf{0}$ sur $\Gamma^{\alpha\beta}$, nous avons :

$$\sum_\alpha \left[\int_{\partial\Omega^\alpha} \boldsymbol{\sigma}^\alpha \cdot \mathbf{u}' \cdot \mathbf{n}^{ext} ds - \int_{\Omega^\alpha} \boldsymbol{\sigma}^\alpha : \varepsilon' dv \right] + \sum_{\alpha\beta} \int_{\Gamma^{\alpha\beta}} (\nabla_T \cdot \boldsymbol{\sigma}^m) \cdot \mathbf{u}' ds = 0, \tag{C.6}$$

où $\alpha = s, l, v$, $\alpha\beta = sl, sv, lv$ et l'équation d'équilibre Eq. (**??**) de l'interface $\Gamma^{\alpha\beta}$ a été utilisée. L'utilisation de la relation :

$$(\nabla_T \cdot \mathbf{P}) \cdot \mathbf{b} = \nabla_T \cdot (\mathbf{P} \cdot \mathbf{b}) - \mathbf{P} : \nabla_T \mathbf{b}, \tag{C.7}$$

valable pour un tenseur d'ordre 2 $\mathbf{P}$ et un vecteur $\mathbf{b}$, tous les deux quelconques, nous donnes :

$$\int_{\Gamma^{\alpha\beta}} (\nabla_T \cdot \boldsymbol{\sigma}^m) \cdot \mathbf{u}' ds = \int_{\Gamma^{\alpha\beta}} \nabla_T \cdot (\boldsymbol{\sigma}^m \cdot \mathbf{u}') ds - \int_{\Gamma^{\alpha\beta}} \boldsymbol{\sigma}^m : \nabla_T \mathbf{u}' ds, \tag{C.8}$$

L'utilisation du théorème de Stokes nous conduit à :

$$\int_{\Gamma^{\alpha\beta}} \nabla_T \cdot (\boldsymbol{\sigma}^m \cdot \mathbf{u}') ds = \int_{\partial\Gamma^{\alpha\beta}} \boldsymbol{\sigma}^m \cdot \mathbf{u}' \cdot \mathbf{m}^{ext} dl + \int_{\mathcal{L}^{\alpha\beta\iota}} \boldsymbol{\sigma}^m \cdot \mathbf{u}' \cdot \mathbf{m}^\iota dl, \tag{C.9}$$

où $\partial\Gamma^{\alpha\beta} \equiv \partial\Omega \cap \Gamma^{\alpha\beta}$ est l'ensemble des lignes d'intersection entre le contour extérieur $\partial\Omega$ et l'interface intérieur $\Gamma^{\alpha\beta}$. Tandis que $\mathcal{L}^{\alpha\beta\iota} \equiv \Gamma^{\alpha\beta} \cap \Gamma^{\alpha\iota} \cap \Gamma^{\beta\iota}$ est la ligne contact ou ligne d'intersection des trois interfaces. $\mathbf{m}^{ext}$ et $\mathbf{m}^\iota$ sont les normales unitaires respectivement aux lignes $\partial\Gamma^{\alpha\beta}$ et $\mathcal{L}^{\alpha\beta\iota}$ et orientées vers l'extérieur et le domaine Ω^ι. En additionnant, les contributions des trois interfaces $\Gamma^{\alpha\beta}$, sur la ligne triple $\mathcal{L}^{\alpha\beta\iota}$ l'utilisation de la Loi de Young pour la définition de l'angle de contact (Eq. (3.55)) et en négligeant les forces d'arrachement induit par la tension de surface liquide-vapeur annule le second terme de droite de l'Eq. (C.9), alors :

$$\sum_{\alpha\beta} \int_{\Gamma^{\alpha\beta}} \nabla_T \cdot (\boldsymbol{\sigma}^m \cdot \mathbf{u}') ds = \sum_{\alpha\beta} \int_{\partial\Gamma^{\alpha\beta}} \boldsymbol{\sigma}^m \cdot \mathbf{u}' \cdot \mathbf{m}^{ext} dl. \tag{C.10}$$

Pour le second terme de droite de l'Eq. (C.8), nous utilisons la relation $\nabla_T \mathbf{b} = (\nabla \mathbf{b}) \cdot \mathbf{1}_T$ et la symétrie de $\boldsymbol{\sigma}^m$ pour montrer que :

$$\int_{\Gamma^{\alpha\beta}} \boldsymbol{\sigma}^m : \nabla_T \mathbf{u}' ds = \int_{\Gamma^{\alpha\beta}} \boldsymbol{\sigma}^m : \boldsymbol{\varepsilon}' ds, \tag{C.11}$$

Alors en remplaçant les Eq. (C.10) et (C.11) dans l'Eq. (C.6), nous avons :

$$\sum_{\alpha}\int_{\partial\Omega^{\alpha}}\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}\cdot\mathbf{u}'\cdot\mathbf{n}^{ext}ds+\sum_{\alpha\beta}\int_{\partial\Gamma^{\alpha\beta}}\boldsymbol{\sigma}^{m}\cdot\mathbf{u}'\cdot\mathbf{m}^{ext}dl=\sum_{\alpha}\int_{\Omega^{\alpha}}\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}:\boldsymbol{\varepsilon}'dv+\sum_{\alpha\beta}\int_{\Gamma^{\alpha\beta}}\boldsymbol{\sigma}^{m}:\boldsymbol{\varepsilon}'ds, \quad \text{(C.12)}$$

Nous supposons que le déplacement $\mathbf{u}'$ est cinématiquement admissible avec la contrainte macroscopique $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}$. L'Eq. (C.12) est vérifiée quelque soit le choix de $\mathbf{u}'$, en particulier sous l'hypothèse d'une condition aux limites périodique $\mathbf{u}'=\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\mathbf{x}+\mathbf{u}^{\#}$ ($\mathbf{u}^{\#}$ périodique) nous avons :

$$\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}:\left(\sum_{\alpha}\int_{\partial\Omega^{\alpha}}\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}\cdot\mathbf{x}\cdot\mathbf{n}^{ext}ds+\sum_{\alpha\beta}\int_{\partial\Gamma^{\alpha\beta}}\boldsymbol{\sigma}^{m}\cdot\mathbf{x}\cdot\mathbf{m}^{ext}dl\right)=\sum_{\alpha}\int_{\Omega^{\alpha}}\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}:\boldsymbol{\varepsilon}'dv+\sum_{\alpha\beta}\int_{\Gamma^{\alpha\beta}}\boldsymbol{\sigma}^{m}:\boldsymbol{\varepsilon}'ds, \quad \text{(C.13)}$$

Dans le cas d'interfaces fermées nous $\sum_{\alpha\beta}\int_{\partial\Gamma^{\alpha\beta}}\boldsymbol{\sigma}^{m}\cdot\mathbf{x}\cdot\mathbf{m}^{ext}=0$ et nous obtenons :

$$\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}:\overline{\boldsymbol{\sigma}}|\Omega|=\sum_{\alpha}\int_{\Omega^{\alpha}}\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}:\boldsymbol{\varepsilon}'dv+\sum_{\alpha\beta}\int_{\Gamma^{\alpha\beta}}\boldsymbol{\sigma}^{m}:\boldsymbol{\varepsilon}'ds, \quad \text{(C.14)}$$

où la quantité :

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}}=\frac{1}{|\Omega|}\sum_{\alpha}\int_{\Omega^{\alpha}}\boldsymbol{\sigma}^{\alpha}dv+\frac{1}{|\Omega|}\sum_{\alpha\beta}\int_{\Gamma^{\alpha\beta}}\boldsymbol{\sigma}^{m}ds, \quad \text{(C.15)}$$

est définie comme la contrainte macroscopique.

C.2 Tenseur d'Eshelby d'une inclusion ellipsoïdale de revolution allongée dans un milieu isotrope

Cette section, donne l'expression analytique d'un tenseur d'Eshelby d'une inclusion ellipsoïdale de revolution dans un milieu élastique isotrope infini caractérisé par son tenseur des modules élastiques $\mathbb{C}^s$. Considérons que l'axe de révolution de l'éllipsoïde allongée est $\mathbf{e}_3$. Alors les axes $\mathbf{e}_1$ et $\mathbf{e}_2$ sont de longueur identique et inférieur à celle de $\mathbf{e}_3$, c'est à dire $r_2=r_1<r_3$, avec les $r_i, i=1,2,3$ les rayons de l'éllipsoïde. Le rapport d'aspect de forme de l'éllipsoïde est définit noté α, est définit par :

$$\alpha=\frac{r_1}{r_3}. \quad \text{(C.16)}$$

Introduisons la notation suivante :

$$A=\frac{3}{8\pi(1-\nu^s)}, \quad \text{(C.17)}$$

avec ν^s le coefficient de Poisson du milieu élastique isotrope infini,

$$B=\frac{1-2\nu^s}{8\pi(1-\nu^s)}, \quad \text{(C.18)}$$

$$I_1 = \frac{2\pi}{\alpha}\frac{(1/\alpha)\sqrt{(1/\alpha)^2-1} - argch(1/\alpha)}{[(1/\alpha)^2-1]^{3/2}}, \tag{C.19}$$

$$I_3 = 4\pi - 2I_1, \tag{C.20}$$

$$I_{13} = -\frac{I_1 - I_3}{3[1-(1/\alpha)^2]}, \tag{C.21}$$

$$I_{12} = \frac{\pi}{3} - \frac{I_{13}}{4}, \tag{C.22}$$

$$I_{11} = 3I_{12}, \tag{C.23}$$

et,

$$I_{33} = \frac{4\pi}{3}\alpha^2 - 2I_{13}. \tag{C.24}$$

Les diverses composantes indépendantes et non nulles du tenseur d'Eshelby sont données par les formules suivantes :

$$S_{1111} = AI_{11} + BI_1, \tag{C.25}$$

$$S_{3333} = \frac{A}{\alpha^2}I_{33} + BI_3, \tag{C.26}$$

$$S_{1122} = AI_{12} - BI_1, \tag{C.27}$$

$$S_{1133} = \frac{A}{\alpha^2}I_{13} - BI_1, \tag{C.28}$$

$$S_{3311} = AI_{13} - BI_3, \tag{C.29}$$

$$S_{2323} = (A/2)(1+1/\alpha^2)I_{13} + (B/2)(I_1+I_3). \tag{C.30}$$

L'isotropie transverse et les rôles symétrique joué par les axes $\mathbf{e}_1$ et $\mathbf{e}_2$ impliquent que le cœfficient S_{1212} s'écrit :

$$S_{1212} = \frac{1}{2}(S_{1111} - S_{1122}). \tag{C.31}$$

Les autres composantes non nulles sont obtenues a partir des Eq. (C.25)-(C.31) par permutation entre l'axe $\mathbf{e}_1$ et l'axe $\mathbf{e}_2$ et par permutation entre les deux premiers indices et/ou les deux derniers (par exemple $S_{2222} = S_{1111}$ ou encore $S_{3131} = S_{1313} = S_{1331} = S_{2323}$ etc.). Toutes les composantes dont les indices ne peuvent se ramener, par ce procédé a ceux de l'une des expressions (C.25)-(C.31) sont nulles (par exemple $S_{1112} = 0$).

Bibliographie

Acker, P., 2001. Micromechanical analysis of creep and shrinkage mechanisms. Creep, shrinkage and durability mechanics of concrete and other quasi-brittle materials (Proceedings of ConCreep-6@MIT), Elsevier, London, 15–25. *p. 24*

Acker, P., 2003. Sur les origines du retrait et du fluage du béton. Revue française de génie civil 7 (6), 761–776. *p. 19, 25, 27 et 28*

Acker, P., Ulm, F.-J., 2001. Creep and shrinkage of concrete : physical origins and practical measurements. Nuclear Engineering and Design 203, 143–158. *p. 9, 11, 12 et 29*

Barbarulo, R., 2002. Comportment des matériaux cimentaires : actions des sulfates et de la température. Ph.D. thesis, École nationale supérieure, Cachan, France. *p. xiv, 112 et 113*

Bazant, Z.P.and Chern, J., 1985. Concrete creep at variable humidity : constitutive law and mechanism. Materials and Structures 18 (103), 1–20. *p. 29 et 30*

Bazant, Z., 1971. Numerically stable algorithm with increasing time steps for integral-type aging creep. In T. Jaeger(Ed.), Proc. of 1st Int. Conf. on Struct. Mech. in Reactor Tech. (SMiRT-1), 119–126. *p. 118, 137 et 189*

Bazant, Z., 1972. Thermodynamics of hindered adsorption with application to cement paste and concrete. Cement and Concrete Research 2 (1), 1–16. *p. 21*

Bazant, Z., Asghari, A., Schmidt, J., 1976. Experimental study of creep of hardened portland cement paste at variable water content. Matériaux et Construction 9 (4), 279–290. *p. 13*

Bazant, Z., Cusatis, G., Cedolin, L., 2004. Temperature effect on concrete creep modeled by microprestress-solidification theory. Journal of Engineering Mechanics 130 (6). *p. 29, 118, 137 et 153*

Bazant, Z., Hauggaard, A., Beweja, S., 1997a. Microprestress-solidification theory for concrete creep. I : Aging and drying effects. Journal of Engineering Mechanics 123 (11), 1188–1194. *p. xi, 18, 19, 20, 21, 22, 26, 27, 30, 118, 126, 129 et 154*

Bazant, Z., Hauggaard, A., Beweja, S., 1997b. Microprestress-solidification theory for concrete creep. II : Algorithm and verification. Journal of Engineering Mechanics 123 (11). *p. xix, 27, 118, 137, 153 et 154*

Bazant, Z., Prasannan, S., 1989a. Solidification theory for concrete creep.I : Formulation. Journal of Engineering Mechanics 115 (8), 23755. *p. 118, 126, 128, 129 et 149*

Bazant, Z., Prasannan, S., 1989b. Solidification theory for concrete creep.II : Verification and application. Journal of Engineering Mechanics 115 (8), 23756. *p. xix, 118, 137, 152 et 153*

Bazant, Z., Xi, Y., 1995. Continuous retardation spectrum for solidification theory of concrete creep. Journal of Engineering Mechanics 121 (2), 5521. *p. 130*

Benboudjema, F., Meftah, F., et Torrenti, J., 2007. A viscoelastic approach for the assessment of the drying shrinkage behaviour of cementitious materials. Materials and Structures 40, 163–174. *p. 29 et 30*

Benzi, R., Biferale, L., Sbragaglia, M., Succi, S.and Toschi, F., 2006. Mesoscopic modeling of a two-phase in the presence of boundaries : the contact angle. Physicals Review E. 74 (2). *p. 98*

Bernard, O., Ulm, F.-J., Germaine, J., 2003. Volume and deviator creep of calcium-leached cement-based materials. Cement and Concrete Research 33, 1127–1136. *p. 12, 25 et 26*

Bhatnagar, P., Gross, P., Krook, M., 1954. A model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. Physical Review 94 (3), 511–525. *p. 49, 91 et 92*

Bogoliubov, N., 1946. Kinetics equations. Journal of Physics USSR 10 (3), 265–274. *p. 46 et 87*

Brooks, J., 2005. 30-year creep and shrinkage of concrete. Magazine of Concrete Research 57 (9), 545–556. *p. 9, 12 et 13*

Bryant, A., Vadhanavikkit, C., 1987. Creep, shrinkage-size, and age at loading effects. American concrete institute, Materials Journal 84, 117–123. *p. 11*

Callen, H., 1985. Thermodynamics and an introduction to thermostatics. Second Ed., Wiley, New York. *p. 102*

Carnahan, N. F., Starling, K. E., 1969. Equation of state for nonattracting rigid spheres. Journal of Chemical Physics 51 (635). *p. xiii, 87, 95, 102 et 134*

CEA, 2012. Mfront. `http://tfel.sourceforge.net`. *p. 131*

Cercignani, C., 1988. The boltzmann equation and its applications. Springer-Verlag,New York. *p. 48 et 49*

Cercignani, C., 1991. The mathematical theory on non uniform gases : An account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases. Cambrige University Press, Cambridge. *p. 88*

Chapman, S., Cowling, T., 1970. The mathematical theory of nonuniform gases. Cambridge University Press, Cambridge. *p. 54 et 94*

Charpin, L., Sanahuja, J., 2017. Creep and relaxation poisson's ratio : Back to the foundations of linear viscoelasticity. application to concrete. International Journal of Solids and Structures 110-111, 2–14. *p. 127*

Coddington, E., 1998. An introduction to ordinary differential equations. Dover Publications, Inc, New York. *p. 63*

Courault, A.-C., 2001. Stoechiométrie des $c-s-h$ et propriétés dans différents environnements chimiques. modélisation expérimentale. Ph.D. thesis, Université de Bourgogne, Dijon, France. *p. xiv et 112*

Coussy, O., 2004. Poromechanics. John Wiley & Sons, Ltd. *p. 111 et 119*

Day, R., Cuffaro, P., Illston, J., 1984. The effect of rate of drying on the drying creep of hardened cement paste. Cement and Concrete Research 14 (4), 329–338. *p. xi, 10, 31 et 32*

Diu, B., Guthmann, C., Lederer, D., Roulet, B., 1996. Eléments de physique statistique. in french. *p. 51*

Dormieux, L., Kondo, D., Ulm, F.-J., 2006. Microporomechanics. John Wiley & Sons, Ltd. *p. 107, 120, 141, 142, 163, 169 et 173*

EDF, R., 1989. Code_aster. http://www.code-aster.org. *p. 131*

EDF, R., 2001. Salomé_méca. http://www.salome-platform.org. *p. 131*

Feldman, R., Sereda, P., 1968. The model for hydrated portland cement as deduced from sorption-length change and mechanical properties. Materials and Construction 1, 509–520. *p. xi, 14, 15 et 24*

Feldman, R., Sereda, P., 1970. new model for hydrated portland cement and its practical implications. Engineering Journal 53 (819), 53–59. *p. 18 et 28*

Ghia, U., Ghia, K., Shin, C., 1982. High resoluton of navier-stokes equations in primitive variables. Journal of computational physics 48, 387–411. *p. xii et 76*

Gmira, A., Zabat, M., Pellenq, R., J.-M., Van Damme, H., 2004. Microscopic physical basis of the poromechanical behavior of cement-based materials. Materials and Structures, Concrete Science and Engineering 37, 3–14. *p. 18, 20, 25 et 28*

Grad, H., 1949a. Note on n-dimensional hermite polynomials. Communications on Pure and Applied Mathematics 2, 325–330. *p. 58, 59 et 93*

Grad, H., 1949b. On the kinetic theory of rarefied gases. Communications on Pure and Applied Mathematics 2, 331. *p. 58 et 93*

Granger, L., 1996. Comportement différé du béton dans les enceintes de centrales nucléaires : analyse et modélisation. Ph.D. thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, Marne-La-Vallée, France. *p. 9, 18 et 19*

Granger, L., Torrenti, J.-M., Acker, P., 1997. Thoughts about drying shrinkage : Experimental results and quantification of structural drying creep. Nuclear Engineering and Design 30, 588–598. *p. 9 et 10*

Gunstensen, A., Rothmann, D., Zaleski, G., Zanetti, G., 1991. Lattice boltzmann model of immiscible fluids. Physical review E 65 (4), 046308. *p. 92*

Hansen, T. C., 1960a. Creep and stress relaxation in concrete. Proceeding No. 31, Swedish Cement and Concrete Institute, Royal Institute of Technology. *p. 9*

Hansen, T. C., 1960b. Creep of concrete : the influence of variations in the humidity of ambient atmosphere. 6th Congr. of the Int. Assoc. Of Bridge and Struct. Engrg. (IBASE). *p. 9*

He, X., Chen, S., Zhang, R., 1999. A lattice boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of rayleigh-taylor instability. Journal of Computational Physics 152, 642–663. *p. 92*

Huang, K., 1987. Statistical Mechanics. 2nd Edition. *p. 45 et 49*

Irving, J., Kirkwood, J., 1950. The statistical mechanical theory of transport processes. iv. the equations of hydrodynamics. The Journal of Chemical Physics 18, 817. *p. 90*

Ishai, O., 1968. The time-dependent deformational behaviour of cement paste, mortar and concrete. Proceedings of International Conference On the Structure of Concrete, Cement and Concrete, Association, London, England, 345–364. *p. 24*

Jennings, H., 2004. Colloid model of c-s-h and implications to the problem of creep and shrinkage. Materials and Structures, Concrete Science and Engineering 37, 59–70. *p. xi, 14, 15, 18 et 28*

Jirasek, M., Havlasek, P., 2014. Accurate approximations of concrete creep compliance functions based on continuous retardation spectra. Computers and Structures 135, 155–168. *p. xix, 130, 152 et 153*

Kolver, K., 1999. A new look at the problem of drying creep of concrete under tension. Journal of Materials in Civil Engineering 11 (1), 84–87. *p. 12 et 29*

Komendant, G., Polivka, M., Pirtz, D., 1976. Study of concrete properties for prestressed concrete reactor vessels ; part ii, creep and strength characteristics of concrete at elevated temperatures. Report No. UC SESM 76 (3). *p. xv, xix, 151 et 152*

Kupershtokh, A., Medvedev, D., Karpov, D., 2009. On equations of state in a lattice boltzmann method. Computer, Mathematics with applications 58 (5), 965–959. *p. 103*

Laws, N., 1973. On the thermostatics of composite materials. J. Mech. Phys. Solids 21, 9–17. *p. 163*

Le Chatelier, H., 1900. Sur les changements de volume qui accompagnent le durcissement des ciments. Bulletin de la Société pour l'Encouragement de l'Industrie Nationale 5e Série (tome 5), 54–57. *p. 18 et 19*

Lee, T.-C., Kashyap, R., Chu, C.-N., 1994. Building skeleton models via 3-d medial surface/axis thinning algorithms. Computer Vision, Graphics, and Image Processing 56 (6), 462–478. *p. 108*

Levin, V., 1967. Thermal expansion cœfficient of heterogeneous materials. Mekh. Tverd. Tela. 2, 83–94. *p. 163*

L'Hermite, R., Marnillan, M., Lefèvre, C., 1965. Nouveaux résultats de recherches sur la défonnation et la rupture du béton. Supplément aux annales de L'institut technique du bâtiment et des travaux publics 207/208, 325–345 (in French). *p. xi, xvi, xix, 33, 154 et 155*

L'Hermite, R., Marnillan, M., Lefèvre, C., 1968. Further results of shrinkage and creep tests. Proc. Int. Conf. on the Structure of Concrete. Cement and Concrete Assoc. London, England,, 423–433. *p. xi et 33*

Lorensen, W., Cline, H., 1987. Marching cubes : A high resolution 3d surface construction algorithm. Computer Graphics 21 (4), 163–170. *p. 136*

Martin, B., 2012. Statistics for physical sciences, an introduction. Elsevier, Oxford. *p. 50*

Martys, N., 1999. Energy conserving discrete boltzmann equation for nonideal systems. International Journal of Modern Physcics C 10 (7), 1367–1382. *p. 90 et 92*

Martys, N., Chen, H., 1996. Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice boltzmann method. Physical Review E 53 (1), 743750. *p. 93 et 94*

Minet, J., 2003. Synthèse et caractérisation de silicates de calcium hydratés hybrides. Ph.D. thesis, Université de Paris-sud, Orsay, France. *p. xi, 15 et 16*

Nguyen, D.-T., Alizadeh, R., Beaudoin, J., Raki, L., 2013. Microindentation creep of secondary hydrated cement phases and c–s–h. Materials and Structures 46, 1519–1525. *p. 24*

Nonat, A., Courault, A.-C., Damidot, D., 2001. A new model describing the variation of ca/si ratio with lime concentration in solution. Cement wapno beton 8, 184–191. *p. xiv et 112*

Pan, C., Hilpert, M., Miller, C., 2004. Lattice-boltzmann simulation of two-phase flow in porous media. Water Resour. Res. 40 (1), W01501. *p. 93*

Parrott, L., Young, J., 1982. Shrinkage and swelling of two hydrated alite pastes. in :Fundamental research on creep and shrinkage of concrete. Martinus Nijhoff Publishers. *p. 10*

Pichler, C., Lackner, R., 2008. A multiscale creep model as basis for simulation of early-age concrete behavior. Computers and Concrete 5 (4), 295–328. *p. 17*

Pickett, G., 1942. The effect of change in moisture-content on the crepe of concrete under a sustained load. American concrete institute, Journal Proceedings 38, 333–355. *p. 12*

Powers, T., 1968. Mechanisms of shrinkage and reversible creep of hardened portland cement paste. Proceedings of International Conference On the Structure of Concrete, Cement and Concrete, Association, London, England, 319–344. *p. 23*

Rodriguez, E., Richardson, I., Black, L., Nonat, A., Skibsted, J., Boehm-Courjault, E., 2014. Chemical structure and morphology of c-s-h synthesized by silica-lime reaction and by the controlled hydration of c3s. 34th Cement and Concrete Science Conference (166), 509–520. *p. xi, 14 et 16*

Rolls, R., 1964. Long-time creep-recovery of highly stressed concrete cylinders. American concrete institute, Special Publication 9, 115–128. *p. 11*

Ross, A., 1958. Creep of concrete under variable stress. Proc. J. Am. Conc. Inst. 54, 739–758. *p. xi, xv, xvi, xix, 34, 152 et 153*

Rothman, D., Keller, J., 1988. Immiscible cellular-automata : Simple models of complex hydrodynamics. Journal of Statistical Physics 52 (3/4), 1119–1127. *p. 92*

Rowlinson, I., Widom, B., 1982. Molecular theory of capillarity. Oxford : Clarendon. *p. 98*

Ruetz, W., 1968. A hypothesis for the creep of hardened cement paste and the influence of simultaneous shrinkage. Proceedings of International Conference On the Structure of Concrete, Cement and Concrete, Association, London, England, 365–387. *p. 24*

Sanahuja, J., 2008. Impact de la morphologie structurale sur les performances mécaniques des matériaux de construction : application au plâtre et à la pâte de ciment. Ph.D. thesis, École Nationale des Ponts et Chaussées, Marne-La-Vallée, France. *p. 18*

Sangani, A., Acrivos, A., 1982. Slow flow past periodic arrays of cylinders with application to heat transfer. International Journal of Multiphase Flow 8 (3), 193–206. *p. xiii, 79 et 81*

Scrivener, K., 2004. Backscattered electron imaging of cementitious microstructures : understanding and quantification. Cement and Concrete Composites 26, 935–945. *p. xi et 17*

Sellier, A., Buffo-Lacarrière, L., 2009. Vers une modélisation simple et unifiée du fluage propre, du retrait et du fluage en dessiccation du béton. European Journal of Environmental and Civil Engineering 13 (10), 1161–1182. *p. 25 et 29*

Shan, X., Chen, H., 1993. Lattice boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. Physical Review E 47 (3). *p. 87, 92, 93 et 94*

Shan, X., Chen, H., 1994. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice boltzmann equation. Physical Review E 49 (4). *p. 87, 92, 93 et 94*

Shan, X., He, X., 1998. Discretization of the velocity space in the solution of the boltzmann equation. Physical Review Letter 80 (1), 65–68. *p. 58 et 93*

Shan, X., Yuan, X., Chen, H., 2006. Kinetic theory representation of hydrodynamics : a way beyond the navier stokes equation. J. Fluid. Mech. 550, 413–441. *p. 93*

Stora, E., 2007. Modélisation multi-échelle et simulations du comportement chimie-mécanique des matériaux cimentaires dégradés. Ph.D. thesis, Université de Marne la Vallée, Marne-La-Vallée, France. *p. 18*

Sukop, M., Or, D., 2004. Lattice boltzmann method for modeling liquid-vapor interface configurations in porous media. Water Resour. Res. 40 (1), W01509. *p. 93*

Suquet, P., 1987. Homogenization techniques for composite media. Lecture notes in Physics, Springer-Verglag 272, 193–278. *p. 163*

Swift, M., Osborn, W., Yeomans, J., 1995. Lattice boltzmann simulation of nonideal fluids. Physical Review Letters 75 (5), 830–833. *p. 92*

Tamtsia, B., Beaudoin, J., 2000. Basic creep of hardened cement paste, a re-examination of the role of water. Cement and Concrete Research 30, 1465–1475. *p. 11, 19 et 25*

Troxell, G. E., Raphael, J. M., Davis, R. E., 1958. Long-time creep and shrinkage tests of plain and reinforced concrete. ASTM Proc. 58, 1101–1120. *p. xii et 34*

Ulm, F.-J., Acker, P., 1988. Le point sur le fluage et la recouvrance des bétons. Bulletin des Laboratoires des Ponts et Chausées, Spécial XX 4170, 73–82. *p. xi, 11, 12 et 33*

Vandamme, M., Ulm, F.-J., 2013. Nanoindentation investigation of creep properties of calcium silicate hydrates. Cement and Concrete Research 52, 38–52. *p. 14 et 25*

Wang, C. Y., 1996. Stokes flow through an array of rectangular fibers. International Journal of Multiphase Flow 22 (1), 185–194. *p. xiii, 79, 82 et 83*

Wang, C. Y., 2001. Stokes flow through a rectangular array of circular cylinders. Fluid Dynamics Reshearch 29, 65–80. *p. xiii, 79 et 81*

Widder, D., 1941. The laplace transform. Princeton, New Jersey : Princeton University Press. *p. 130*

Widder, D., 1971. An introduction to transform theory. New York : Academic Press. *p. 130*

Winslow, D., 1985. The fractal nature of the surface of cement paste. Cement and Concrete Research (15), 217–227. *p. 18*

Wittmann, F., 1970. Influence of moisture content on the creep of hardened cement. Rheologica acta 9 (2), 282–287. *p. 24*

Wittmann, F., 1982. Creep and shrinkage mechanisms. in : Creep and shrinkage in concrete structures. Wiley, Chichester, 129–161. *p. 20*

Yuan, P., Schaefer, L., 2006. Equations of state in a lattice boltzmann model. Physics of Fluids 18, 042101. *p. 95*

Zou, H., He, X., 1997. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice boltzmann bgk model. Physics of Fluids 9 (6). *p. xii, 66, 67, 68 et 71*