

Détermination de bornes numériques par FFT pour la perméabilité Application à une craie sous confinement croissant

François Bignonnet, Luc Dormieux, Frédéric Skoczylas, Catherine Davy

▶ To cite this version:

François Bignonnet, Luc Dormieux, Frédéric Skoczylas, Catherine Davy. Détermination de bornes numériques par FFT pour la perméabilité Application à une craie sous confinement croissant. Transfert 2012, Colloque national sur les propriétés de transfert des géomatériaux, F. Skoczylas, C.A. Davy, F. Agostini, N. Burlion, Mar 2012, Lille, France. pp.263-272. hal-04266368

HAL Id: hal-04266368 https://hal.science/hal-04266368

Submitted on 31 Oct 2023

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.

Détermination de bornes numériques par FFT pour la perméabilité

Application à une craie sous confinement croissant

François Bignonnet^{*,**} — Luc Dormieux ^{*} — Frédéric Skoczylas^{**} — Catherine Davy^{**}

* UR Navier, École Ponts ParisTech, Université Paris Est, 6-8 Avenue Blaise Pascal, 77455 Champs sur Marne, France

francois.bignonnet@enpc.fr, luc.dormieux@enpc.fr

** École centrale de Lille, 59650 Villeneuve d'Ascq, France frederic.skoczylas@ec-lille.fr, catherine.davy@ec-lille.fr

RÉSUMÉ. La présente communication décrit un nouveau cadre variationnel de type Hashin-Shtrikman pour le calcul de perméabilité basé sur la dualisation des équations de Stokes dans un contexte périodique. Une adaptation du schéma FFT développé en élasticité linéaire par [BRI 10] est proposée pour une application numérique du principe. Des bornes sur la perméabilité peuvent être calculées sur des microstructures complexes à phase solide connexe avec une précision adaptable. La méthode a été validée sur une structure simple par comparaison avec une simulation par éléments finis. Dans l'intention de valider la méthode pour des applications pratiques, de nouveaux résultats expérimentaux sont présentés sur la perte de perméabilité et de porosité d'une craie soumise à un confinement hydrostatique croissant par effondrement de pores.

ABSTRACT. A new Hashin-Shtrikman-like variational framework based on the dualisation of Stokes equations is presented for the computation of permeability on periodic RVEs. A numerical application of the principle is proposed, based on an adaptation of the FFT scheme developped by [BRI 10]. Arbitrarily accurate bounds on the permeability can be computed on complex microstructures whose solid phase is connected. The method has been validated on a simple microstructure by comparison with a finite elements simulation. New experimental results of the decrease of permeability and porosity due to pore collapse in chalk subjected to an increasing hydrostatic pressure are presented in the intent to validate the FFT method on practical applications.

MOTS-CLÉS : perméabilité, borne, cadre variationnel, microstructures complexes

KEYWORDS: permeability, bound, variationnal framework, complex microstructures

1. Introduction

Du point de vue macroscopique, la loi de Darcy permet de relier la vitesse d'un fluide visqueux à la perte de charge dans le milieu par une relation linéaire faisant intervenir le tenseur de perméabilité \underline{K} . La perméabilité prend son origine à l'échelle microscopique dans l'interaction entre les parois du réseau poreux et l'écoulement de Stokes d'un fluide soumis à un gradient de pression macroscopique [DOR 06]. Nous nous plaçons sous l'hypothèse d'un écoulement permanent purement visqueux sans glissement du fluide sur les parois. La présente communication décrit une approche FFT alternative aux calculs actuels de perméabilité de réseaux poreux complexes, réalisés par simulation de la dynamique de particule suivant la méthode de Boltzmann sur réseaux (LBM), calculs par différences finies [WIE 07], éléments finis, ou FFT directe [MON 09] reposant sur une adaptation du schéma FFT direct proposé par Moulinec et Suquet [MOU 94].

La position mathématique du problème d'un écoulement de Stokes présente de fortes similitudes avec un problème d'élasticité linéaire incompressible en mécanique. Pour les problèmes d'élasticité hétérogènes périodiques, une méthode basée sur l'introduction de la notion de milieu de référence, de champ de polarisation et le principe variationnel de Hashin Shtrikman a été proposée [BRI 10]. La situation périodique permet d'une part de résoudre explicitement le problème de polarisation et de le traiter numériquement au moyen de la FFT, d'autre part une meilleure convergence de la propriété homogénéisée en terme de taille de volume représentatif.

Nous proposons une approche similaire pour un écoulement de Stokes. La méthode exploite la dualisation des équations de Stokes. Puis une borne supérieure rigoureuse de la perméabilité est obtenue par adaptation du principe variationnel de Hashin Shtrikman, qui s'écrit sous la forme $\forall \underline{\tau}; \underline{\operatorname{grad}}(p) \cdot \underline{K} \cdot \underline{\operatorname{grad}}(p) \leq \mathcal{HS}(\underline{\tau})$. \mathcal{HS} est une fonctionnelle quadratique que l'on peut déterminer numériquement par FFT. L'égalité est réalisée pour le champ de polarisation particulier qui rend stationnaire la fonctionnelle. La méthode consiste à se restreindre à explorer les champs de polarisation constants par pixel (ou voxel) pour minimiser la fonctionnelle. La minimisation revient à inverser un système linéaire, dont les composantes sont évaluées à l'aide de FFT par passage dans l'espace de Fourier. L'inversion se fait numériquement à l'aide de solveurs itératifs classiques.

Outre une borne supérieure rigoureuse aussi proche que voulu de la perméabilité par raffinement de la grille de discrétisation, la méthode donne accès à une estimation des champs de taux de déformation et de vitesse sur chaque pixel ou voxel. Une validation a été réalisée pour une structure simple par comparaison avec une simulation par éléments finis. Afin de valider l'utilisation de la méthode pour des cas pratiques, une confrontation à des résultats expérimentaux est prévue. Pour la craie, les mesures de perméabilité et de porosité sous cycle de confinement hydrostatique mettent en évidence une chute irréversible de la perméabilité et du volume poreux. Due à la rupture des ponts entre les grains de calcite, elle correspond à l'effondrement de pores au delà de 20 MPa de confinement. La méthode de validation consistera à imager un

échantillon sain puis un échantillon soumis au cycle de confinement afin de capturer l'évolution de la microstructure. Le calcul de perméabilité sur les deux états de la microstructure par la méthode présentée sera confronté à la chute de perméabilité établie expérimentalement.

2. Cadre variationnel

2.1. Formulation micromécanique de la loi de Darcy

Une formulation micromécanique de la loi de Darcy a été présentée dans [DOR 06]. La formulation est ici réadaptée pour une meilleure correspondance avec un problème d'élasticité linéaire hétérogène.

On considère un volume élémentaire représentatif parallélépipèdique Ω de frontière périodique $\partial\Omega$ constitué d'un fluide de Stokes de viscosité μ potentiellement hétérogène et d'une phase solide connexe non vide représentée comme un fluide de viscosité infinie. L'origine du repère cartésien orthonormé, sommet de la cellule élémentaire, est choisi dans la phase solide, ce qui impose une vitesse nulle en ce point. La vitesse locale au point \underline{z} est notée \underline{v} et la pression \underline{p} . Le fluide et le solide sont soumis à un gradient de pression macroscopique $\underline{\alpha} = \underline{\operatorname{grad}}(p)$ où la notation barre supérieure indique une moyenne sur tout le domaine Ω . Pour tout point \underline{z} du solide et du fluide, la pression peut alors s'écrire $p(\underline{z}) = \underline{\alpha} \cdot \underline{z} + \Phi(\underline{z})$ où $\Phi(\underline{z})$ est une fonction périodique. La formulation micromécanique de la perméabilité découle du problème de Stokes (P) suivant :

$$(P) \begin{cases} \operatorname{div}(\underline{\sigma}) = \underline{0} & \operatorname{\acute{e}quilibre} \\ \underline{\sigma} = 2\mu \, \underline{d} - p \underline{I} & \operatorname{loi} \operatorname{de comportement} \\ \underline{d} = \frac{1}{2} \left(\underline{\operatorname{grad}}(\underline{v}) + \underline{\operatorname{grad}}^T(\underline{v}) \right) & \operatorname{taux} \operatorname{de} \operatorname{deformation} \\ \operatorname{div}(\underline{v}) = \overline{0} & \operatorname{incompressibilit\acute{e}} & (1) \\ p(\underline{z}) = \underline{\alpha} \cdot \underline{z} + \Phi(\underline{z}), \Phi \operatorname{p\acute{e}riodique} & \operatorname{chargement} \\ \underline{v}(\underline{z} = \underline{0}) = \underline{0}, \, \underline{v} \operatorname{p\acute{e}riodique} \operatorname{sur} \partial\Omega & \operatorname{conditions} \operatorname{aux} \operatorname{limites} \\ (\underline{\sigma} + (\underline{\alpha} \cdot \underline{z}) \, \underline{I}) \cdot \underline{n} \text{ antip\acute{e}riodique} \operatorname{sur} \partial\Omega \end{cases}$$

Du point de vue macroscopique, la vitesse de filtration solution de (P) est reliée linéairement au gradient de pression par le tenseur de perméabilité : $\overline{\underline{v}} = -\underline{\underline{K}} \cdot \underline{\alpha}$. Dans l'intention d'obtenir une borne sur la perméabilité, cherchons une formulation variationnelle de (P). On note $w(\underline{\underline{d}}) = \mu \underline{\underline{d}} : \underline{\underline{d}}$ la densité volumique d'énergie associée au taux de déformation $\underline{\underline{d}}$. La formulation faible de (P) associée à l'espace fonctionnel $\mathcal{C} = {\underline{u} \mid \underline{u} \text{ périodique, } C^0, C^1 \text{ par morceaux sur } \Omega, \underline{u}(\underline{0}) = \underline{0}, \operatorname{div}(\underline{u}) = 0}$ conduit au calcul de la perméabilité de manière variationnelle [DOR 06] par :

$$-\frac{1}{2}\underline{\alpha} \cdot \underline{\underline{K}} \cdot \underline{\alpha} = \inf_{\underline{u} \in \mathcal{C}} \left(\overline{w(\underline{\underline{d}}(\underline{u})) + \underline{\alpha} \cdot \underline{u}} \right)$$
(2)

2.2. Principe variationnel de Hashin Shtrikman

À partir du modèle micromécanique développé, une démonstration du principe variationnel de Hashin Shtrikman est transposée au problème de perméabilité en suivant le raisonnement proposé par J. Willis [WIL 77]. L'idée est de transférer la difficulté due à l'hétérogénéité de la viscosité en un terme de chargement additionel appelé polarisation ou précontrainte. L'expression de l'énergie associée au taux de déformation se dualise pour les champs de polarisation $\underline{\tau}$ par la transformée de Legendre

$$w^{*}(\underline{\underline{\tau}}) = \sup_{\underline{u}\in\mathcal{C}} \left(\underline{\underline{\tau}}:\underline{\underline{d}}(\underline{u}) - w(\underline{\underline{d}}(\underline{u}))\right)$$
(3)

En élasticité, la transformée de Legendre définit l'énergie élastique de contraintes. Dans le cas linéaire, et transposée pour un écoulement de Stokes, elle vérifie $w^*(\underline{\tau}) = \frac{1}{2} \underline{\tau} : (2\mu)^{-1} \underline{\tau}$.

On considère un milieu de référence de viscosité uniforme μ_0 inférieure à toutes les viscosités du milieu hétérogène considéré. Alors $(w - w_0)^*$, associée à un fluide de viscosité $\mu - \mu_0$, est bien définie et

$$\forall \underline{\underline{\tau}}; \forall \underline{\underline{u}} \in \mathcal{C}; w(\underline{\underline{d}}(\underline{\underline{u}})) \ge w_0(\underline{\underline{d}}(\underline{\underline{u}})) + \underline{\underline{\tau}} : \underline{\underline{d}}(\underline{\underline{u}}) - (w - w_0)^*(\underline{\underline{\tau}})$$
(4)

En ajoutant le terme en vitesse à droite et à gauche, en intégrant et en prenant le minimum sur tous les champs de vitesse virtuels de C il vient

$$\forall \underline{\underline{\tau}}; \inf_{\underline{u} \in \mathcal{C}} \left(\overline{w(\underline{\underline{d}}(\underline{u})) + \underline{\alpha} \cdot \underline{u}} \right) \ge \inf_{\underline{u} \in \mathcal{C}} \left(\overline{w_0(\underline{\underline{d}}(\underline{u})) + \underline{\tau} : \underline{\underline{d}}(\underline{u}) + \underline{\alpha} \cdot \underline{u}} \right) - \overline{(w - w_0)^*(\underline{\underline{\tau}})}$$
(5)

On reconnaît à gauche le problème hétérogène de Darcy chargé par le gradient de pression macroscopique (2). À droite, le premier terme correspond au problème d'écoulement de Stokes avec une viscosité uniforme chargé par le gradient de pression macroscopique et le champ de polarisation, appelé par la suite problème auxiliaire (P^0). Le second terme de droite est connu. Le membre de droite est une fonctionnelle de variable $\underline{\tau}$ appelée fonctionnelle de Hashin-Shtrikman $\mathcal{HS}(\underline{\tau})$. L'égalité est réalisée pour le champ de polarisation qui correspond à la solution exacte du problème.

2.3. Problème auxiliaire

Il reste à résoudre le problème auxiliaire (P^0) suivant

$$(P^{0}) \begin{cases} \frac{\operatorname{div}(\underline{\sigma}^{0}) = 0}{\underline{\sigma}^{0} = 2\mu_{0}\underline{d}^{0} - p^{0}\underline{I} + \underline{\tau}} & \text{loi de comportement} \\ p^{0}(\underline{z}) = \underline{\alpha} \cdot \underline{z} + \Phi(\underline{z}), \Phi \text{ périodique} & \text{chargement} \\ \underline{\underline{d}}^{0} = \frac{1}{2} \left(\underline{\operatorname{grad}}(\underline{v}^{0}) + \underline{\operatorname{grad}}^{T}(\underline{v}^{0}) \right) & \text{taux de déformation} \\ \operatorname{div}(\underline{v}^{0}) = 0 & \text{incompressibilité} \\ \underline{v}^{0}(\underline{z} = \underline{0}) = \underline{0}, \ \underline{v}^{0} \text{ périodique sur } \partial\Omega & \text{conditions aux limites} \\ (\underline{\underline{\sigma}}^{0} + (\underline{\alpha} \cdot \underline{z}) \underline{I}) \cdot \underline{n} \text{ antipériodique sur } \partial\Omega \end{cases}$$

 (P^0) se scinde par superposition en un problème (P^{α}) chargé uniquement par le gradient de pression macroscopique $\underline{\alpha}$ en annulant $\underline{\tau}$ dans (P^0) et un problème (P^{τ}) chargé uniquement par le champ de polarisation $\underline{\tau}$ en annulant $\underline{\alpha}$ dans (P^0) . Dans la suite, l'exposant α (resp. τ) se réfère à la solution de (P^{α}) (resp. (P^{τ})).

La solution du problème (P^{α}) n'est pas triviale et découlera de la suite du raisonnement. La solution du problème de polarisation est connue formellement en introduisant l'opérateur de Green Γ_0 . Γ_0 est connu explicitement dans l'espace de Fourier par (12), ici pour le coefficient de Poisson $\nu_0 = \frac{1}{2}$ afin de tenir compte de l'incompressibilité du fluide. Le problème (P^{τ}) se résout en $\underline{d}^{\tau} = -\Gamma_0 * \underline{\tau}$ où * désigne un produit de convolution.

2.4. Simplification de la fonctionnelle

Le minimum sur C du terme de gauche de la fonctionnelle de Hashin-Shtrikman est atteint pour le champ de vitesse $\underline{v}^0 = \underline{v}^\alpha + \underline{v}^\tau$ solution de (P^0) . La fonctionnelle de Hashin Shtrikman s'écrit donc

$$\mathcal{HS}(\underline{\underline{\tau}}) = \overline{w_0(\underline{\underline{d}}^0) + \underline{\underline{\tau}} : \underline{\underline{d}}^0} + \underline{\alpha} \cdot \underline{\underline{u}^0} - \overline{(w - w_0)^*(\underline{\underline{\tau}})}$$
(7)

La transformée de Legendre vaut $(w - w_0)^*(\underline{\tau}) = \frac{1}{2} \underline{\tau} : (2\mu - 2\mu_0)^{-1} \underline{\tau}$. L'énergie élastique se simplifie classiquement comme en élasticité linéaire par utilisations du lemme de Hill : $\overline{\mu_0 \underline{d}^0} : \underline{\underline{d}^0} = \overline{\mu_0 \underline{d}^\alpha} : \underline{\underline{d}^\alpha} - \underline{\underline{d}^\alpha} : \underline{\underline{\tau}} - \frac{1}{2} \underline{\underline{d}^\tau} : \underline{\underline{\tau}}$. Le terme en $\underline{\alpha} \cdot \underline{v}^0$ contient la dépendance linéaire en $\underline{\underline{\tau}}$ et est évalué par superposition : $\underline{\underline{v}^0} = \underline{\underline{v}^\alpha} + \underline{\underline{v}^\tau}$. Dans cette superposition, le premier terme fait apparaître la constante $\overline{\underline{\alpha} \cdot \underline{v}^\alpha} = -2\mu_0 \underline{\underline{d}^\alpha} : \underline{\underline{d}^\alpha}$ par application du théorème de la divergence et sera explicité par la suite. Le second terme $\underline{\alpha} \cdot \underline{\underline{v}^\tau}$ est évalué par deux stratégies complémentaires.

La première approche consiste à utiliser le théorème de Maxwell Betti et à faire travailler le chargement de chaque sous problème dans la vitesse de l'autre :

$$\underline{\alpha} \cdot \overline{\underline{v}}^{\tau} = \underline{\underline{d}}^{\alpha} : \underline{\underline{\tau}}$$
(8)

L'inégalité de Hashin-Shtrikman se simplifie alors en

$$\forall \underline{\underline{\tau}}; \frac{1}{2}\underline{\alpha} \cdot \underline{\underline{K}} \cdot \underline{\alpha} \le \mu_0 \underline{\underline{\underline{d}}}^{\alpha} : \underline{\underline{d}}^{\alpha} - \underline{\underline{\underline{d}}}^{\alpha} : \underline{\underline{\tau}} + \frac{1}{2} \underline{\underline{\tau}} : \mathbf{\Gamma}_0 * \underline{\underline{\tau}} + \frac{1}{2} \underline{\underline{\tau}} : (2\mu - 2\mu_0)^{-1} \underline{\underline{\tau}}$$
(9)

Afin d'obtenir les informations manquantes sur $\underline{\underline{d}}^{\alpha}$, développons la seconde approche, qui fait intervenir l'expression de la solution en fonction de l'opérateur de Green. Dans l'espace de Fourier, avec les notations \underline{k} vecteur d'onde, \underline{n} sa normalisation, \hat{f} transformée de Fourier de la fonction $f, \underline{\hat{v}}^{\tau}$ est connu sauf en $\underline{k} = 0$ par la relation

$$\underline{\hat{v}}^{\tau}(\underline{k}) = \frac{i}{|k|} \underline{n} \cdot \underline{\hat{d}}^{\tau} = -\frac{i}{|k|} \underline{n} \cdot \hat{\Gamma}_{0} : \underline{\hat{\tau}}$$
(10)

La vitesse dépend donc de la polarisation par un opérateur linéaire $\underline{\underline{\Delta}}^0$, tenseur du troisième ordre qui s'exprime en fonction de l'opérateur de Green dans l'espace de Fourier par

$$\hat{\underline{\Delta}}^{0}(\underline{k}) = \frac{i}{|k|} \underline{n} \cdot \hat{\mathbf{\Gamma}}_{0} \tag{11}$$

On rappelle l'expression de l'opérateur de Green dans l'espace de Fourier, les couples entre parenthèses correspondant aux indices à symétriser

$$\hat{\Gamma}_{0} = \left(\frac{1}{\mu_{0}}\underline{n} \otimes \underline{\underline{I}} \otimes \underline{\underline{n}} - \frac{1}{2\mu_{0}(1-\nu_{0})}\underline{\underline{n}} \otimes \underline{\underline{n}} \otimes \underline{\underline{n}} \otimes \underline{\underline{n}}\right)_{(1,2)(3,4)}$$
(12)

L'opérateur de Green pour les vitesses $\underline{\underline{\Delta}}^0$ est donc connu explicitement dans l'espace de Fourier sauf pour le vecteur d'onde nul, où l'opérateur est choisi nul de sorte que \underline{v}^{τ} est connu à sa valeur moyenne près par $\underline{v}^{\tau}(\underline{z}) = \overline{\underline{v}^{\tau}} - (\underline{\underline{\Delta}}^0 * \underline{\underline{\tau}})(\underline{z})$. Par ailleurs, les conditions aux limites imposent $\underline{v}^{\tau}(\underline{0}) = \underline{0}$ d'où

$$\overline{\underline{v}^{\tau}} = (\underline{\underline{\Delta}}^0 * \underline{\underline{\tau}})(\underline{0}) \tag{13}$$

Les deux approches permettent d'obtenir une information fondamentale sur la solution du problème (P^{α}) en combinant (8) et (13) :

$$\forall \underline{\tau}; \underline{\alpha} \cdot \underline{v}^{\tau} = \underline{\underline{d}}^{\alpha} : \underline{\tau} = \underline{\alpha} \cdot (\underline{\underline{\Delta}}^{0} * \underline{\tau})(\underline{\underline{0}})$$
(14)

3. Application aux champs de polarisation constants par pixel

Pour simplifier, le développement est exposé en dimension 2. Les notations et le raisonnement sont en accord avec l'article de référence [BRI 10] en élasticité linéaire. Le domaine est divisé en un dallage régulier de l'espace Ω en $N_x \times N_y$ sous espaces (ou pixels) Ω_β carrés de taille (ou résolution) notée r. Les couples d'entiers $\beta = (\beta_x, \beta_y)$ pris dans $\mathcal{I} = [0..N_x - 1] \times [0..N_y - 1]$ permettent d'indexer les sous espaces dans les directions x et y.

Afin d'optimiser la fonctionnelle de Hashin Shtrikman, on se restreint à explorer l'espace des champs de polarisations constants par pixel. Il s'agit donc d'optimiser les valeurs $\underline{\tau}_{\beta}$ prises par le champ de polarisation sur chaque pixel Ω_{β} .

Les termes quadratiques en $\underline{\underline{\tau}}$ ne sont pas modifiés par rapport à l'élasticité linéaire et ne sont pas redéveloppés dans cet exposé. Par contre, le terme linéaire $\underline{\underline{d}}^{\alpha}:\underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{\alpha}} \cdot (\underline{\underline{\Delta}}^0 * \underline{\underline{\tau}})(\underline{0})$ est plus complexe que son analogue lié à la déformation macroscopique en élasticité et requiert un calcul dans l'espace de Fourier pour évaluer le produit de convolution. Les couples d'entiers relatifs $b = (b_x, b_y)$ se réfèrent aux indices dans l'espace de Fourier et on a :

$$\overline{\underline{v}^{\tau}} = \sum_{b \in \mathbb{Z}^2} \underline{\hat{\underline{\Delta}}}^0(\underline{k}_b) : \underline{\hat{\underline{\tau}}}(\underline{k}_b)$$
(15)

Pour faire apparaître la dépendance linéaire en $[\tau_{\beta}]$ de ce terme, \mathbb{Z}^2 est exploré par intervalles de la taille de \mathcal{I} . La transformée de Fourier continue de $\underline{\tau}$, constant par morceau, s'exprime en fonction de la transformée de Fourier discrète $[\hat{\tau}_b]$ de la série finie de données $[\tau_{\beta}]$ pour *b* pris dans \mathcal{I} [BRI 10] par

$$\underline{\hat{\underline{\tau}}}(\underline{k}_b) = \frac{1}{N_x N_y} \operatorname{sinc}\left(\frac{\pi b_x}{N_x}\right) \operatorname{sinc}\left(\frac{\pi b_y}{N_y}\right) \exp\left[-i\pi\left(\frac{b_x}{N_x} + \frac{b_y}{N_y}\right)\right] \underline{\hat{\underline{\tau}}}_{=b} \quad (16)$$

La transformée de Fourier discrète $[\hat{\tau}_b]$ est N_x, N_y périodique. La réorganisation de (15) conduit à introduire un opérateur de Green sur les vitesses périodique, comme une série finie de données telle que pour tout $b \in \mathcal{I}$

$$\hat{\underline{\Delta}}_{b}^{0} = \sum_{(m,n)\in\mathbb{Z}^{2}}\operatorname{sinc}\left(\frac{\pi(b_{x}+mN_{x})}{N_{x}}\right)\operatorname{sinc}\left(\frac{\pi(b_{y}+nN_{y})}{N_{y}}\right)$$
$$\times \exp\left[-i\pi\left(\frac{b_{x}+mN_{x}}{N_{x}}+\frac{b_{y}+nN_{y}}{N_{y}}\right)\right]\hat{\underline{\Delta}}_{b}^{0}(\underline{k}_{b_{x}+mN_{x},b_{y}+nN_{y}}) (17)$$

L'expression de la vitesse moyenne s'exprime alors simplement en fonction de $[\hat{\tau}_b]$ puis se simplifie en utilisant le théorème de Plancherel :

$$\overline{\underline{v}^{\tau}} = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{b \in \mathcal{I}} \underline{\hat{\underline{\Delta}}}_{=b}^0 : \underline{\hat{\underline{\tau}}}_{=b} = \sum_{\beta \in \mathcal{I}} \underline{\underline{\underline{\Delta}}}_{=\beta}^0 : \underline{\underline{\tau}}_{=\beta}$$
(18)

Cette égalité est valable pour tout choix des $[\tau_{\beta}]$. Par identification, la proposition (14) produit alors le résultat remarquable sur $\underline{\underline{d}}_{\beta}^{\alpha}$, moyenne sur chaque pixel Ω_{β} du taux de déformation de la solution du problème (P^{α}) :

$$\underline{\underline{d}}_{\beta}^{\alpha} = \frac{1}{|\Omega_{\beta}|} \int_{\Omega_{\beta}} \underline{\underline{d}}^{\alpha} \, \mathrm{d}\,\Omega = N_x N_y \underline{\alpha} \cdot \underline{\underline{\Delta}}_{\beta}^0 \tag{19}$$

Tous les termes de la fonctionnelle sont donc maintenant accessibles au calcul. La moyenne sur chaque pixel Ω_{β} de la contribution de la polarisation à la déformation est notée $\underline{\eta}_{\beta} = (\Gamma_0 * \underline{\tau})_{\beta}$. Le calcul de la transformée de Legendre fait apparaître la définition d'une viscosité équivalente μ_{β} sur chaque pixel Ω_{β} , utile pour traiter le cas de pixels hétérogènes comportant une phase fluide et une phase solide. Leurs calculs sont détaillés dans [BRI 10]. La perméabilité \underline{K}^0 du milieu de référence se calcule à partir de l'expression de \underline{v}^{α} , connue dans l'espace de Fourier. La borne sur la perméabilité est finalement donnée par

$$\frac{1}{2} \underline{\alpha} \cdot \underline{\underline{K}} \cdot \underline{\alpha} \leq \frac{1}{2} \underline{\alpha} \cdot \underline{\underline{K}}^{0} \cdot \underline{\alpha} + \frac{1}{N_{x} N_{y}} \sum_{\beta \in \mathcal{I}} \left[\frac{1}{2} \left(\underline{\underline{\tau}}_{\beta} : \underline{\underline{\eta}}_{\beta} + \underline{\underline{\tau}}_{\beta} : (2\mu_{\beta} - 2\mu_{0})^{-1} \underline{\underline{\tau}}_{\beta} \right) + \underline{\underline{d}}_{\beta}^{\alpha} : \underline{\underline{\tau}}_{\beta} \right] \quad (20)$$

Pour optimiser le choix des polarisations sur chaque pixel il faut résoudre le système linéaire

$$\forall \beta \in \mathcal{I}, \underline{\eta}_{\beta} + (2\mu_{\beta} - 2\mu_{0})^{-1} : \underline{\underline{\tau}}_{\beta} = \underline{\underline{d}}_{\beta}^{\alpha}$$

$$\tag{21}$$

Le taux de déformation optimal au sens de la norme définie par la forme quadratique associée à la fonctionnelle de Hashin-Shtrikman est connu par sa moyenne sur chaque pixel et se calcule comme

$$\underline{\underline{d}}_{\beta}^{opt} = \underline{\underline{d}}_{\beta}^{\alpha} - (\Gamma_0 * \underline{\underline{\tau}}^{opt})_{\beta}$$
⁽²²⁾

Il tend vers la solution du problème de perméabilité (P) initial pour une grille de discrétisation de raffinement croissant [BRI 11]. Sa représentation graphique ou celle du champ de vitesse associé permet d'analyser les effets locaux de la géométrie de la microstructure. Des bornes supérieures de la perméabilité de précision tendant aussi près que voulu vers la perméabilité d'une structure connue peuvent ainsi être obtenues par raffinement de la discrétisation de l'espace des champs de polarisation.

4. Implémentation pratique

L'optimisation des paramètres $[\tau_{\beta}]$ revient donc à inverser une matrice dont les termes sont évalués successivement dans l'espace réel et l'espace de Fourier. L'inversion est réalisée numériquement par utilisation de solveurs itératifs, chaque itération étant dominée par deux calculs de FFT [BRI 10]. La difficulté majeure de l'implémentation réside dans le calcul des opérateurs de Green périodisés dont l'expression est une somme infinie dans l'espace de Fourier, de convergence lente. Pour une revue exhaustive sur les implémentations de l'opérateur de Green on se réfèrera à [BRI 11]. La principale nouveauté par rapport à l'élasticité linéaire est le calcul de l'opérateur de

Green sur les vitesses $\underline{\Delta}^0$. Suivant la nomenclature précisée dans [BRI 11], le calcul d'une borne rigoureuse nécessite l'utilisation des opérateurs consistants comme défini en (17). Au regard des propriétés de symétrie de $\underline{\underline{\Delta}}^0$, il suffit de calculer sur chaque pixel deux séries infinies qui peuvent être stockées pour chaque taille de grille, car elles sont indépendantes des paramètres du problème.

5. Chute de perméabilité et de porosité d'une craie sous confinement

Un véritable test de la méthode sera de capturer la chute de perméabilité liée à l'effondrement de pores dans une craie sous confinement hydrostatique croissant. Le test consistera à calculer des estimations de la perméabilité à partir de représentations 3D par FIB ou microtomographie de la microstructure de la craie avant et après effondrement de pores. Dans cette section nous présentons de nouveaux résultats expérimentaux qui s'ajoutent aux descriptions précédentes de l'effondrement de pores par notamment [NAD 10], [SCH 03] et [RIS 94], de pair avec une mesure de la chute de perméabilité.

5.1. Dispositif expérimental

Un échantillon sec cylindrique de craie de Haubourdin de hauteur 65 mm et de diamètre 35 mm est placé dans une cellule de confinement décrite dans [DAN 99]. Un dispositif permet l'injection de gaz sur les faces amont ou aval. L'échantillon est soumis à un confinement croissant de 1 à 60 MPa par paliers puis à une décharge. À chaque palier de confinement des mesures de porosité et de perméabilité au gaz sont effectuées.

La mesure de perméabilité se fait à l'argon, sous les hypothèses de régime quasipermanent et de gaz parfait par mesure de la vitesse de chute de pression dans un volume tampon calibré de 420 ml en amont. Tous les capteurs de pression utilisés mesurent l'écart à la pression atmosphérique. Le volume tampon est rempli à une surpression initiale de 5 bars. L'aval est drainé à pression atmosphérique. L'incertitude relative sur la mesure de perméabilité, liée au capteur de pression (capteur 0-100 bars avec une précision relative de 0,04% de la pleine échelle) et au chronomètre (mesure à la seconde) est inférieure à 5%.

Pour la mesure de porosité, un réservoir tampon V_1 calibré de 140 ml est relié à la face aval de l'échantillon (figure 1.a). Initialement, ce volume est mis sous une surpression $p_{ini.}$ de 4 bars puis la vanne 1 est fermée. La vanne 2 permet de d'isoler le réservoir de l'échantillon, initialement à pression atmosphérique. La vanne 3 reste fermée. Après stabilisation thermique, la vanne 2 est ouverte et la chute de pression due au remplissage du volume poreux et des deux volumes morts de tubes V_2 et V_3 est mesurée par un capteur de pression 0-4 bars avec une précision relative de 0,04% de la pleine échelle. Le dispositif est calibré au préalable sur un échantillon fantôme non poreux afin de mesurer les volumes morts entre les vannes 2 et 3 et l'échantillon. La



Figure 1. (a) Dispositif expérimental pour les mesures de perméabilité et de porosité au gaz sous confinement. (b) Image MEB d'un échantillon sain de Craie Haubourdin - clair : réseau solide de calcite, foncé : pores.

température étant contrôlée dans la salle de la cellule, la loi des gaz parfaits permet de relier la valeur stabilisée de la surpression $p_{fin.}$ au volume poreux V_p de l'échantillon par

$$V_1 p_{ini.} = (V_1 + V_2 + V_3 + V_p) p_{fin.}$$
(23)

À un palier de confinement donné, la porosité calculée est exprimée comme le ratio du volume poreux mesuré sur le volume total de l'échantillon dans ses dimensions initiales avant confinement. Cette porosité, lagrangienne, diffère de la porosité eulérienne calculée sur le volume courant de l'échantillon, car celui ci diminue lors du confinement. Pour les gammes de porosité mesurées et les dimensions de l'échantillon, la mesure de porosité a une précision absolue de l'ordre de 0,2 % due à la précision du capteur de pression et aux variations thermiques.

5.2. Résultats

Les résultats sont résumés sur la figure 2. La porosité initiale à 1 MPa est de 41,9%. La mesure est confirmée par d'autres méthodes de mesures réalisées par J. Nadah en l'absence de confinement : 42,7% par porosimétrie mercure et 41% par saturation à l'éthanol sous vide [NAD 10], et dans le cadre de notre travail 43% par analyse de plus de 40 images MEB du type figure 1.b.

La perméabilité et la porosité suivent des phases d'évolution similaires. L'allure de la courbe de chute de porosité est exactement celle de la déformation volumique en fonction du confinement sur une craie de Lixhe dans [SCH 03]. Durant la phase de



Figure 2. Évolution de la perméabilité au gaz (Ar) et du volume poreux de la Craie Haubourdin au cours d'un cycle de charge-décharge de la pression de confinement.

confinement jusqu'à 20 MPa, l'évolution est faible et associée à un régime élastique. À partir de 20 MPa, une chute accélérée de la perméabilité et du volume poreux est observée. Ce phénomène correspond à l'effondrement de pores observé par [RIS 94] et [SCH 03] pour des essais de compression hydrostatique. Il est la conséquence d'une phase de plasticité qui serait initiée vers 20 MPa de confinement par l'effondrement de ports entre les grains de calcite. Durant la phase de décharge, les grandeurs évoluent à une vitesse de l'ordre de celle de la première phase et on retrouve un régime élastique. Un quart du volume poreux initial a été perdu au cours du cycle. Cette très forte irréversibilité est attribuée à l'effondrement de pores de la deuxième phase du chargement. Après expérience, le diamètre et la hauteur de l'échantillon ont diminué d'environ 3% et une bande de localisation des déformations a été observée.

Pour le même matériau, un essai de compression hydrostatique a été réalisé par [NAD 10]. Jusqu'à 20 MPa, la déformation est linéaire avec un module de compressibilité de l'échantillon de 4 GPa. La variation de volume total associée correspond à la variation du volume poreux ici mesurée, dans la limite des incertitudes de mesures sur la variation du volume poreux qui sont relativement élevées. Cette observation, à confirmer par d'autres mesures, s'accorderait donc avec un module de Biot de 1 pour

la craie Haubourdin : la contribution de la déformation volumique du squelette solide à la déformation totale de l'échantillon serait négligeable.

6. Conclusions et perspectives

Un nouveau cadre variationnel de type Hashin-Shtrikman a été établi pour le calcul de la perméabilité sur une cellule aux frontières périodiques. Une adaptation de la méthode FFT-HS en élasticité linéaire a été proposée pour une application numérique du principe. Des bornes numériques arbitrairement précises peuvent être calculées sur les microstructures comportant une phase solide connexe. La méthode a été validée par comparaison avec un calcul par élément finis sur une structure simple. Un bon test de la méthode sera sa capacité à reproduire la chute de perméabilité liée à l' effondrement de pores, notamment dans la craie. De nouveaux résultats expérimentaux illustrent l'effondrement de pores dans la craie Haubourdin soumise à un cycle de confinement hydrostatique et apportent des données numériques sur la chute de perméabilité et de porosité. La prochaine étape consistera à obtenir une représentation tridimensionnelle du réseau poreux d'échantillons de craie Haubourdin sains et effondrés, de calculer des estimations de la perméabilité par la méthode FFT développée et de confronter les résultats numériques et expérimentaux.

Remerciements

Les auteurs tiennent à remercier Jaouad Nadah pour son expérience sur la craie Haubourdin et le prêt d'échantillons, Zhibo Duan pour l'aide à la mise au point du dispositif de mesure de porosité sous confinement et Sébastien Brisard pour son aide précieuse sur la théorie et l'implémentation pratique de la méthode FFT.

7. Bibliographie

- [BRI 10] BRISARD S., DORMIEUX L., « FFT-based methods for the mechanics of composites : A general variational framework », *Computational Materials Science*, vol. 49, 2010, p. 663-671.
- [BRI 11] BRISARD S., DORMIEUX L., « Combining Galerkin approximation techniques and the principle of Hashin and Shtrikman to improve two FFT-based numerical methods for the homogenization of composites », *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2011, preprint submitted.
- [DAN 99] DANA E., SKOCZYLAS F., « Gas relative permeability and pore structure of sandstones », *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, vol. 36, 1999, p. 613-625.
- [DOR 06] DORMIEUX L., KONDO D., ULM F.-J., Microporomechanics, Wiley, 2006.
- [MON 09] MONCHIET V., BONNET G., LAURIAT G., « A FFT-based method to compute the permeability induced by a Stokes slip flow through a porous medium », *Comptes Rendus*

de Mécanique, vol. 337, 2009, p. 192-197.

- [MOU 94] MOULINEC H., SUQUET P., « A fast numerical method for computing the linear and non linear properties of composites », *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, vol. 2, n° 318, 1994, p. 1417-1423.
- [NAD 10] NADAH J., « Valorisation d'une craie du Nord de la France en assise de chaussée routière », PhD thesis, École Centrale de Lille, juin 2010.
- [RIS 94] RISNES R., ET AL., « Changes in mechanical properties of chalk caused by deformation and by pressure », *Eurock '94 Symposium*, Copenhague, 1994.
- [SCH 03] SCHROEDER C., « Du coccolithe au réservoir pétrolier : Approche phénoménologique du comportement mécanique de la craie en vue de sa modélisation à différentes échelles », PhD thesis, Université de Liège Faculté des Sciences appliquées, 2003.
- [WIE 07] WIEGMANN A., « Computation of the permeability of porous materials from their microstructure by FFF-Stokes », 2007, ITWM Fraunhofer.
- [WIL 77] WILLIS J., « Bounds and self-consistant estimates for the overall properties of anisotropic composites », *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 25, 1977, p. 185-202.