



HAL
open science

Modélisation des milieux élastiques avec nanopores saturés

Vincent Pensée, Qi-Chang He, Hung Le Quang

► **To cite this version:**

Vincent Pensée, Qi-Chang He, Hung Le Quang. Modélisation des milieux élastiques avec nanopores saturés. CFM 2007 - 18ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2007, Grenoble, France. hal-03361135

HAL Id: hal-03361135

<https://hal.science/hal-03361135>

Submitted on 1 Oct 2021

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.

Modélisation des milieux élastiques avec nanopores saturés

Vincent Pensée, Qi-Chang He & Hung Le Quang

Université de Marne-la-Vallée
Laboratoire de Mécanique
5 Bd Descartes, 77454 Marne-la-Vallée Cedex 2
pensee@univ-mlv.fr

Résumé :

L'objet de ce travail est d'étendre les équations de la poroélasticité linéaire au cas de matériaux comportant des nanopores. On considère un modèle de microstructure de type assemblage sphères creuses saturées par un fluide. La phase solide a un comportement élastique linéaire isotrope. Les pores sont supposés de tailles nanométriques, il est alors nécessaire de tenir compte des contraintes superficielles. Pour ce faire, on utilise le modèle d'Young-Laplace. On met en évidence les effets de taille des pores sur le module de compressibilité effectif, le coefficient et le module de Biot. Lorsque les pores sont suffisamment grands, les relations classiques de la poroélasticité sont retrouvées.

Abstract :

The purpose of this work is to extend the equations of the linear poroelasticity to the case of materials with nanopores. We consider a model of microstructure which correspond to an assemblage of hollow spheres saturated by a fluid. The solid phase is isotropic linearly elastic. Pores are assumed to be of nanometric size, it is then necessary to hold account of the surface stresses. With this intention, we use the Young-Laplace model. The nanovoids size effects on the effective bulk modulus, on the Biot modulus and on the biot coefficient are shown. When the pores are sufficiently large, the classical relations of the linear poroelasticity are found.

Mots-clefs :

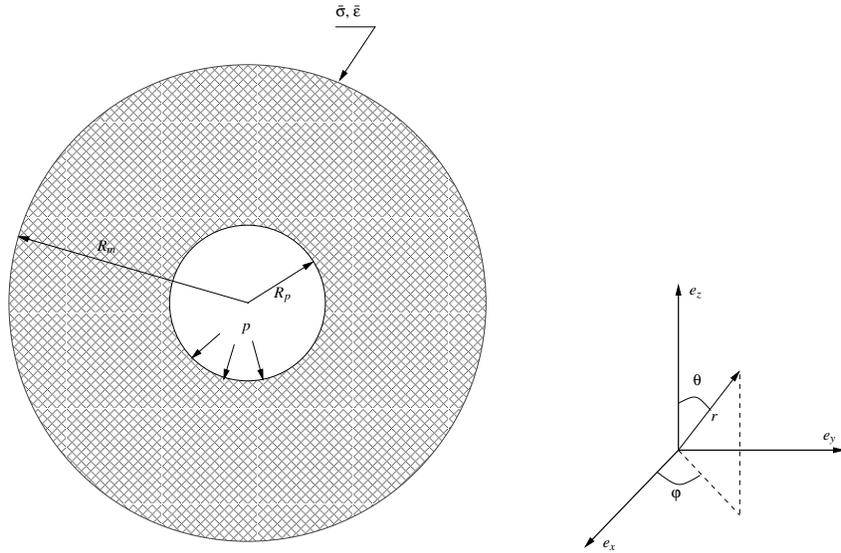
Poroélasticité, Equation d'Young-Laplace, Modélisation multi-échelle

1 Introduction

Dans la théorie classique de poroélasticité, les surfaces des pores du squelette d'un milieu poreux sont supposées dénuées de contraintes superficielles. Cette hypothèse doit être remise en question quand les pores du milieu sont essentiellement de taille nanométrique. En effet, dans ce dernier cas, le rapport surface/volume des pores est si grand que les effets de surface ne soient plus négligeables.

L'objectif du travail est double, tout d'abord, c'est une première tentative de formulation des équations constitutives d'un milieu poroélastique comportant des nanopores. Par ailleurs, au travers d'un modèle de microstructure particulier, il s'agit de mettre en évidence les effets de la taille des vides sur les propriétés poroélastiques effectives.

Pour atteindre ces objectifs, on considère un modèle de microstructure de type assemblage de sphères composites proposé par Hashin (1962). Les contraintes superficielles sont prises en compte par l'utilisation d'un modèle de Young-Laplace (Shuttleworth (1950); Povstenko (1993); Bottomley et Ogino (2001)) à la surface des pores.

FIG. 1 – Sphère creuse saturée par un fluide sous pression p .

2 Modèle de microstructure

Le modèle de microstructure utilisé correspond à l'assemblage de sphères composites de Hashin (1962). Chaque sphère composite est constituée d'une sphère creuse saturée par un fluide sous pression p (cf. figure 1). La phase solide est un matériau élastique isotrope ; les pores étant de très petite taille, on introduit une loi d'interface de type Young-Laplace à la surface des pores.

On note R_p le rayon des pores et R_m le rayon extérieur de la sphère creuse. On introduit un système de coordonnées cartésiennes (x, y, z) associé à une base orthonormée $\{e_x, e_y, e_z\}$. Par ailleurs, on définit un système de coordonnées sphériques (r, θ, φ) tel que (cf. figure 1) :

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad \tan \theta = \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}, \quad \tan \varphi = \frac{y}{x} \quad (1)$$

et la base orthonormée sphérique $\{e_r, e_\theta, e_\varphi\}$ associée

$$\begin{aligned} e_r &= \sin \theta \cos \varphi e_x + \sin \theta \sin \varphi e_y + \cos \theta e_z, \\ e_\theta &= \cos \theta \cos \varphi e_x + \sin \theta \sin \varphi e_y - \sin \theta e_z, \\ e_\varphi &= -\sin \varphi e_x + \cos \varphi e_y. \end{aligned} \quad (2)$$

La phase solide étant supposée élastique, linéaire et isotrope, la loi de comportement de la matrice s'écrit :

$$\boldsymbol{\sigma} = (3\kappa\mathbb{J} + 2\mu\mathbb{K}) : \boldsymbol{\varepsilon} \quad \text{avec } \mathbb{J} = \frac{1}{3}\mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \quad \text{et} \quad \mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J} \quad (3)$$

où \mathbb{I} et \mathbf{I} sont les tenseurs identité respectivement du quatrième et du second ordre.

La surface des pores est modélisée par une interface représentée par une surface orientée Γ au travers de laquelle le champ de déplacement est continu ainsi que la partie tangentielle du tenseur des contraintes. Par ailleurs, la surface Γ est considéré comme un milieu déformable bidimensionnel. On introduit la déformation surfacique $\boldsymbol{\varepsilon}^s$ et la contrainte surfacique $\boldsymbol{\sigma}^s$, ces deux quantités sont reliées par une loi d'interface de type Young-Laplace. En supposant un

comportement isotrope de l'interface, on a :

$$\begin{bmatrix} \sigma_{\theta\theta}^s \\ \sigma_{\varphi\varphi}^s \\ \sigma_{\theta\varphi}^s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \kappa_s + \mu_s & \kappa_s - \mu_s & 0 \\ \kappa_s - \mu_s & \kappa_s + \mu_s & 0 \\ 0 & 0 & 2\mu_s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{\theta\theta}^s \\ \varepsilon_{\varphi\varphi}^s \\ \varepsilon_{\theta\varphi}^s \end{bmatrix}. \quad (4)$$

L'équilibre de l'interface conduit à l'équation de Young-Laplace :

$$[[\sigma_{rr}]] \mathbf{e}_r + [[\sigma_{r\theta}]] \mathbf{e}_\theta + [[\sigma_{r\varphi}]] \mathbf{e}_\varphi = -\operatorname{div}_s \boldsymbol{\sigma}^s \quad (5)$$

où $\operatorname{div}_s \boldsymbol{\sigma}^s$ désigne la divergence surfacique du tenseur des contraintes. L'interface étant sphérique, il vient :

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_s \boldsymbol{\sigma}^s &= -\frac{\sigma_{\theta\theta}^s + \sigma_{\varphi\varphi}^s}{r} \mathbf{e}_r \\ &+ \frac{1}{r} \left\{ \frac{\partial \sigma_{\theta\theta}^s}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial \sigma_{\theta\varphi}^s}{\partial \varphi} + (\sigma_{\theta\theta}^s - \sigma_{\varphi\varphi}^s) \cot \theta \right\} \mathbf{e}_\theta \\ &+ \frac{1}{r} \left\{ \frac{\partial \sigma_{\theta\varphi}^s}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial \sigma_{\varphi\varphi}^s}{\partial \varphi} + 2\sigma_{\theta\varphi}^s \cot \theta \right\} \mathbf{e}_\varphi. \end{aligned} \quad (6)$$

A l'échelle macroscopique, le matériau est supposé avoir un comportement poroélastique linéaire, isotrope. Ainsi, le comportement macroscopique est donné par

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = (3\kappa^* \mathbb{J} + 2\mu^* \mathbb{K}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \beta^* p \mathbf{I} \quad (7)$$

où κ^* , μ^* , β^* sont respectivement le module de compressibilité effectif, le module de cisaillement effectif et le coefficient de Biot effectif qui doivent être déterminés.

3 Propriétés poroélastiques effectives

Considérons que la sphère creuse définie plus haut est sollicitée par un chargement radial uniforme appliqué sur les surfaces intérieures et extérieures. Compte tenu de la géométrie sphérique du problème, le champ de déplacement dans la phase solide est nécessairement radial et peut être écrit sous la forme (p. ex. Love (1944)) :

$$u_r(r) = ar + \frac{b}{r^2}. \quad (8)$$

Les composantes non nulles du tenseur de déformation sont alors données par

$$\varepsilon_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r} = a - 2\frac{b}{r^3} \quad \text{et} \quad \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\varphi\varphi} = \frac{u_r}{r} = a + \frac{b}{r^3}. \quad (9)$$

En utilisant la loi de comportement locale (3), on déduit les composantes non-nulles du tenseur des contraintes :

$$\sigma_{rr} = 3\kappa a - 4\mu \frac{b}{r^3} \quad \text{et} \quad \sigma_{\theta\theta} = \sigma_{\varphi\varphi} = 3\kappa a + 2\mu \frac{b}{r^3}. \quad (10)$$

La détermination des propriétés poroélastiques nécessite d'écrire les conditions de continuité du vecteur contraintes à la surface des pores et la continuité du vecteur contrainte et du champ de déplacement sur la surface extérieure de la sphère creuse.

On étudie tout d'abord les conditions à la surface des pores. Du fait de la continuité du champ de déplacement au travers de Γ , on a :

$$\varepsilon_{\theta\theta}^s = \varepsilon_{\varphi\varphi}^s = \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\varphi\varphi} = a + \frac{b}{R_p^3} \quad \text{et} \quad \varepsilon_{\theta\varphi}^s = \varepsilon_{\theta\varphi} = 0. \quad (11)$$

En introduisant (11) dans (4), il vient :

$$\sigma_{\theta\theta}^s = \sigma_{\varphi\varphi}^s = 2\kappa_s \left(a + \frac{b}{R_p^3} \right) \quad \text{et} \quad \sigma_{\theta\varphi}^s = 0. \quad (12)$$

L'équation de Young-laplace (5), en utilisant (6), implique

$$[[\sigma_{rr}]] = -4 \frac{\kappa_s}{R_p} \left(a + \frac{b}{R_p^3} \right) \quad (13)$$

avec $[[\sigma_{rr}]] = \sigma_{rr} + p$. En introduisant l'expression (10) de σ_{rr} , on déduit

$$\left(3\kappa + 4 \frac{\kappa_s}{R_p} \right) a - \frac{4}{R_p^3} \left(\mu - \frac{\kappa_s}{R_p} \right) b = -p \quad (14)$$

Les conditions sur la surface extérieure s'écrivent

$$\sigma_{rr}(R_m) = \bar{\sigma}, \quad (15)$$

$$u_r(R_m) = \frac{1}{3\kappa^*} (\bar{\sigma} + p\beta^*), \quad (16)$$

et il s'ensuit

$$3\kappa a - 4 \frac{\mu}{R_m^3} b = \bar{\sigma} \quad (17)$$

$$aR_m + \frac{b}{R_m^2} = \frac{R_m}{3\kappa^*} (\bar{\sigma} + p\beta^*) \quad (18)$$

Le module de compressibilité effectif est obtenu en posant $p = 0$ et en résolvant le système constitué par (14), (17) et (18), il vient

$$\begin{bmatrix} 3\kappa + 4 \frac{\kappa_s}{R_p} & -\frac{4}{R_p^3} \left(\mu - \frac{\kappa_s}{R_p} \right) & 0 \\ 3\kappa & -4 \frac{\mu}{R_m^3} & -1 \\ R_m & \frac{1}{R_m^2} & \frac{R_m}{3\kappa^*} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ \bar{\sigma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (19)$$

Pour que ce système ait une solution non nulle, il est nécessaire et suffisant que :

$$\kappa^* = \frac{1}{3} \frac{12\kappa \left(\mu - \frac{\kappa_s}{R_p} \right) - 4c\mu \left(3\kappa + 4 \frac{\kappa_s}{R_p} \right)}{c \left(3\kappa + 4 \frac{\kappa_s}{R_p} \right) + 4 \left(\mu - \frac{\kappa_s}{R_p} \right)} \quad (20)$$

où l'on a introduit la porosité $c = (R_p/R_m)^3$. On notera la dépendance de κ^* avec le rayon des pores R_p . Lorsque R_p est suffisamment grand, on a :

$$\kappa^* = \frac{4\kappa\mu(1-c)}{3\kappa c + 4\mu} \quad (21)$$

De façon équivalente, le coefficient de Biot effectif β^* est obtenu en posant $\bar{\sigma} = 0$ et en résolvant le système constitué par (14), (17) et (18). Ainsi β^* est solution de

$$\begin{bmatrix} 3\kappa + 4 \frac{\kappa_s}{R_p} & -\frac{4}{R_p^3} \left(\mu - \frac{\kappa_s}{R_p} \right) & 1 \\ 3\kappa & -4 \frac{\mu}{R_m^3} & 0 \\ R_m & \frac{1}{R_m^2} & -\beta^* \frac{R_m}{3\kappa^*} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (22)$$

une solution non triviale est obtenue si et seulement si

$$\beta^* = \frac{3c(3\kappa + 4\mu)}{12\kappa \left(\mu - \frac{\kappa_s}{R_p} \right) - 4\mu c \left(3\kappa + 4\frac{\kappa_s}{R_p} \right)} \kappa^* \quad (23)$$

soit en injectant l'expression de κ^* donné par (20)

$$\beta^* = \frac{c(3\kappa + 4\mu)}{c \left(3\kappa + 4\frac{\kappa_s}{R_p} \right) + 4 \left(\mu - \frac{\kappa_s}{R_p} \right)}. \quad (24)$$

Si R_p est suffisamment grand, on obtient :

$$\beta^* = \frac{c(3\kappa + 4\mu)}{3\kappa c + 4\mu}. \quad (25)$$

Dans ce dernier cas (pores de taille micrométriques), κ^* et β^* donnés respectivement par (21) et par (25) vérifient la relation classique (cf. par exemple Dormieux *et al.* (2002)) :

$$\beta^* = 1 - \frac{\kappa^*}{\kappa} \quad (26)$$

On notera que dans le cas de pores de taille nanométriques, κ^* et β^* définis respectivement par (20) et par (24) ne vérifient pas (26). Il est nécessaire d'établir une relation plus générale entre κ^* et β^* qui fait intervenir la loi de comportement de la surface des pores (cf. He et Pensée (2007)).

Enfin, la détermination du module de Biot nécessite de caractériser la variation de porosité δc en fonction des paramètres de chargement $\bar{\sigma}$ et p . Par définition, on a

$$\delta c = \left(\frac{1}{R_m} (R_p + u_r(R_p)) \right)^3 - \left(\frac{R_p}{R_m} \right)^3 \simeq \frac{3c}{R_p} u_r(R_p) \quad (27)$$

La détermination de la variation de porosité nécessite de déterminer le champ de déplacement et donc les constantes a et b . En résolvant le système constitué par (14) et (17), il vient :

$$a = \frac{c\mu p + \bar{\sigma} \left(\mu - \frac{\kappa_s}{R_p} \right)}{3(1-c)\kappa\mu - \frac{\kappa_s}{R_p} (3\kappa + 4\mu c)} \quad (28)$$

$$b = \frac{1}{4} \frac{3\kappa p + \left(3\kappa + 4\frac{\kappa_s}{R_p} \right) \bar{\sigma}}{3(1-c)\kappa\mu - \frac{\kappa_s}{R_p} (3\kappa + 4\mu c)} R_p^3 \quad (29)$$

En introduisant ces expressions dans (27), la variation de porosité est donnée par

$$\delta c = c \frac{(3\kappa + 4\mu c) p + (3\kappa + 4\mu) \bar{\sigma}}{4(1-c)\kappa\mu - \frac{4\kappa_s}{3R_p} (3\kappa + 4\mu c)} \quad (30)$$

On en déduit l'expression du module de Biot effectif M^* , en identifiant (30) à la seconde loi d'état de la proélasticité qui s'écrit :

$$\delta c = \frac{\beta^*}{\kappa^*} \bar{\sigma} + \left(\frac{1}{M^*} - \frac{\beta^{*2}}{\kappa^*} \right) p \quad (31)$$

Il vient alors

$$\frac{1}{M^*} = c \frac{(3\kappa + 4\mu c)}{4(1-c)\kappa\mu - \frac{4\kappa_s}{3R_p}(3\kappa + 4\mu c)} + \frac{\beta^{*2}}{3\kappa^*} \quad (32)$$

Lorsque les pores sont de tailles micrométriques, le module de Biot effectif est donné par :

$$\frac{1}{M^*} = c \frac{(3\kappa + 4\mu c)}{4(1-c)\kappa\mu} + \frac{\beta^{*2}}{3\kappa^*} \quad (33)$$

et l'on a la relation classique (cf. Dormieux *et al.* (2002)) :

$$\frac{1}{M^*} = \frac{\beta^* - c}{\kappa} \quad (34)$$

avec β^* et M^* définis respectivement par (25) et (33). Dans le cas où les pores sont de tailles nanométriques, la relation (34) doit être généralisée de manière à tenir compte de la loi d'interface (cf. He et Pensée (2007)).

Références

- Bottomley, D.J. and Ogino, T. 2001 Alternative to the Shuttleworth formulation of solid surface stress. *Phys. Rev.* **B63**, 165412-1-165412-5.
- Dormieux, L., Molinari, A. and Kondo, D. (2002), Micromechanical approach to the behavior of poroelastic materials. *J. Mech. Phys. Solids* **50**, 2203-2231.
- Hashin, Z. 1962 The elastic moduli of heterogeneous materials. *J. Appl. Mech.*, **29**, 143-150.
- A.E.H Love. *A treatise on the mathematical theory of elasticity.*, Dover, New-York, 1944.
- He, Q.-C. and Pensée, V. 2007. A paraître.
- Povstenko, Y.Z. 1993 Theoretical investigation of phenomena caused by heterogeneous surface tension in solids. *J. Mech. Phys. Solids*, **41**, 1499-1514.
- Shuttleworth, R. 1950 The surface tension of solid. *Proc. Phys. Soc. A.*, **63**, 444-457.