



HAL
open science

Upscaling of failure and transport properties in tight porous media

David Grégoire

► **To cite this version:**

David Grégoire. Upscaling of failure and transport properties in tight porous media. Mechanics [physics.med-ph]. Université de Pau et des Pays de l'Adour, 2014. tel-01090038

HAL Id: tel-01090038

<https://hal.science/tel-01090038>

Submitted on 2 Dec 2014

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.

ENDOMMAGEMENT, FISSURATION ET TRANSPORT DANS LES MILIEUX POREUX PEU PERMÉABLES

MÉMOIRE

présenté devant
l'Université de Pau et des Pays de l'Adour

pour l'obtention de
l'**Habilitation à Diriger des Recherches**

par
DAVID GRÉGOIRE

École doctorale :
Sciences Exactes & leurs applications (ED211)

Spécialité :
MÉCANIQUE

Habilitation soutenue le 22/10/2014 devant la Commission d'examen

Jury MM.

JAN CARMELIET	Professor	EMPA - ETH Zürich
ALAIN COMBESURE	Professeur	LaMCoS – INSA Lyon
RENÉ DE BORST	Professor - Président	University of Glasgow
DJIMÉDO KONDO	Professeur - Rapporteur	IJLRA – UMPC Paris
NICOLAS MOËS	Professeur - Rapporteur	GeM – ECN Nantes
GILLES PIJAUDIER-CABOT	Professeur	LFC-R – UPPA Anglet
GIOACCHINO (CINO) VIGGIANI	Professeur - Rapporteur	3S-R – UJF Grenoble

Université de Pau et des Pays de l'Adour
LFC-R – UPPA – CNRS UMR5150
Campus Montaury, 64600 Anglet, France

ENDOMMAGEMENT, FISSURATION ET TRANSPORT DANS LES MILIEUX POREUX PEU PERMÉABLES

MÉMOIRE

présenté devant
l'Université de Pau et des Pays de l'Adour

pour l'obtention de
l'**Habilitation à Diriger des Recherches**

par
DAVID GRÉGOIRE

École doctorale :
Sciences Exactes & leurs applications (ED211)

Spécialité :
MÉCANIQUE

Habilitation soutenue le 22/10/2014 devant la Commission d'examen

Jury MM.

JAN CARMELIET	Professor	EMPA - ETH Zürich
ALAIN COMBESURE	Professeur	LaMCoS – INSA Lyon
RENÉ DE BORST	Professor - Président	University of Glasgow
DJIMÉDO KONDO	Professeur - Rapporteur	IJLRA – UMPC Paris
NICOLAS MOËS	Professeur - Rapporteur	GeM – ECN Nantes
GILLES PIJAUDIER-CABOT	Professeur	LFC-R – UPPA Anglet
GIOACCHINO (CINO) VIGGIANI	Professeur - Rapporteur	3S-R – UJF Grenoble

Université de Pau et des Pays de l'Adour
LFC-R – UPPA – CNRS UMR5150
Campus Montaury, 64600 Anglet, France

Abstract

This research study aims at achieving a better understanding of the relationship between the mechanical damage, the evolution of the porous network, the adsorption capacities and the transport properties in tight porous media. Tight porous media are micro and meso-porous materials characterized by a very low permeability (less than a tenth of a millidarcy). This low permeability is due to the presence of pores of very small diameters (typically few nanometers). These nanopores are on high influence on the mechanical behaviour and transport properties at the macrolevel. As in hierarchical materials, all scales have to be considered to predict consistently failure and transport properties in such tight porous media, which are widely encountered in chemical, civil or petroleum engineering. Activated carbons, hardened cement paste, mortar or concrete materials, tight rocks or natural coals are among those materials.

In a first part, the failure behaviour of the quasi-brittle solid phase is studied apart. Failure of such quasi-brittle materials is characterized by the presence of a fracture process zone (FPZ) where micro-cracks appear, evolve and interact in the course of damage. Numerical and experimental investigations are performed to characterize the evolution of this fracture process zone upon failure. Three point bending failure experiments are carried out to study size and boundary effects in notched and un-notched concrete beams. In addition, meso and macro models are proposed to predict damage and failure in such quasi-brittle materials and to reproduced the experimental failure curves. Particularly, a new non-local formulation (integral-type) is proposed where the intrinsic interactions within the structure are upscaled through a new computed weight function. This function is estimated by describing the material as a set of inclusions that interact upon loading. These inclusions are successively elastically dilated to characterize the transfer of information within the materials. At the mesoscale, the FPZ evolution is studied in term of correlation lengths between damage events analysed by Ripley's functions, which are traditionally used in spatial ecology. Comparisons are performed between acoustic emission data and lattice model results.

The second part is dedicated to the coupling between damage and transport properties in mesoporous materials. The microstructure evolution of mortar and tight rock specimens submitted to static and dynamic loadings are investigated thanks to mercury intrusion porosimetry (MIP). In addition, the intrinsic and the apparent permeabilities are estimated by upscaling Poiseuille flow and Knudsen diffusion within a virtual random – but hierarchical – porous network directly built from the MIP measurements. Experimental measurements of permeability to single gas (N₂, He, CH₄) are performed and the comparisons show the ability of the model to estimate not only the apparent and intrinsic permeabilities but also their evolutions under loading due to a change in the pore size distribution. The model and the experimental set up have been extended to estimate the relative permeabilities of gas mixtures (He/CH₄). A natural selectivity of the porous media due to the Knudsen diffusion is predicted in agreement with the experimental measurements.

The third part is dedicated to the coupling between adsorption and swelling in microporous materials. This is typically of utmost importance in the enhancement of non-conventional reservoirs or in the valorisation of CO₂ geological storage. In classical poromechanics, an increase of bulk pressure should lead to a material contraction. For microporous materials, the confinement of the adsorbed phase within the micropores (down to the nanometer size) leads to a volumetric swelling of the solid phase. A new poromechanical framework is proposed to express the swelling increment as a function of the increment of bulk pressure, the fluid confinement and the porosity. The fluid confinement is estimated from adsorption isotherm measurements of excess quantities within the Gibbs formalism. An incremental non-linear scheme is proposed where the poromechanical properties and the Gibbs formalism are updated at each incremental pressure step, depending on the porosity changes. A new upscaling technique based on a three-phase homogenisation scheme is proposed to take into account the fact that the skeleton is microporous and that the surface effects may have an important influence on the apparent mechanical properties of the solid phase. Predicted swellings are compared with results from the literature and with our own experimental database where both adsorption and strain are measured in-situ and simultaneously and where the full-field swelling is monitored by digital image correlation.

Associated publications

Part #1

- Continuum to discrete transition during failure in nonlocal damage models
- Failure and size effect for notched and unnotched concrete beams
- Meso-scale modelling of the size effect on the fracture process zone of concrete
- Interaction-based non-local damage model for failure in quasi-brittle materials
- Size and boundary effects during failure in quasi-brittle materials: experimental and numerical investigations
- Mesoscale analysis of failure in quasi-brittle materials : comparison between lattice model and acoustic emission data

Part #2

- Some attempts to upscale mass transfer properties from pore size distributions in porous materials
- Capillary bundle model for the computation of the apparent permeability from pore size distributions

Part #3

- Poromechanics of adsorption-induced swelling in microporous materials: a new poromechanical model taking into account strain effects on adsorption
- Experimental and modeling investigations of adsorption-induced swelling and damage in microporous materials

Keywords

Damage, fracture, quasi-brittle materials, fracture process zone, mesoscale modeling, non-local interactions, non-local models, acoustic emission, Ripley's functions transport properties, tight porous media, intrinsic permeability, apparent permeability, Knudsen effect, Klinkenberg effect, pore size distribution, transport selectivity, poromechanics, swelling, adsorption, microporous materials, manometric technique, digital image correlation

Remerciements

Je voudrais tout d'abord remercier les membres du jury avec qui j'ai eu plaisir à échanger avant, pendant et après la soutenance. Pr. **René de Borst** pour avoir accepté de présider le jury, Prs. **Djimédo Kondo**, **Nicolas Moës** et **Cino Viggiani** pour avoir accepté de relire et rapporter mon mémoire et Prs. **Jan Carmeliet**, **Alain Combescure** et **Gilles Pijaudier-Cabot** pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail. Merci à tous pour vos remarques et conseils précieux. Nos différents échanges m'ont permis d'affiner mes perspectives de recherche et d'envisager de nouveaux chemins scientifiques à défricher.

L'habilitation à diriger des recherches permet de faire un point sur son parcours scientifique, de dresser un bilan de ses activités avant de se projeter vers l'avenir, vers de nouveaux projets et de nouveaux défis. A l'heure du bilan donc, mes premières pensées vont aux différentes personnalités scientifiques qui ont marquées mon parcours. Tout d'abord, je pense à mes directeurs de thèse, Pr. **Alain Combescure** et Dr. **Hubert Maigre**, qui m'ont initié à la recherche à l'*INSA de Lyon*. C'est à leur côté, et grâce à la complémentarité de leur profil scientifique, que j'ai pu mettre en oeuvre une démarche scientifique complète mettant en jeu à la fois modélisation, simulations numériques mais aussi études et comparaisons expérimentales. Je n'aurais pas pu être mieux accompagné pour commencer dans ce métier de chercheur, qui demande à la fois rigueur et fantaisie. C'est donc pour moi un grand plaisir et un honneur qu'Alain ait accepté de participer à cette nouvelle étape en tant que membre du jury. Je pense également au Pr. **Horacio Dante Espinosa** avec qui j'ai eu plaisir à collaborer lors de mon séjour à *Northwestern University*. Il m'a fait découvrir la mécanique à la nanoéchelle mais également l'ouverture vers d'autres disciplines et d'autres types de matériaux. A ses côtés, j'ai été sensibilisé à la structuration hiérarchique des échelles, notamment dans les matériaux naturels et biologiques, où chacune des échelles contribue à la performance globale de la matière et de la structure. C'est également à ses côtés que j'ai pu observer et être initié à la gestion d'un groupe de recherche. Enfin, je pense au Pr. **Gilles Pijaudier-Cabot** avec qui je travaille depuis mon retour en France à l'*Université de Pau et des Pays de l'Adour* et avec qui j'ai plaisir à découvrir et explorer de nouveaux horizons de recherche, à la fois multiéchelles et multidisciplinaires. Véritable compagnon de recherche, il me marque par sa curiosité, son sens du défi scientifique et sa volonté de toujours "dépasser les frontières". C'est à ses côtés que j'ai pu réellement faire mes armes de chercheur et découvrir toutes les facettes du métier, comme la recherche de financement ou la formation et l'accompagnement des plus jeunes. Dans ce cadre, j'ai pu apprécier que même si l'exigence scientifique se doit toujours d'être forte, c'est toujours l'humain qui a la priorité, dans les moments heureux comme dans les moments plus pénibles de la vie. C'est donc assez naturel mais avec un grand plaisir que je retrouve Gilles dans mon jury.

Le travail présenté ici n'a bien entendu pas été effectué seul. Aussi, je voudrais remercier mes collaborateurs et collègues chercheurs. Tout d'abord, les docteurs et doctorants que j'ai eu le plaisir d'accompagner durant ces dernières années : **Laura Verdon**, **Fadi Khaddour**, **Vincent Lefort**, **Laurent Perrier** et **Lionel Ecay**. Ensuite, j'ai eu la chance de partager le quotidien de plusieurs équipes de recherches dans différents laboratoires. Ne pouvant nommer tout le monde et pour n'oublier personne, je salue toutes les personnes avec lesquelles j'ai eu plaisir à travailler au jour le jour au **Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Structures** de l'*INSA de Lyon*, aux laboratoires **Micro and Nanomechanics Laboratory** et **Dynamic Inelasticity Laboratory** de *Northwestern University* et au **Laboratoire des Fluides Complexes et leurs Réservoirs** de l'*Université de Pau et des Pays de l'Adour*. Je voudrais également saluer mes collègues de l'**Institut Supérieur Aquitain du Bâtiment et des Travaux Publics** où j'ai le plaisir d'effectuer la plupart de mes enseignements.

Je veux tout de même remercier nommément quelques personnes avec qui j'ai pu tisser des liens particuliers, humainement et professionnellement, lors de ces années sur la côte basque. Merci à **Marie** pour son efficacité, son travail et sa bonne humeur ! Merci au club pétanque/belote/tarot (**Kiki, Caca, Fédé, Cécé, Lolo**) pour les pauses du matin, du midi, du soir, voire du soir très tard ! Merci aux pelotaris du vendredi et du jeudi ! Merci à **Céline, David, Géraldine, Elodie, Olivier** pour les pic-nics, les après-midis piscine et les apéros sur les toits de Bayonne ! Enfin, spéciale dédicace aux *Fuegos dorés*, à **Sarah** et **Mourad** pour tout plein de trucs, la musique, la pelote, la fête de l'amour, les huitres du Cap, les week-end à la Montagne et tout le reste... !

Je veux dédier ce mémoire à ma famille. À mes filles, **Emma** et **Camille**. À ma mère. À mes grands-parents qui m'ont élevé et porté jusqu'ici. À mes tantes, oncles, cousins et amis au milieu de qui je me suis construit.

Enfin, je voudrais dédier ce mémoire à ma femme, **Marie**, sans qui rien ne serait possible...

Table des matières

Abstract	iv
Remerciements	vi
Table des matières	viii
Table des figures	xii
Liste des tableaux	xv
1 Introduction générale	1
2 Rupture et endommagement des milieux quasi-fragiles	7
2.1 Introduction	8
2.1.1 Cadre de travail	8
2.1.2 Contexte	8
2.1.3 Verrous scientifiques	8
2.1.4 Bilan des actions de recherche réalisées	9
2.2 Constitution d'une base de données expérimentales pour la validation de modèles	11
2.2.1 Description des essais	11
2.2.2 Analyse des effets d'échelle	15
2.3 Études à l'échelle mésoscopique	17
2.3.1 Présentation du modèle numérique	17
2.3.2 Représentativité du processus global de fissuration	19
2.3.3 Représentativité du processus local de fissuration	21
2.3.3.1 Comparaisons en terme de lieu d'endommagement	21
2.3.3.2 Comparaisons en terme de carte de densité d'énergie	24
2.3.4 Analyse des corrélations induites lors de la rupture quasi-fragile	31
2.3.4.1 Analyse en terme d'histogramme de distances relatives entre points endommagés	31
2.3.4.2 Analyse spatiale du processus de localisation à l'aide de fonctions de Ripley	35
2.4 Transfert d'échelles et étude des interactions à l'échelle macroscopique	39
2.4.1 Interactions non-locales et fonctions poids	40
2.4.2 Formulation finale	45
2.4.3 Application à l'étude de la rupture dynamique d'une barre en traction	45
2.4.4 Application à l'étude de l'écaillage	47
2.5 Conclusion	49
2.6 Bibliographie du chapitre	50

3	Couplage endommagement/perméabilité dans les milieux mesoporeux	53
3.1	Introduction	54
3.1.1	Cadre de travail	54
3.1.2	Contexte	54
3.1.3	Verrous scientifiques	54
3.1.4	Bilan des actions de recherche réalisées	56
3.2	Prédiction de perméabilités, intrinsèque et apparente, à partir d'une mesure de distribution tailles de pore	57
3.2.1	Assemblage d'un réseau de pore hiérarchique et aléatoire	57
3.2.2	Estimation de la perméabilité apparente	58
3.2.2.1	Écoulement de Poiseuille	58
3.2.2.2	Écoulement de Knudsen	58
3.2.2.3	Transfert d'échelle des propriétés de transport pour un assemblage aléatoire de pore	59
3.2.2.4	Écoulement de Darcy à la macro-échelle et identification de la perméabilité apparente	59
3.3	Validation par comparaisons expérimentales	60
3.3.1	Matériau, échantillon et procédure expérimentale	60
3.3.2	Mesures expérimentales	61
3.3.3	Comparaisons entre les résultats expérimentaux et les prédictions du modèle	63
3.3.4	Influence du type de gaz utilisé	63
3.4	Étude de la sélectivité naturelle d'un milieu poreux vis à vis d'un mélange de gaz donné	65
3.4.1	Sélectivité dans un capillaire simple	65
3.4.1.1	Écoulement de Poiseuille du mélange	65
3.4.1.2	Écoulement de Knudsen du mélange	65
3.4.1.3	Écoulement global du mélange et sélectivité	65
3.4.1.4	Résultats pour un mélange binaire (50%CH ₄ /50%He)	66
3.4.1.5	Comparaisons avec des résultats de la littérature	68
3.4.2	Sélectivité dans un milieu poreux et premiers résultats expérimentaux	69
3.5	Conclusion	70
3.6	Bibliographie du chapitre	70
4	Couplage gonflement/adsorption dans les milieux microporeux	73
4.1	Introduction	74
4.1.1	Cadre de travail	74
4.1.2	Contexte	74
4.1.3	Verrous scientifiques	74
4.1.4	Bilan des actions de recherche réalisées	76
4.2	Modèle poromécanique avec porosité variable pour la prédiction du gonflement induit par adsorption en milieux microporeux	76
4.2.1	Cadre poromécanique général	76
4.2.2	Extension pour tenir compte des variations de porosité	77
4.2.3	Choix d'un modèle d'homogénéisation	78
4.2.4	Effet du gonflement sur l'isotherme adsorption et correction du formalisme de Gibbs	79
4.2.5	Formulation finale	79
4.2.6	Résultats et comparaisons expérimentales	80

4.2.6.1	Mesures expérimentales sur charbons bitumineux réalisées par Ottiger et al. (2008b)	80
4.2.6.2	Identification des paramètres du modèle	81
4.2.6.3	Résultats	81
4.3	Un nouveau montage expérimental permettant la mesure in situ simultanée des quantités adsorbées et du gonflement induit par l'adsorption en milieux microporeux	86
4.3.1	Matériau, échantillon et procédure expérimentale	86
4.3.2	Mesure des quantités adsorbées	87
4.3.3	Mesure du gonflement induit par adsorption	87
4.3.4	Résultats	88
4.4	Conclusion	91
4.5	Bibliographie du chapitre	91
5	Conclusion générale	95
6	Perspectives et projet scientifique	99
6.1	Introduction	100
6.1.1	Illustration sur un cas industriel : simulation d'un réservoir non conventionnel à faible perméabilité	100
6.1.2	Objectifs et méthodologie	101
6.2	Représentation physiquement fondée de la propagation de fissure en milieu quasi-fragile	102
6.2.1	Analyse numérique et expérimentale des corrélations induites à l'échelle mésoscopique	102
6.2.2	Transfert d'échelle et simulations à l'échelle macroscopique	102
6.3	Couplages endommagement/perméation au voisinage d'une fissure	103
6.3.1	Couplages hydromécaniques et simulations à l'échelle mésoscopique	103
6.3.2	Prédiction directe à partir des PSD des propriétés de perméation, extension à l'écoulement multiphasique	103
6.3.3	Évolution sous charge de la distribution de tailles de pore	104
6.4	Influence des nanopores sur le comportement macroscopique	104
6.4.1	Couplage adsorption/gonflement en milieu libre et fissuration induite par adsorption	104
6.4.2	Homogénéisation des effets de surface et en milieux microporeux	105
6.5	Bibliographie du chapitre	106
	Bibliographie générale	116
A	Annexe : synthèse administrative des activités de recherche et d'encadrement	117
A.1	Parcours et curriculum vitæ	117
A.2	Activités de recherches doctorales	120
A.3	Activités de recherches post-doctorales	124
A.4	Insertion dans l'unité de recherche d'appartenance	126
A.5	Animation de la recherche	128
A.6	Encadrement et co-encadrement d'étudiants	138
A.7	Tâches administratives et activités d'enseignement	141
A.8	Liste des publications	142
A.9	Liste des communications	144

Table des figures

1.1	Les différentes échelles mises en jeu dans les milieux poreux faiblement perméables. . .	3
2.1	Granulométrie du béton étudié.	12
2.2	Géométrie des éprouvettes testées en flexion 3 points.	13
2.3	Mesure du CMOD pour des éprouvettes entaillées (a) et non-entaillées (b).	13
2.4	Montage expérimental en flexion 3 points.	13
2.5	Réponses expérimentales moyennes en Force / ouverture d'entaille	14
2.6	Comparaisons entre les résultats expérimentaux et la loi universelle de Bazant	16
2.7	Maillage lattice typique (a) ; arrangement autour des granulats (b) ; élément lattice (c) ; degrés de liberté (d).	17
2.8	Localisation des zones mésoscopiques pour éprouvette entaillée (a) ou non entaillée (b).	20
2.9	Comparaisons expérimentales/mésoscopique	20
2.10	Réponse global Force/CMOD (a) et processus local de fissuration (b) pour la plus grande éprouvette entaillée à la moitié ($i=1, n=1$).	21
2.11	Positions des capteurs acoustiques pour les différentes géométries.	22
2.12	Exemple de distributions d'événements acoustiques pour les différentes géométries testées.	23
2.13	Densité d'énergie dissipée dans le réseau lattice, moyennées sur 100 calculs pour les 3 incréments de chargement ((a) Stage 1, (b) Stage 2, (c) Stage 3) pour la plus grande éprouvette entaillée à la moitié.	25
2.14	Evolution de l'énergie dissipée le long du ligament (a) et perpendiculairement au ligament (b) pour les trois mêmes incréments de chargement pour la plus grande éprouvette entaillée à la moitié.	26
2.15	Densité d'énergie intégrée le long du ligament pour des éprouvettes entaillées et non-entaillées pour 3 tailles de ligaments équivalentes.	26
2.16	Différents intervalles d'énergie dissipée représentés sur les courbes expérimentales moyennes Force vs. CMOD.	27
2.17	Profils d'énergie dissipée durant les différents incréments de charge à partir des analyses acoustiques (Experimental) du modèle mésoscopique (Numerical) pour les éprouvettes entaillées à moitié. La préentaille est indiquée par une ligne pointillée rouge.	29
2.18	Projections horizontales et verticales des profils d'énergie dissipée pour les éprouvettes entaillées à moitié.	30
2.19	Projections horizontales et verticales des distributions numériques et expérimentales de distances relatives au pic (premier incrément ΔG_{G1} à la figure 2.16).	32
2.20	Histogrammes en échelle logarithmique et normalisés des distances relatives calculées au pic (ΔG_{f1}).	34
2.21	Histogrammes en échelle logarithmique et normalisés des distances relatives calculées dans la phase adoucissante (ΔG_{f2}).	34
2.22	Distribution de points localisée dans un disque de rayon $R = 0.02$ m et fonction résiduelle correspondante.	36
2.23	Géométrie et courbe force/CMOD pour l'essai numérique de traction directe ($D = 100$ mm).	37

2.24	Réponse en traction directe : distribution de l'endommagement au pic (a) et évolution de la longueur de corrélation (b).	37
2.25	Réponse en flexion 3 points : distributions de l'endommagement au pic pour des éprouvettes entaillée à moitié (a) et non-entaillée (b) ; évolution des longueurs de corrélation pour les deux géométries (c).	38
2.26	Principe du transfert d'information.	40
2.27	Problème simple d'une barre sous tension ($L = 10cm$, $\sigma_Y = 3MPa$, $E = 30GPa$, $\varepsilon_{D_0} = 10^{-4}$, $\sigma_0 = 1.8MPa$, $D = 70\%$).	42
2.28	Influence de la taille des inclusions : (a) loin du bord avant normalisation, (b) loin du bord après normalisation et (c) près du bord après normalisation.	44
2.29	Réponse à proximité d'une zone endommagée avec la formulation originale (a) et la nouvelle formulation basée sur les interactions (b).	44
2.30	Rupture dynamique d'une barre en traction : description du test et évolution temporelle de l'amplitude des déformations le long de la barre.	46
2.31	Rupture dynamique d'une barre en traction : (a) distance entre l'ouverture de fissure estimée et celle correspondant à un profil idéal d'une discontinuité forte ; (b) déformation dans l'élément central fissuré en fonction de la taille des éléments adimensionnée à rupture complète.	47
2.32	Écaillage dynamique : paramètres de l'essai numérique.	48
2.33	Écaillage dynamique : répartition de l'endommagement le long de la barre.	48
3.1	Génération du réseau hiérarchique et aléatoire.	58
3.2	Schéma du dispositif de mesure de perméabilité sous charge.	60
3.3	Courbe contrainte-déformation et évolution de l'endommagement.	61
3.4	Évolution des PSD avec l'endommagement.	62
3.5	Comparaisons des mesures expérimentales et des valeurs estimées par le modèle en terme d'évolution de perméabilité intrinsèque.	63
3.6	Comparaisons des mesures expérimentales et des valeurs estimées par le modèle en terme d'évolution du coefficient de Klinkenberg.	64
3.7	Comparaison des perméabilités apparentes estimées et mesurées d'un échantillon sain pour différents gaz purs (N_2 , CH_4 , CO_2).	64
3.8	Effet du diamètre sur la séparation dans un capillaire pour un mélange initial (50% CH_4 /50% He).	66
3.9	Effet de la pression sur la séparation dans un capillaire pour un mélange initial (50% CH_4 /50% He).	67
3.10	Comparaisons expérimentales (Adzumi, 1937) quant à l'effet de la pression sur la séparation dans un capillaire pour un mélange initial (51% H_2 /49% C_2H_2).	68
3.11	Sélectivité dans un milieu poreux et comparaison avec de premiers résultats expérimentaux.	69
4.1	Schéma représentant la densité de fluide au sein d'un pore dans le cadre du formalisme de Gibbs. Les parois du pores sont situées en $\pm \frac{w}{2}$.	77
4.2	(a) Comparaison entre le gonflement mesuré par Ottiger et al. (2008b) et prédit par le modèle ; (b) évolution des quantités adsorbées d'excès mesurées et des quantités totales estimées.	82
4.3	Évolution du coefficient de confinement durant le gonflement de la matrice poreuse.	83
4.4	Évolution des propriétés poromécaniques durant le gonflement de la matrice poreuse : (a) porosité, (b) module apparent, (c) module de Biot et (d) coefficient de Biot.	84
4.5	Évolution du gonflement en fonction des quantités totales adsorbées : comparaison entre le modèle et différents résultats de la littérature.	85

4.6	Distribution de taille de pore du charbon actif étudié.	86
4.7	Banc d'essai expérimental pour la mesure simultanée de quantités adsorbées et de gonflement induit par adsorption.	87
4.8	Mesures simultanées de gonflement et d'adsorption sur un charbon actif saturé avec du CO ₂ pur et du CH ₄ pur à $T = 30^{\circ}C$: (a) image de référence, (b) image déformée à 45 bar de CO ₂ , (c) norme du champ de déplacement à 45bar de CO ₂ et (d) champ de déformation radiale à 45bar de CO ₂	89
4.9	Mesures simultanées de gonflement et d'adsorption sur un charbon actif saturé avec du CO ₂ pur et du CH ₄ pur à $T = 30^{\circ}C$: (a) évolution des quantités adsorbées d'excès pour le CO ₂ et le CH ₄ , (b) évolution de la déformation volumique de gonflement pour le CO ₂ et le CH ₄ , (c) évolution des quantités adsorbées d'excès pour des cycles d'adsorption/désorption au CO ₂ et (d) évolution de la déformation volumique de gonflement pour des cycles d'adsorption/désorption au CO ₂	90
6.1	Simulation d'un réservoir non conventionnel à faible perméabilité.	100
A.1	Organigramme LFC-R au 1er janvier 2014.	127
A.2	Trombinoscope de l'équipe au 1er janvier 2014.	127

Liste des tableaux

2.1	Formulation du béton étudié	12
2.2	Propriétés mécaniques moyennes du béton utilisé	12
2.3	Identification des paramètres de la loi universelle de Bazant.	15
2.4	Paramètres utilisés pour le calcul mésoscopique.	19
2.5	Différentes géométries étudiées numériquement	33
2.6	Rupture dynamique d'une barre en traction : paramètres de l'essai numérique.	46
2.7	Rupture dynamique d'une barre en traction : paramètres de l'essai numérique.	48
3.1	Composition du mortier.	60
3.2	Diamètre critique correspondant à une contribution équivalente des écoulements de Knudsen et Poiseuille pour un capillaire unique.	64
4.1	Propriétés poromécaniques apparentes des échantillons de charbon	80
4.2	Propriétés du squelette solide déduites.	81
A.5	Collaborations au sein du LFC-R.	128

Chapitre 1

Introduction générale

L'étude des milieux poreux représente un défi pour le chercheur mécanicien, à la fois en recherche fondamentale et en recherche appliquée. En mécanique théorique, la variété des échelles (de l'échelle nanoscopique du micropore à l'échelle macroscopique de la structure) et des champs disciplinaires concernés (mécanique de la rupture et de l'endommagement, homogénéisation, poromécanique, mécanique des fluides et des écoulements, physique des interfaces, chimie, etc.) font que le milieu poreux est au cœur des problématiques historiques du mécanicien. D'autre part les applications industrielles sont nombreuses et variées. Sans être exhaustif, on peut citer les génies pétrolier, civil, nucléaire et chimique, l'industrie pharmaceutique, le génie de l'environnement et le génie des procédés ou encore le génie biomédical.

Ce mémoire d'habilitation à diriger des recherches vise à préciser les liens entre endommagement, fissuration, évolution du réseau poreux et propriétés de perméation dans les milieux poreux peu perméables. On cherchera notamment à identifier et à transférer d'une échelle à l'autre les grandeurs d'intérêt.

Les milieux poreux peu perméables sont caractérisés par la présence de pore de très petits diamètres, de l'ordre du nanomètre. Ils sont dits « microporeux » suivant la classification IUPAC¹. Les matériaux cimentaires (pâte de ciment notamment), les roches à faible perméabilité, les charbons naturels ou les charbons actifs rentrent par exemple dans cette classification. Du fait de leur caractère microporeux, ces matériaux ont la particularité de présenter des surfaces spécifiques (surfaces développées du réseau poreux) très importantes, de l'ordre de 100 – voire 1000m² – par gramme d'échantillon, pour des porosités qui restent relativement faibles, de l'ordre de la dizaine de pourcents. Pour ces matériaux les effets de surface ne peuvent plus être négligés et les stratégies classiques d'homogénéisation ne peuvent expliquer les diminutions très fortes de rigidité observées à l'échelle macroscopique sur le matériau poreux global, comparées à celles du matériau composant le squelette poreux.

À la rupture, ces milieux poreux peu perméables ont un comportement quasi-fragile et donc, après le domaine élastique, leur réponse mécanique est caractérisée par une partie adoucissante non-linéaire et irréversible. Elle se traduit par une dégradation des propriétés élastiques et une faible déformation permanente. Cette dégradation est due à l'initiation et au développement de microfissures, dès la phase pré-pic, qui coalescent jusqu'à former une macrofissure qui propage, entraînant la ruine de la structure. Le siège de ces microfissures est appelé zone d'élaboration (FPZ). Une fois la macrofissure constituée, la FPZ se localise en pointe de fissure où la dégradation continue à évoluer. La caractérisation (taille, évolution) de la zone d'élaboration est au cœur des problématiques actuelles en mécanique de la rupture et de l'endommagement des matériaux quasi-fragiles.

1. International Union of Pure and Applied Chemistry

Par ailleurs, les couplages entre la microfissuration et l'évolution du réseau poreux restent à établir. Pourtant, ils sont déterminants pour prédire les propriétés de perméation, et leurs évolutions sous charge, des matériaux poreux peu perméables. Lors de la rupture du milieu poreux, la répartition de l'endommagement et la distribution de taille de pores évoluent. L'influence de ces évolutions sur la perméabilité intrinsèque du matériau reste à l'heure actuelle un sujet très ouvert. En effet, la perméabilité du matériau est influencée, d'une part par l'évolution de la microstructure du fait de l'endommagement diffus du matériau (micro-fissures), et, d'autre part, par l'apparition et la propagation de macro-fissures, une fois l'endommagement localisé. Dans la phase diffuse, l'écoulement est de type visqueux et la perméabilité est fonction puissance de l'endommagement. Dans la phase localisée, l'écoulement est darcéen et la perméabilité est fonction puissance de l'ouverture de fissure. Entre ces deux comportements, le problème reste ouvert et de nouvelles expériences doivent être mises en œuvre à l'échelle de la microstructure pour mettre en évidence les paramètres déterminants afin d'améliorer les modèles existants. De plus, si l'on étudie plus finement le problème, même ces deux bornes asymptotiques présentent leurs limites. En effet, en phase diffuse, le problème est en fait plus complexe. Avant l'apparition d'une macrofissure, la réponse mécanique est contrôlée par la densité de microfissures. Cependant, la perméation, elle, n'est pas directement contrôlée par la densité de microfissures mais plutôt par le réseau connecté de pores. L'évolution de ce réseau est bien sûr en lien avec la microfissuration mais le paramètre dominant reste la connectivité du réseau et son évolution. Enfin, dans les macropores ou dans les microfissures de petites tailles, si le libre parcours moyen des molécules de fluides est suffisamment proche de l'espace inter-parois, l'écoulement est alors influencé par les collisions entre les particules de fluide et ces parois. Ainsi l'écoulement ne satisfait plus au régime visqueux de Poiseuille simple mais on observe un glissement sur les parois (effet de Klinkenberg) dû aux chocs particules/parois. Ce glissement se traduit par une dépendance de la perméabilité à la pression du fluide considéré. Dans les micropores, l'effet de ces collisions devient prédominant, le fluide ne peut plus être considéré comme un milieu continu et l'écoulement rentre dans le régime de la diffusion libre moléculaire ou diffusion de Knudsen.

Enfin, les interactions entre les particules de fluide et les parois des pores se traduisent également dans les micro et mésopores par le phénomène d'adsorption. L'adsorption est un phénomène qui se produit à toute interface solide-fluide et se traduit par une augmentation de la concentration du fluide au voisinage du solide. Les particules de fluide suffisamment proche du solide se lient à ce dernier : elles s'adsorbent. On distingue adsorption chimique et physique. La chimisorption est irréversible, elle met en jeu des réactions chimiques et nécessite une énergie d'activation à haute température. La physisorption est réversible car elle ne met en jeu que des forces d'interaction électriques de faible intensité de type Van der Waals. C'est la physisorption qui est utilisée pour la caractérisation de milieu poreux en porosimétrie par isotherme d'adsorption. Par la suite, on ne s'intéressera pas au phénomène de chimisorption et le terme « adsorption » signifiera « physisorption ». L'adsorption se traduit par des profils de densité de fluide inhomogènes au sein du pore du fait des interactions fluide-solide sur les parois du pore. A l'interface, la densité est supérieure à la densité bulk observée à l'extérieur du milieu ou au centre du pore. Si le diamètre du pore diminue, les interactions augmentent, des effets de confinement sont observés et la densité au centre du pore n'est plus égale à la densité bulk à l'extérieur du milieu. La pression de pore est alors bien supérieure à la pression bulk et cela se traduit en pratique par un gonflement de la matrice poreuse. Du fait du gonflement de la matrice, la porosité évolue tout comme les conditions de confinement. Si le couplage adsorption/gonflement a été étudié expérimentalement depuis de nombreuses années, sa prise en compte et son intégration dans les modèles poromécaniques est au cœur des problématiques de la communauté ces dernières années.

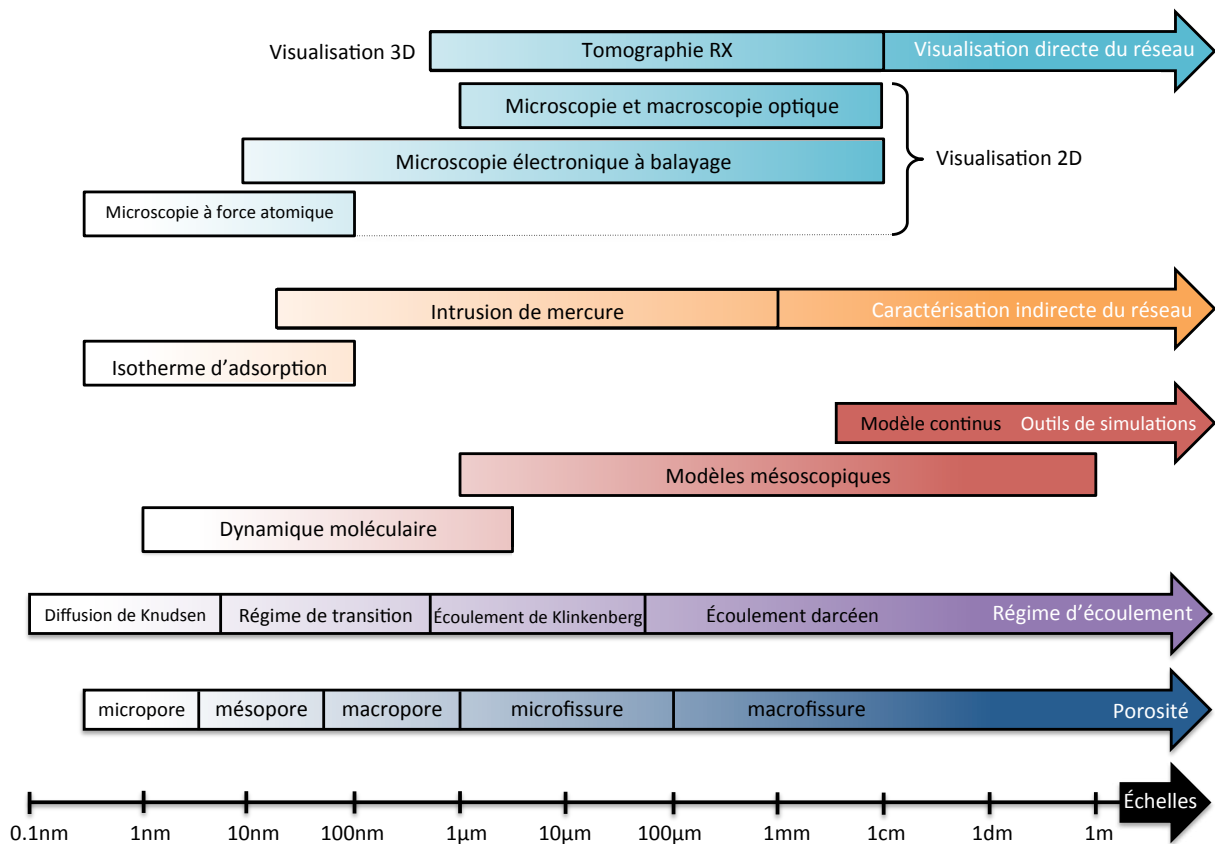


FIGURE 1.1 – Les différentes échelles mises en jeu dans les milieux poreux faiblement perméables.

La Figure 1.1 résume les différentes échelles mises en jeu dans les milieux poreux faiblement perméables. En plus des différentes porosités et échelles d'écoulement, on a représenté les champs d'application de quelques outils de simulation numérique et de caractérisation expérimentale pertinents pour l'étude de milieux poreux peu perméable. Dans ce mémoire seront discutés principalement des résultats de simulations numériques basées sur des modèles macroscopiques continus (type éléments-finis) ou mésoscopique (type lattice) mais les simulations à la petite échelle, en dynamique moléculaire par exemple, sont maintenant largement employées pour caractériser les couplages ayant lieu au sein des pores nanométriques. Dans cette étude, la géométrie du réseau poreux est principalement caractérisée de façon indirecte en terme de distribution de taille de pores et de surface spécifique par porosimétrie par isotherme d'adsorption ou intrusion de mercure. Ces techniques présentent l'avantage de balayer toutes les échelles de porosité mais ce ne sont pas des techniques de visualisation directe, dans le sens où des modèles sont nécessaires pour identifier les caractéristiques du réseau. Parmi les outils de visualisation directe, les outils de microscopie ont l'avantage de balayer toutes les échelles de porosité et de fournir des informations sur la topologie réelle du réseau mais elles ne donnent que des informations en surface et nécessitent souvent des protocoles de préparation qui se révèlent très intrusifs, voire destructifs, pour le réseau. Par ailleurs, les outils de tomographie RX ont l'avantage de fournir des informations directes et tridimensionnelles sur le réseau et sa topologie, sans protocole de préparation particulièrement intrusif, mais leur résolution est encore limitée à des tailles de pores de 0.7 microns maximum et donc seule les grands macropores et les microfissures peuvent être étudiés dans ce cadre.

Le plan du document est le suivant :

- En partie 2, on s'évertuera à mieux caractériser la phase solide en tant que telle et à proposer de nouveaux modèles permettant de décrire la rupture et l'endommagement de milieux quasi-fragiles adoucissants. En effet, pour arriver à une description pertinente du couplage fissuration/perméation, il est au préalable nécessaire d'améliorer la description de l'évolution à la rupture de la phase solide seule. Cette phase solide seule peut être considérée comme un matériau quasi-fragile hétérogène et donc, après le domaine élastique, sa réponse mécanique est caractérisée par une partie adoucissante non-linéaire et irréversible. Elle se traduit par une dégradation des propriétés élastiques et une faible déformation permanente. Cette dégradation est due à l'initiation et au développement de microfissures, dès la phase pré-pic, qui coalescent jusqu'à former une macrofissure qui propage, entraînant la ruine de la structure. Le siège de ces microfissures est appelé zone d'élaboration (FPZ). Une fois la macrofissure constituée, la FPZ se localise en pointe de fissure où la dégradation continue à évoluer.
Des études numériques et expérimentales sont ainsi menées pour caractériser l'évolution de cette FPZ lors de la fissuration. Des expériences de flexion 3 points ont été menées pour étudier les effets d'échelle et les effets de bords lors de la rupture d'éprouvettes homothétiques entaillées et non-entaillées. En parallèle, des modèles meso et macroscopiques sont proposés pour prédire l'endommagement et la rupture et reproduire les résultats obtenus expérimentalement. En particulier, une nouvelle formulation non-locale macroscopique (de type intégrale) est proposée où la fonction poids n'est plus explicitement introduites mais déduites des interactions non-locales intrinsèques évoluant au sein de la structure. A la meso-échelle, l'évolution de la FPZ est étudiée à l'aide de fonctions de Ripley utilisées traditionnellement en écologie spatiale. Les résultats numériques sont comparés à des résultats expérimentaux où les lieux d'endommagement sont localisés par émissions acoustiques.
- En partie 3, on cherchera à faire le lien entre les propriétés de transport (perméabilités apparente et intrinsèque), la distribution de taille de pore et leurs évolutions lors du chargement, de l'endommagement et de la rupture de milieux mésoporeux. L'évolution de la microstructure d'éprouvettes de mortier et de roches "Tight" soumises à un chargement statique ou dynamique est étudiée à l'aide de porosimétrie par intrusion de mercure (MIP). Un nouveau modèle d'assemblage aléatoire de pores est ensuite proposé. Le réseau poral, fictif et hiérarchique, est reconstruit de manière aléatoire à partir des distributions de taille de pore (PSD) mesurées expérimentalement par MIP. Au sein de ce réseau, les lois d'écoulements de Poiseuille et de Knudsen sont transférées de la petite échelle du pore à l'échelle de l'échantillon pour estimer les perméabilités apparente et intrinsèque du milieu. Des mesures expérimentales de perméabilité à des gaz purs (N₂, He, CH₄) sont réalisées et ces comparaisons expérimentales montrent que le modèle est capable de prédire non seulement la perméabilité intrinsèque du milieu mais également sa perméabilité apparente et leurs évolutions sous chargement dès lors que la PSD est caractérisée. Le modèle ainsi que le banc d'essai expérimental ont été étendu afin d'étudier l'écoulement de mélange de gaz. Une sélectivité naturelle du milieu poreux due à la contribution de Knudsen à l'écoulement est mise en évidence par le modèle et confirmée expérimentalement.
- En partie 4, on cherchera à préciser les couplages entre adsorption et gonflement dans les milieux microporeux. En poromécanique classique, une augmentation de la pression ambiante devrait amener le squelette poreux à se contracter. Pour des milieux microporeux, le confinement de la phase adsorbée dans les micropores (de l'ordre du nanomètre) a pour conséquence une déforma-

tion volumique de gonflement de la phase solide. Un nouveau cadre poromécanique est étudié pour relier l'incrément de gonflement à un incrément de pression ambiante, au confinement du pore et à la porosité. Le confinement est déduit de mesures expérimentales d'isothermes d'adsorption. A chaque pas de chargement, les propriétés poromécaniques sont mises à jour pour tenir compte des variations de porosité dues au gonflement de la matrice solide. Les gonflements prédits sont comparés à des résultats expérimentaux de la littérature et un nouveau banc d'essai est développé pour permettre la mesure simultanée et in-situ des quantités adsorbées par technique manométrique et du champ de déplacement induit par corrélation d'images numériques. Enfin l'influence d'un endommagement dynamique de type choc électrique sur les capacités d'adsorption est étudié dans le cadre de l'estimation de ressources pétrolières.

Chapitre 2

Rupture et endommagement des milieux quasi-fragiles

Sommaire

2.1	Introduction	8
2.1.1	Cadre de travail	8
2.1.2	Contexte	8
2.1.3	Verrous scientifiques	8
2.1.4	Bilan des actions de recherche réalisées	9
2.2	Constitution d'une base de données expérimentales pour la validation de modèles	11
2.2.1	Description des essais	11
2.2.2	Analyse des effets d'échelle	15
2.3	Études à l'échelle mésoscopique	17
2.3.1	Présentation du modèle numérique	17
2.3.2	Représentativité du processus global de fissuration	19
2.3.3	Représentativité du processus local de fissuration	21
2.3.4	Analyse des corrélations induites lors de la rupture quasi-fragile	31
2.4	Transfert d'échelles et étude des interactions à l'échelle macroscopique	39
2.4.1	Interactions non-locales et fonctions poids	40
2.4.2	Formulation finale	45
2.4.3	Application à l'étude de la rupture dynamique d'une barre en traction	45
2.4.4	Application à l'étude de l'écaillage	47
2.5	Conclusion	49
2.6	Bibliographie du chapitre	50

2.1 Introduction

2.1.1 Cadre de travail

Les travaux sur ce thème ont été effectués principalement en collaboration avec Laura Rojas-Solano dans le cadre de sa thèse de doctorat (Rojas-Solano, 2012)¹ financée par le projet ERC Failflow². Les travaux sur l'analyse par fonction de Ripley du processus de fissuration sont en cours de réalisation avec Vincent Lefort dans le cadre de sa thèse de doctorat. Les travaux concernant la modélisation à l'échelle mésoscopique ont été initiés en collaboration avec Peter Grassl³ lors de séjours en tant que Professeur invité au sein de notre laboratoire et sont poursuivis dans le cadre de la thèse de Vincent Lefort. Les observations et analyses effectuées ainsi que les méthodes développées autour de ce thème ont été réalisées sur le béton, considéré comme un matériau quasi-fragile artificiel modèle. Cependant la même méthodologie pourrait s'appliquer à des roches naturelles dans un contexte géomécanique.

2.1.2 Contexte

Dans cette partie, on vise à préciser le comportement mécanique à la rupture de la phase solide du matériau poreux peu perméable considéré. En effet pour arriver à une description pertinente du couplage fissuration/perméation, il est au préalable nécessaire d'améliorer la description de l'évolution à la rupture de la phase solide seule. Cette phase solide seule peut être considérée comme un matériau quasi-fragile hétérogène et donc, après le domaine élastique, sa réponse mécanique est caractérisée par une partie adoucissante non-linéaire et irréversible. Elle se traduit par une dégradation des propriétés élastiques et une faible déformation permanente. Cette dégradation est due à l'initiation et au développement de microfissures, dès la phase pré-pic, qui coalescent jusqu'à former une macrofissure qui propage, entraînant la ruine de la structure. Le siège de ces microfissures est appelé zone d'élaboration (FPZ). Une fois la macrofissure constituée, la FPZ se localise en pointe de fissure où la dégradation continue à évoluer.

2.1.3 Verrous scientifiques

La caractérisation (taille, évolution) de la zone d'élaboration est au cœur des problématiques actuelles en mécanique de la rupture et de l'endommagement des matériaux quasi-fragiles :

- Numériquement, l'évolution de la FPZ, source de la réponse adoucissante du matériau, se traduit par une localisation des déformations et une forte dépendance aux maillages. Pour pallier à ces problèmes, des techniques de régularisation ont été mises au point afin d'enrichir la description mécanique du milieu pour décrire la rupture. Les techniques non-locales introduisent une longueur interne dans le modèle continu en lien avec la FPZ afin de tenir compte de l'état des points voisins lors de l'estimation des grandeurs mécaniques en un point donné. Parmi ces techniques, on peut distinguer les modèles non-locaux intégraux (Pijaudier-Cabot and Bazant, 1987) et les formulations en gradient (Peerlings et al., 1996) dont Peerlings (2001) a montré la stricte équivalence.
- De plus, le rapport taille de la FPZ / taille de la structure est à l'origine des effets d'échelle qui se traduisent par une diminution de la résistance apparente de la structure avec l'augmentation de sa taille. Cela est critique en ingénierie civile car les propriétés mécaniques des structures de

1. Consulter en ligne

2. Les différents projets et contrats de recherche sont détaillés en partie A.5.2.

3. Université de Glasgow, UK.

Génie Civil de grandes tailles sont identifiées en laboratoire sur des éprouvettes de tailles nettement inférieures. Les théories prédictives mettant en jeu ces effets d'échelle divisent encore la communauté mais les essais expérimentaux mettant en jeu ces effets d'échelle sont un bon outil de validation de modèle tant la reproduction et surtout la prédiction des réponses mécaniques complètes d'éprouvettes de tailles et géométries différentes restent un challenge numérique.

- Par ailleurs, l'influence d'un bord sur la formation de la FPZ reste une question très ouverte. En effet l'initiation et le développement des microfissures à partir d'un bord libre est très différente de cette même initiation à partir d'une pré-fissure. Enfin au cours de la propagation, une fissure se comporte elle-même comme un bord libre évolutif mais dont les lèvres sont endommagées.

Si les modèles non-locaux ont montré leur efficacité pour régulariser le problème de la rupture des matériaux quasi-fragiles, plusieurs limitations et verrous scientifiques ont été relevés :

- On observe une localisation de l'initiation de la fissure incorrecte, en avant du front (Simone et al., 2004).
- L'opération de moyenne non-locale se traduit en pratique par des propagations non physiques des fronts d'endommagement (Pijaudier-Cabot et al., 2010; Grégoire et al., 2012).
- L'effet d'écran attendu au travers d'une zone endommagée n'est pas respecté et deux points séparés par une fissure ont toujours une influence l'un par rapport à l'autre (Pijaudier-Cabot et al., 2010; Grégoire et al., 2012).
- En dynamique, lors de la simulation d'essais d'écaillage, il est difficile de capturer proprement la position de l'écaille si celle-ci doit se détacher à proximité immédiate du bord (Pijaudier-Cabot et al., 2010; Grégoire et al., 2012).
- Il est très difficile de prédire la réponse complète (pic et adoucissement) d'une éprouvette de taille donnée en ayant au préalable identifié les paramètres du modèle sur une autre taille et cela se révèle impossible lorsque l'on change en plus la géométrie (traction/flexion 3 points ou éprouvettes entaillées/éprouvettes non-entaillées) (Krayani et al., 2009; Grégoire et al., 2013).

Différents auteurs (Grégoire et al., 2012; Pijaudier-Cabot et al., 2010; Krayani et al., 2009; Bažant et al., 2010; Giry et al., 2011) ont proposés des formulations non-locales modifiées afin de lever certaines de ces limitations, notamment en faisant varier la longueur interne présente dans le modèle en fonction de l'état d'endommagement ou de la présence d'un bord libre. Cependant si certaines solutions proposées donnent satisfaction sur des cas tests académiques unidimensionnels, leurs extensions à des problèmes 2D ou 3D est difficile, voir impossible. Par ailleurs, même avec une longueur interne variable, le choix de la fonction poids à intégrer dans un modèle non-local intégral reste très empirique. Enfin, il n'existe pas de base de données expérimentales présentant la réponse complète (pic et adoucissement) d'éprouvettes entaillées et non-entaillées, de tailles différentes permettant une confrontation réelle de nouveaux modèles.

2.1.4 Bilan des actions de recherche réalisées

- Sur des cas tests académiques unidimensionnels, on a montré plusieurs limitations des modèles intégraux classiques (propagations non physiques des fronts d'endommagement, effet d'écran non respecté, capture difficile du phénomène d'écaillage) ainsi que la nécessité pour ces modèles de tenir compte d'une longueur interne variable au cours de la fissuration. Cette action est détaillée dans (Grégoire et al., 2012, **consulter en ligne**).

- Une base de données expérimentales inédites a été construite mettant en lumière, pour un même matériau, les réponses complètes force/ouverture d'entaille obtenues sur des éprouvettes homothétiques (4 tailles) de béton, entaillées et non entaillées, et sollicitées en flexion 3 points. Le but principal de la construction de cette base de donnée est de fournir des éléments de validation de la performance de modèles numériques, notamment en ce qui concerne la reproduction de la phase adoucissante post-pic.
Cette action est détaillée en partie 2.2.1 et dans (Grégoire et al., 2013, **consulter en ligne**).

- Même si le challenge numérique consiste plutôt à reproduire ces essais en terme de courbes complètes de rupture (pic et adoucissement), les résultats expérimentaux ont également été exploités en terme de lois d'effet d'échelle mettant en jeu uniquement les résistances aux pics pour différentes tailles et géométries. Les effets d'échelle sont étudiés de longues dates par les mécaniciens. Différentes théories ont été proposées dans la littérature (e.g. the energetic-statistical theory par Bazant and Kim (1984), the fractal theory par Carpinteri (1994) et the Weibull-statistical theory par van Vliet (2000)) et il n'y a toujours pas de consensus sur la question. La base de donnée construite peut permettre la validation de telles lois. Pour illustrer la démarche, on a comparé les résultats expérimentaux, en terme de résistance aux pics, et la loi universelle de Bazant and Yu (2009). Cette loi d'effet d'échelle permet un fit de bonne qualité des résultats expérimentaux obtenus sur les 4 tailles et les 3 géométries simultanément (entaillée à la moitié, au cinquième et non-entaillée).
Cette action est détaillée en partie 2.2.2 et dans (Grégoire et al., 2013, **consulter en ligne**).

- Les limites connues des modèles non-locaux intégraux classiques ont été illustrées par reproduction des essais expérimentaux. Dans la littérature, les paramètres d'un tel modèle sont calés en identifiant sa réponse sur trois courbes expérimentales d'éprouvettes homothétiques correspondantes à trois tailles différentes et une même géométrie d'entaille. Une fois les paramètres du modèle calés sur une géométrie, on a montré qu'il n'est pas possible de prédire correctement la réponse expérimentale des éprouvettes présentant une géométrie d'entaille différente. Cela avait déjà été montré à partir de résultats purement numérique par Krayani et al. (2009).
Cette action est détaillée dans (Grégoire et al., 2013, **consulter en ligne**).

- Des résultats numériques obtenus à l'aide d'un modèle mésoscopique basé sur un assemblage de type lattice ont montré que ce modèle est capable de prédire la rupture et l'endommagement du béton quelque soit la taille des éprouvettes et la géométrie initiale de l'entaille, même pour les éprouvettes non-entaillées. Ces bons résultats sont dus au fait que les interactions non-locales sont intrinsèquement incluses dans le modèle mésoscopique au travers de la mésostructure du matériau (granulats).
Cette action est détaillée en parties 2.3.1 et 2.3.2 et dans (Grassl et al., 2012, **consulter en ligne**).

- Le processus local de fissuration a été étudié à l'aide du même modèle mésoscopique afin d'identifier les longueurs de corrélation entre lieux d'endommagements successifs pour caractériser l'évolution de la FPZ et une bonne concordance a été observée lors de comparaisons avec des résultats expérimentaux mettant en jeu une localisation de l'endommagement par émissions acoustiques. On a notamment comparé des cartes d'énergie dissipée. On a également construit des histogrammes de distances relatives entre point endommagés à partir des résultats à l'échelle mésoscopique et comparé avec les résultats d'émissions acoustiques. Tous ces résultats ont montré

que le modèle mésoscopique est un bon outil pour représenter le processus local de fissuration. Cette action est détaillée en partie 2.3.3 et dans (Grégoire et al., 2014b).

- Cependant, du fait du gradient de déformation le long du ligament, il est difficile d'identifier des longueurs de corrélation à partir de ces histogrammes permettant de quantifier l'évolution de la FPZ au cours du processus de fissuration. On a donc proposé une méthode alternative consistant à s'appuyer sur les fonctions de Ripley (Ripley, 1977) qui sont des méthodes d'analyse statistique de voisinage de second ordre qui considèrent toutes les distances entre les points d'une distribution pour caractériser son caractère aléatoire.

Cette action est détaillée en partie 2.3.4 et dans (Grégoire et al., 2014a, **consulter en ligne**).

- A partir de ces différentes observations, un nouveau modèle non-local intégral macroscopique prenant également en compte de façon intrinsèque les interactions non-locales a été développé. A partir d'un modèle non-local intégral classique, on a modifié la fonction poids pour tenir compte des interactions non-locales intrinsèques et leurs évolutions au cours de la fissuration. Ce modèle a été validé sur des cas tests académiques unidimensionnels.

Cette action est détaillée en partie 2.4 et dans (Rojas-Solano et al., 2013, **consulter en ligne**).

2.2 Constitution d'une base de données expérimentales pour la validation de modèles

2.2.1 Description des essais

Une base de données expérimentales a été collectée mettant en jeu des essais de flexion 3 points sur des éprouvettes entaillées et non-entaillées et homothétiques. Le tableau 2.1 et la figure 2.1 présentent respectivement la formulation⁴ et la granulométrie du béton étudié. Le tableau 2.2 résume les propriétés moyennes du béton utilisé obtenu en compression et fendage.

Concernant les essais de flexion 3 points, quatre tailles d'éprouvettes ont été testées. Les éprouvettes sont similaires et homothétiques, elles ont une hauteur qui varie de 50mm à 400mm, pour un rapport portée/hauteur constant égal à 2.5. L'épaisseur des éprouvettes est maintenue constante égale à 50mm. Afin de mettre en évidence des effets de bord lors de l'initiation, trois types de pré-entaillées moulées ont été considérés. Les éprouvettes sont soit non entaillées, soit entaillées sur la moitié de la hauteur, soit entaillées au cinquième de la hauteur. L'épaisseur de la pré-entaille est gardée constante égale à 2mm. La figure 2.2 présente la géométrie des éprouvettes testées. En tout 34 essais ont été mis en oeuvre. Les essais de flexion 3 points sont pilotés en ouverture d'entaille (CMOD) pour assurer la stabilité post-pic à l'aide d'une presse servo-hydraulique (Zwick/Roell HB250). Pour les éprouvettes non-entaillées, la mesure du "CMOD" est décalée à l'aide de plaques d'aluminium pour assurer une initiation de la fissure entre les plaques (figure 2.3). En plus de l'ouverture d'entaille appliquée et de la force résultante, la flèche est mesurée à l'aide d'un capteur laser permettant de s'affranchir de la déformation induite au niveau des supports. Une description complète du banc d'essai, des grandeurs mécaniques mesurées et de leurs incertitudes sont présentées dans (Grégoire et al., 2013). La figure 2.4 présente le montage expérimental en flexion 3 points utilisé et la figure 2.5 présente les résultats moyennés en terme de Force/CMOD. Pour chaque géométrie la résistance apparente diminue au fur et mesure que la taille augmente.

4. Formulation obtenue auprès d'Unibéton correspondante à un béton prêt à l'emploi pour dalle de béton

TABLE 2.1 – Formulation du béton étudié

Product	Designation	Mass (kg)
Sand	Cemex 0/4	740
Aggregates	Durruty 4/10	1140
Cement	Calcia CEM II/A	286
Admixture	Axim Cimplast 115	1
Water	Clarified water	179
Total		2346

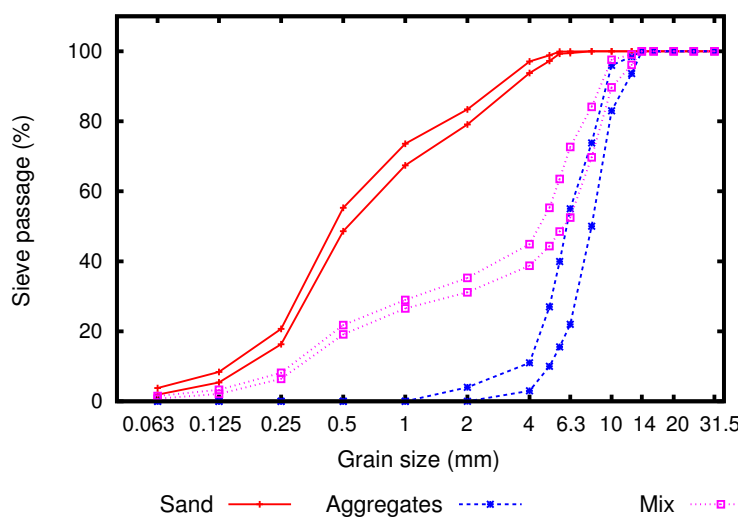


FIGURE 2.1 – Granulométrie du béton étudié.

TABLE 2.2 – Propriétés mécaniques moyennes du béton utilisé

Compressive strength			Young modulus			Poisson ratio			Splitting tensile strength		
μ	σ	c_v	μ	σ	c_v	μ	σ	c_v	μ	σ	c_v
(MPa)	(MPa)	(%)	(GPa)	(GPa)	(%)	(-)	(-)	(%)	(MPa)	(MPa)	(%)
42.3	2.8	6.6	37.0	0.9	2.4	0.21	0.02	8.7	3.9	0.2	6.0
(μ – mean value ; σ – standard deviation ; $c_v = \mu/\sigma$ – coefficient of variation)											

2.2. Constitution d'une base de données expérimentales pour la validation de modèles

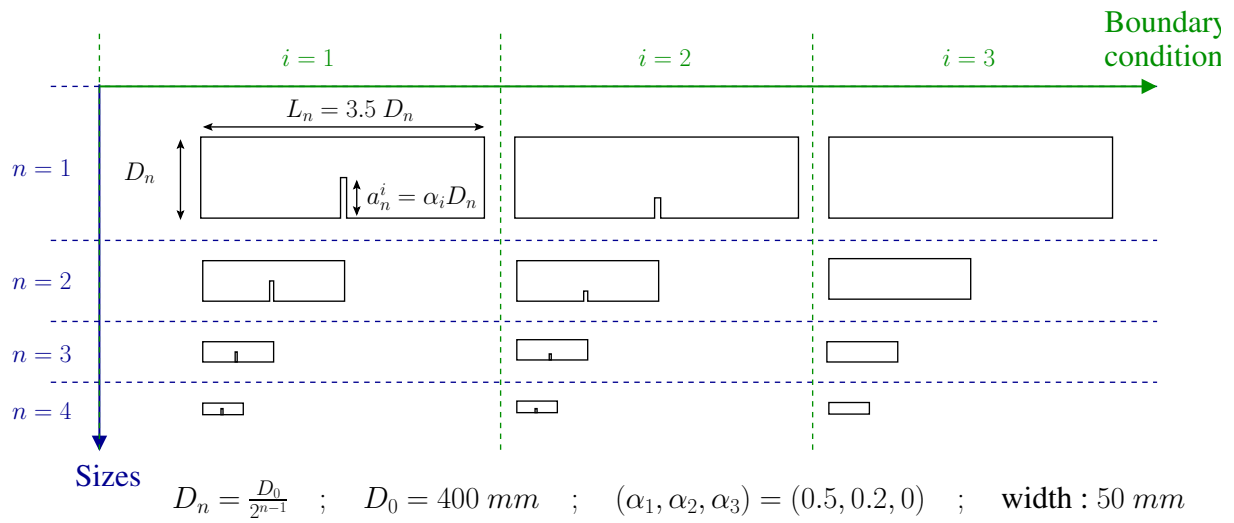


FIGURE 2.2 – Géométrie des éprouvettes testées en flexion 3 points.

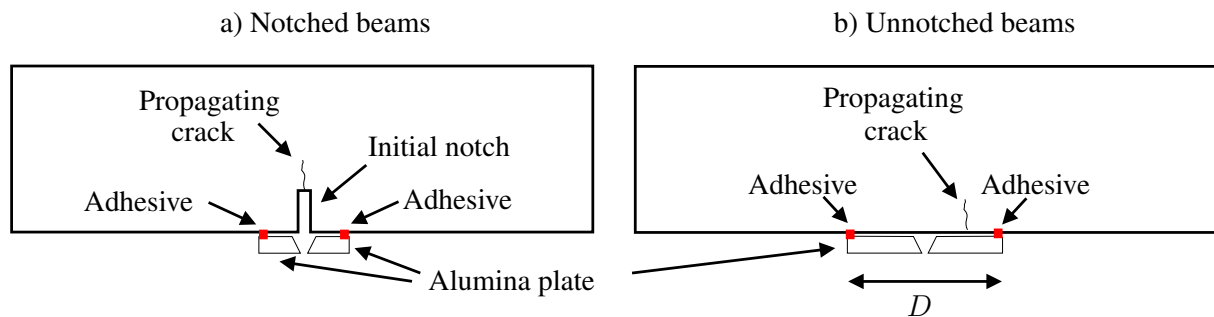


FIGURE 2.3 – Mesure du CMOD pour des éprouvettes entaillées (a) et non-entaillées (b).

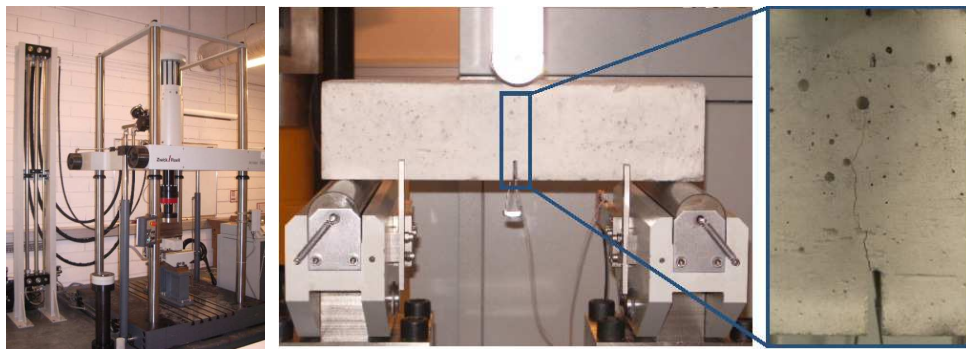


FIGURE 2.4 – Montage expérimental en flexion 3 points.

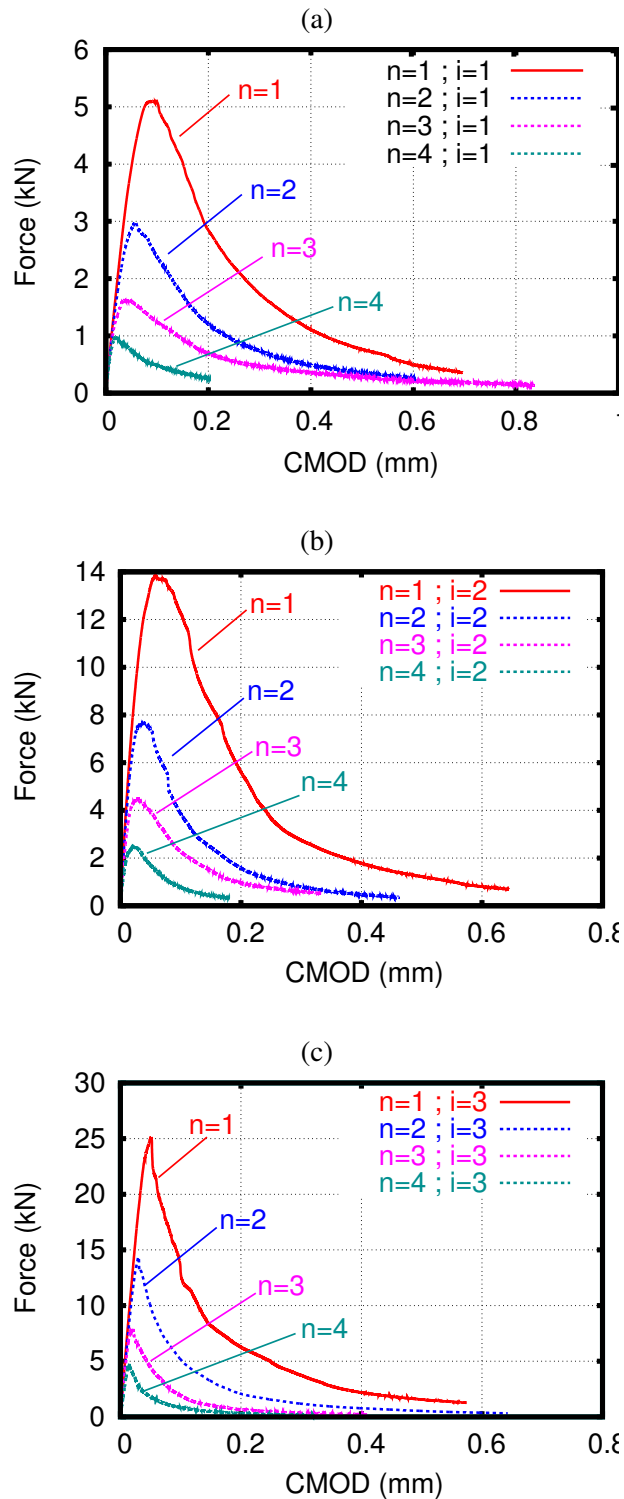


FIGURE 2.5 – Réponses expérimentales moyennes en Force / ouverture d'entaille : (a) éprouvettes entaillées sur la moitié de la hauteur ; (b) au cinquième de la hauteur ; (c) éprouvettes non-entaillées

2.2.2 Analyse des effets d'échelle

Même si le challenge numérique consiste plutôt à reproduire ces essais en terme de courbes complètes de rupture (pic et adoucissement), les résultats expérimentaux peuvent également être exploités en terme de lois d'effet d'échelle mettant en jeu uniquement les résistances aux pics pour différentes tailles et géométries. Les effets d'échelle sont étudiés de longues dates par les mécaniciens. Différentes théories ont été proposées dans la littérature (the energetic-statistical theory Bazant and Kim, 1984, the fractal theory Carpinteri, 1994 and the Weibull-statistical theory van Vliet and van Mier, 2000) et il n'y a toujours pas de consensus sur la question. La base de donnée construite peut permettre la validation de telles lois. Pour illustrer la démarche, la figure 2.6 présente la comparaison entre résultats expérimentaux, en terme de résistance aux pics, et la loi universelle de (Bažant and Yu, 2009) (équation 2.1a). Les paramètres identifiés à partir des essais sont collectés dans le tableau 2.3. Les paramètres obtenus sont cohérents avec les grandeurs identifiées directement à partir des essais ($G_f \approx 45$ N/m, $f_t \approx 3.9$ MPa). La figure 2.6 montre que la loi d'effet d'échelle permet un fit de bonne qualité des résultats expérimentaux obtenus sur les 4 tailles et les 3 géométries simultanément. Une telle comparaison avec des résultats expérimentaux obtenus sur des éprouvettes entaillées et non entaillées mais faites du même matériau n'était pas présente jusqu'ici dans la littérature.

$$\sigma_N(D, \alpha_0) = \left[\frac{E' G_f}{g'_0(\alpha_0) c_f + g_0(\alpha_0) D} \right]^{1/2} \left[1 - \frac{r c_f^2 g_0'' e^{-k \alpha_0^2}}{4(l_p + D)(g_0(\alpha_0) D + g'_0(\alpha_0) c_f)} \right]^{1/r} \quad (2.1a)$$

with

$$\sigma_N = \frac{3}{2} \frac{PS}{bD^2} = \frac{15}{4} \frac{P}{bD} \quad (2.1b)$$

and

$$g(\alpha_0) = \pi \alpha_0 c_N^2 (F(\alpha_0))^2; \quad \alpha_0 = \frac{a_0}{D}; \quad c_N = \frac{3S}{2D}; \quad E' = \frac{E}{1 - \nu^2} \quad (2.1c)$$

where

$$F(x) = \sqrt{\frac{1}{\pi}} \left(\frac{p_\infty(x) + \frac{4D}{S} [p_4(x) - p_\infty(x)]}{(1+2x)(1-x)^{1.5}} \right) \quad (2.1d)$$

with $p_\infty(x) = 1.989 - x(1-x)(0.448 - 0.458(1-x) + 1.226(1-x)^2)$
and $p_4(x) = 1.9 - x(-0.089 + 0.603(1-x) - 0.441(1-x)^2 + 1.223(1-x)^3)$
(from Bazant and Planas, 1998 following Pastor et al., 1995)

σ_N is the maximum elastic stress in an unnotched beam, P is the mid-span load, (S, b, D) are the span, the width and the depth of the beam respectively, (E, ν) are the Young's Modulus and the Poisson's ratio of the material, (G_f, c_f) are the fracture energy and the effective fracture process zone length (see Ref. Bazant and Planas, 1998 for details), (g, F) are geometric shape functions depending on the notch to depth ratio α_0 , c_N is the span to depth ratio, (r, k) are parameters and l_p is a characteristic material length (see Ref. Bažant and Yu, 2009 for details).

TABLE 2.3 – Identification des paramètres de la loi universelle de Bazant.

G_f	c_f	r	k	l_p	f_t
(N/m)	mm	(-)	(-)	(mm)	(MPa)
42.6	25.7	0.11	113	12.9	4.34

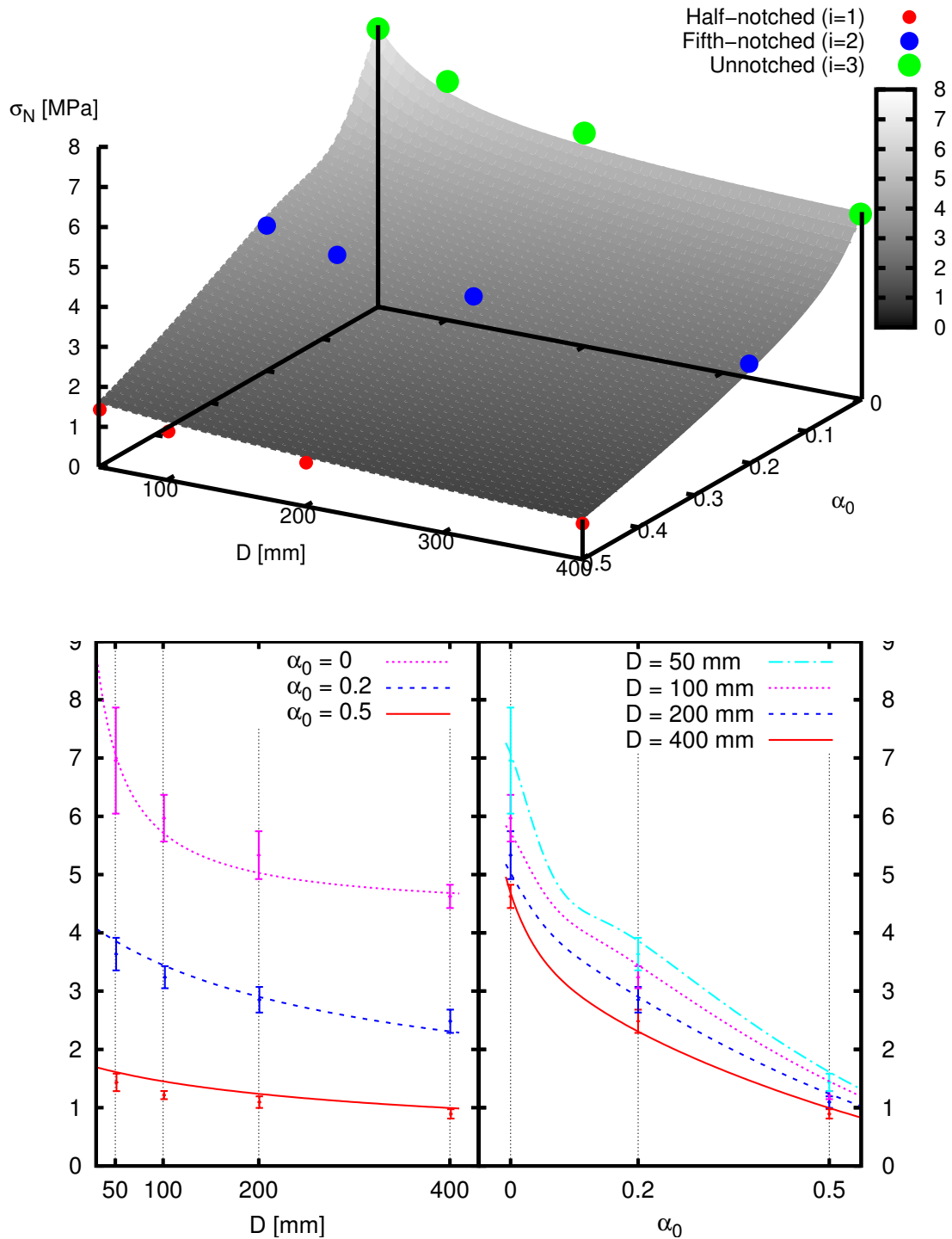


FIGURE 2.6 – Comparaisons entre les résultats expérimentaux et la loi universelle de Bazant

2.3 Études à l'échelle mésoscopique

2.3.1 Présentation du modèle numérique

Dans la description mésoscopique, le béton est représenté comme un composite constitué de granulats, de mortier et d'une interface de transition. Le modèle présenté ici a été initialement développé par (Grassl and Jirásek, 2010). La structure est discrétisée à l'aide de poutres formant un réseau lattice (figure 2.7). Seuls les granulats les plus gros sont considérés conformément à la granulométrie expérimentale (figure 2.1). La position des granulats est déterminée de façon aléatoire et un champ aléatoire auto-corrélé rend compte des propriétés homogénéisées du mortier comportant les plus petits agrégats. Le comportement des agrégats est linéaire élastique isotrope et ils sont plus rigides que la matrice mortier qui est elle-même plus rigide que l'interface endommageable où se développe la microfissuration.

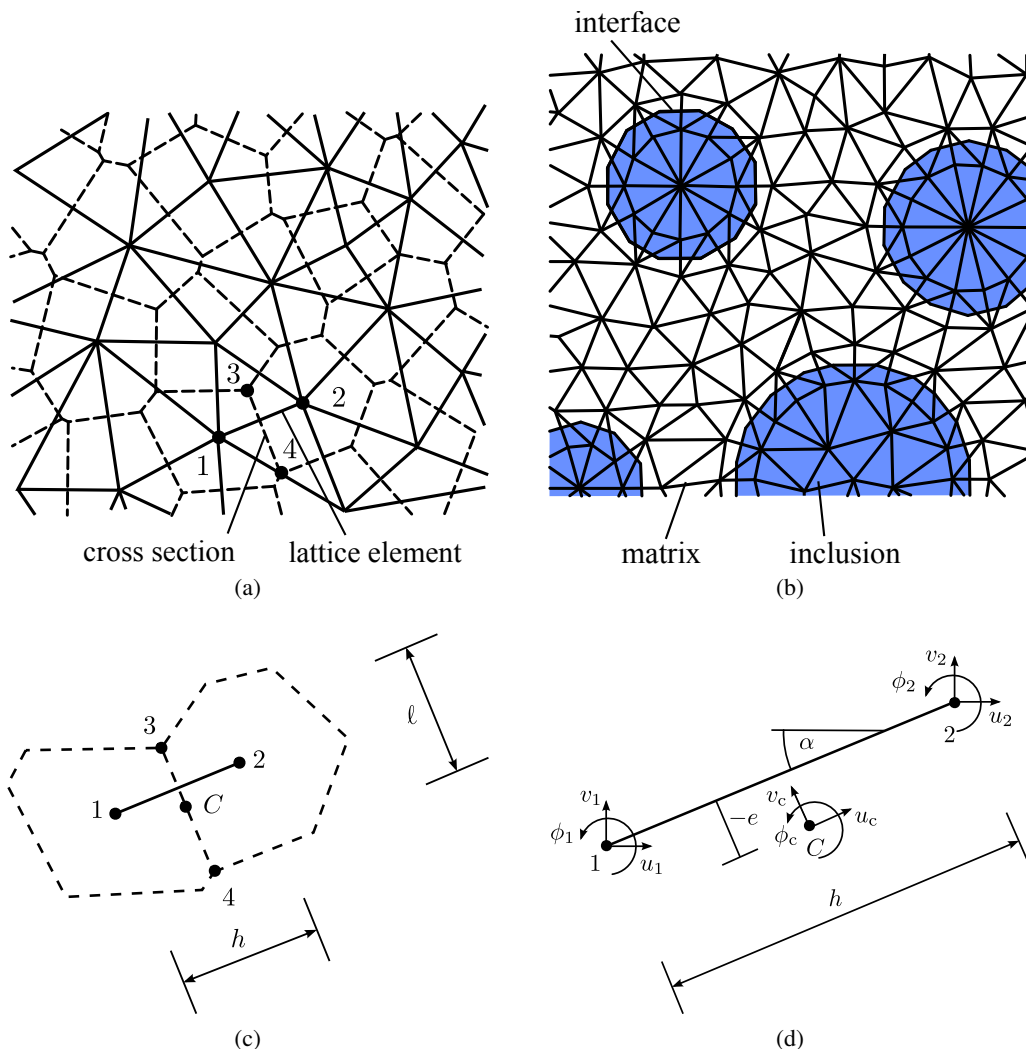


FIGURE 2.7 – Maillage lattice typique (a) ; arrangement autour des granulats (b) ; élément lattice (c) ; degrés de liberté (d).

Une fois que le plus gros agrégat a été placé aléatoirement dans la structure, la matrice de mortier est maillée en plaçant des noeuds aléatoirement dans le domaine en respectant une distance minimum donnée. Les éléments lattice résultent d'une triangulation de Delaunay (lignes pleines à la figure 2.7.a) alors que les médiatrices de ces éléments représentent les cotés des polygones duaux de Voronoï (lignes pointillées à la figure 2.7.a). Les noeuds localisés des deux cotés d'une interface ne sont pas distribués de façon aléatoire mais placés de telle sorte que les polygones de Voronoï définissent l'interface entre les agrégats et le mortier (figure 2.7.b).

Chaque noeud a trois degrés de liberté : deux translations (u, v) and une rotation (ϕ) (figure 2.7.d). Dans le système de coordonnées global, les degrés de liberté des noeuds 1 et 2, notés u_e , sont reliés aux sauts de déplacement dans le système local de coordonnées du point C , u_c , par la relation :

$$u_c = \mathbf{B}u_e \quad (2.2)$$

$$u_e = (u_1, v_1, \phi_1, u_2, v_2, \phi_2)^T \quad (2.3)$$

$$u_c = (u_c, v_c, \phi_c)^T \quad (2.4)$$

Le point C étant défini comme le centre de la médiatrice de l'élément comme présenté aux figures figure 2.7.c et figure 2.7.d. La matrice \mathbf{B} dépend de l'orientation α de l'élément dans le système de coordonnées global, de la distance e entre le point C et le segment reliant les noeuds 1 et 3, de la distance h entre ces deux noeuds, de l'aire et du moment d'inertie associé à cet élément. Les déformations $\varepsilon = (\varepsilon_n, \varepsilon_s, \varepsilon_\phi)^T$ associées aux déplacements u_c du point C sont :

$$\varepsilon = \frac{u_c}{h} = (\varepsilon_n, \varepsilon_s, \varepsilon_\phi)^T \quad (2.5)$$

où h est la longueur de l'élément lattice. Les contraintes $\sigma = (\sigma_n, \sigma_s, \sigma_\phi)^T$ sont reliées aux déformations ε suivant la loi de comportement de l'élément, typiquement un modèle d'endommagement isotrope. Les indices n et s correspondent aux composantes normales et tangentielles.

Le même modèle d'endommagement isotrope (équation 2.6) est utilisé pour décrire la réponse mécanique des éléments de l'interface de transition ou de la matrice :

$$\sigma = (\sigma_n, \sigma_s, \sigma_\phi)^T = (1 - \omega)\mathbf{D}_e\varepsilon = (1 - \omega)\bar{\sigma} \quad (2.6)$$

où ω est la variable d'endommagement, \mathbf{D}_e est la raideur élastique de l'élément (évaluée en C) et $\bar{\sigma}$ est la contrainte effective. La déformation équivalente est ensuite estimée à l'aide de l'équation 2.7 où ε_0 , c et q sont des paramètres à déterminer.

$$\varepsilon_{eq} = \frac{1}{2}\varepsilon_0(1 - c) + \sqrt{\left(\frac{1}{2}\varepsilon_0(c - 1) + \varepsilon_n\right)^2 + \frac{c\gamma^2\varepsilon_s^2}{q}} \quad (2.7)$$

L'expression de la variable d'endommagement est déduite en considérant un cas de traction pure et une courbe d'adoucissement exponentielle :

$$\sigma_n = f_t \exp\left(-\frac{w_{cn}}{w_f}\right) \quad (2.8)$$

où $w_{cn} = \omega h \varepsilon_n$ est l'ouverture de fissure, w_f est la pente initiale de la courbe d'adoucissement qui est reliée à l'énergie de rupture au niveau du lattice par $G_f = f_t w_f$. La loi contrainte-déformation peut être réécrite, en traction pure, en introduisant la variable d'endommagement (équation 2.9).

$$\sigma_n = (1 - \omega)E\varepsilon_n \quad (2.9)$$

2.3. Études à l'échelle mésoscopique

Ainsi, on déduit des deux expressions précédentes la loi d'évolution de la variable d'endommagement ω :

$$(1 - \omega)\kappa = \varepsilon_0 \exp\left(-\frac{\omega h \kappa}{w_f}\right) \quad (2.10)$$

où les déformations normales ont été remplacées par κ , variable d'histoire déterminée par l'équation 2.11a avec les conditions de Kuhn-Tucker (équation 2.11b) :

$$f(\varepsilon, \kappa) = \varepsilon_{eq}(\varepsilon) - \kappa \quad (2.11a)$$

$$f \leq 0, \quad \dot{\kappa} \geq 0, \quad \dot{\kappa} f = 0 \quad (2.11b)$$

Les constantes élastiques et les paramètres du modèle sont identifiés en comparant la réponse numérique globale à des tests de caractérisation (compression et fendage) (tableau 2.4). Comme pour les essais expérimentaux, les analyses sont pilotées en ouverture d'entaille (CMOD) et pour chaque éprouvette expérimentale, 100 calculs sont effectués correspondant à 100 tirages aléatoires de positions de granulats et de paramètres homogénéisés du mortier.

TABLE 2.4 – Paramètres utilisés pour le calcul mésoscopique.

	E [GPa]	γ	f_t [MPa]	q	c	G_f [N/m]
Matrix	44	0.33	3.8	2	10	86
Interface	58.7	0.33	1.9	2	10	43
Aggregate	88	0.33				

2.3.2 Représentativité du processus global de fissuration

La validation de la bonne implémentation du code et l'indépendance au maillage ont été vérifiées précédemment à cette étude par Fahy et al. (2011).

Afin de tester la représentativité du processus global de fissuration à l'aide du modèle mésoscopique présenté à la partie précédente, les essais de flexion 3 points présentés à la partie 2.2.1 sont simulés numériquement. La figure 2.8 présente un schéma des éprouvettes simulées. Afin de limiter les coûts de calcul, le modèle mésoscopique n'est utilisé que dans les zones d'intérêt où se développe effectivement la fissuration.

La figure 2.9 présente les comparaisons expériences/modélisation mésoscopique en terme de réponse globale Force/CMOD pour les éprouvettes testées à la partie 2.2.1. Les barres d'erreurs correspondent à la variabilité sur les 100 tirages aléatoires réalisés. Cette figure montre que le modèle mésoscopique est capable de prédire la rupture et l'endommagement du béton quelque soit la taille et la géométrie initiale de l'entaille, même pour les éprouvettes non-entaillées. Le même jeu de paramètres a été utilisé pour simuler la réponse des 12 différentes éprouvettes. Ces bons résultats sont dus au fait que les interactions non-locales sont intrinsèquement incluses dans le modèle mésoscopique au travers de la mésostructure du matériau (granulats).

Dans les parties suivantes (2.3.3 et 2.3.4), on s'intéressera à la représentativité du processus local de fissuration à l'aide du même modèle mésoscopique. Dans la partie 2.4, on propose un nouveau modèle non-local intégral macroscopique prenant en compte de façon intrinsèque les interactions non-locales.

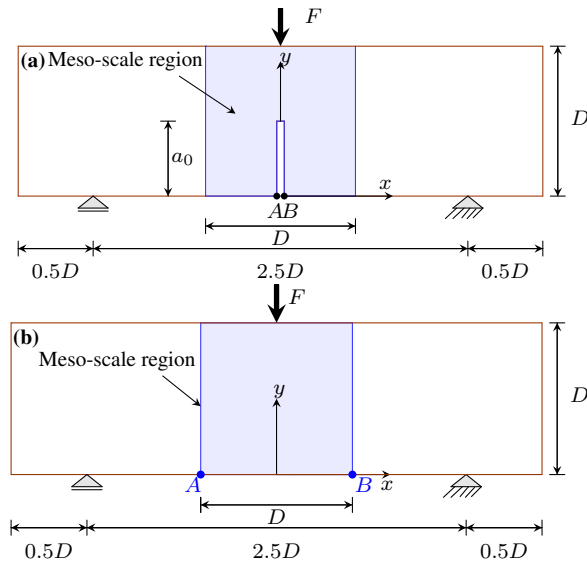


FIGURE 2.8 – Localisation des zones mésoscopiques pour éprouvette entaillée (a) ou non entaillée (b).

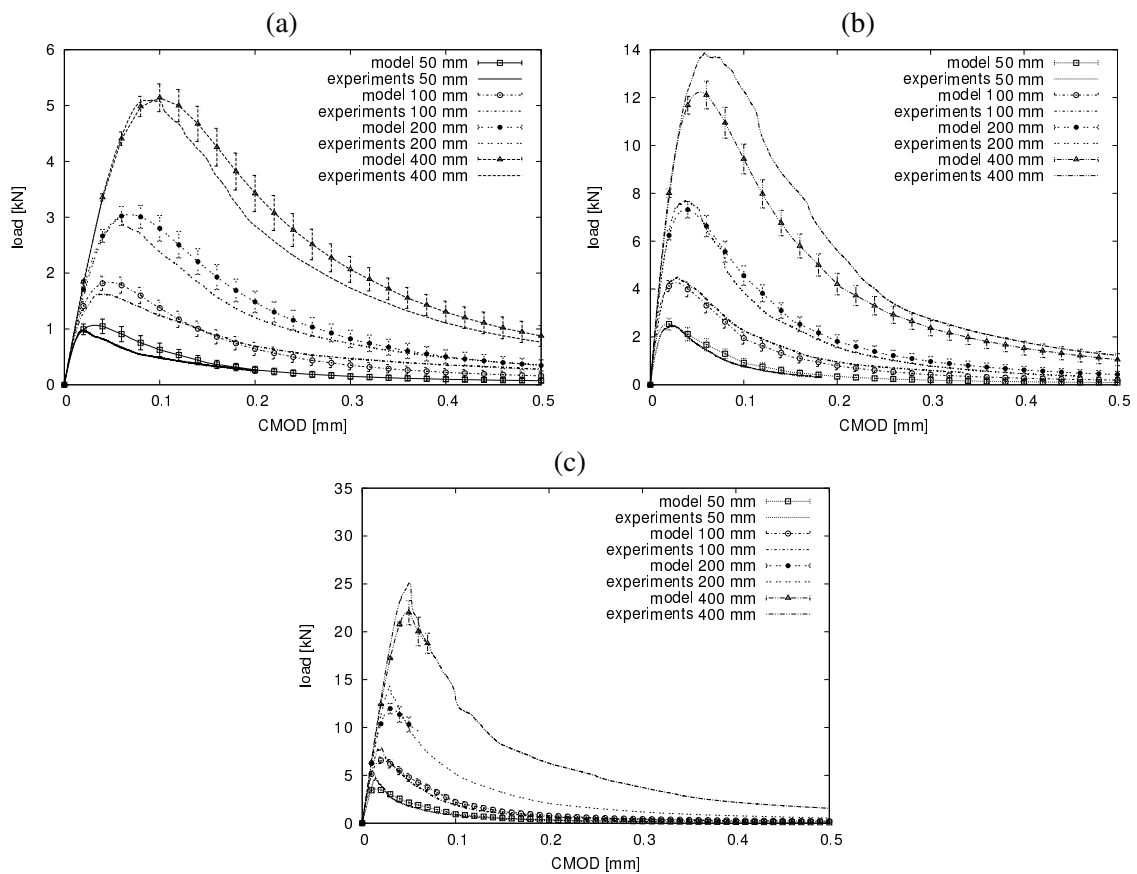


FIGURE 2.9 – Comparaisons expérimentales/mésoscopique en terme de réponse globale Force/CMOD pour les éprouvettes entaillées à la moitié (a), au cinquième (b) et non-entaillées (c).

2.3.3 Représentativité du processus local de fissuration

2.3.3.1 Comparaisons en terme de lieu d'endommagement

La représentation explicite de la mésostructure (granulats) à l'aide du modèle mésoscopique permet de caractériser le processus local de fissuration. La figure 2.10 présente ainsi l'évolution des lieux d'endommagement au sein de la structure pour 3 instants différents de chargement (stage 1, 2 et 3). Apparaissent en rouge les points matériels (point *C* des figures 2.7.c et 2.7.d) dont l'endommagement croît durant l'instant de chargement considéré. Apparaissent en gris les points matériels ayant été préalablement endommagés mais dont l'endommagement ne croît plus durant l'instant de chargement considéré.

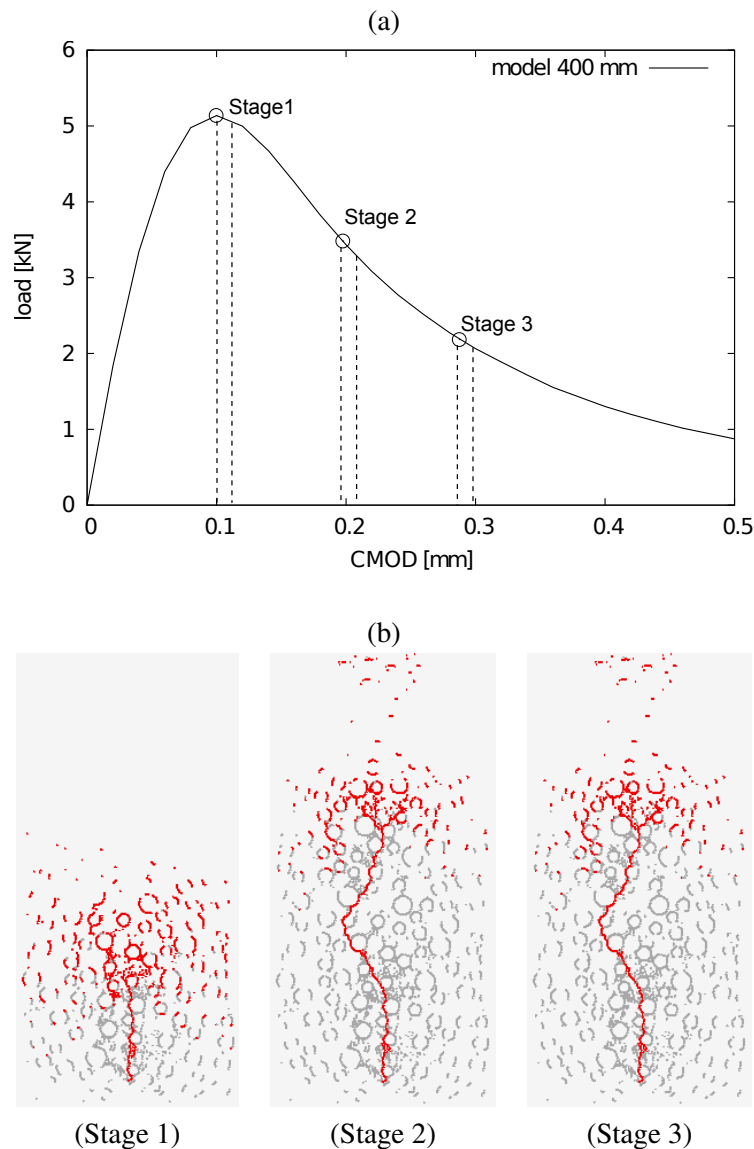
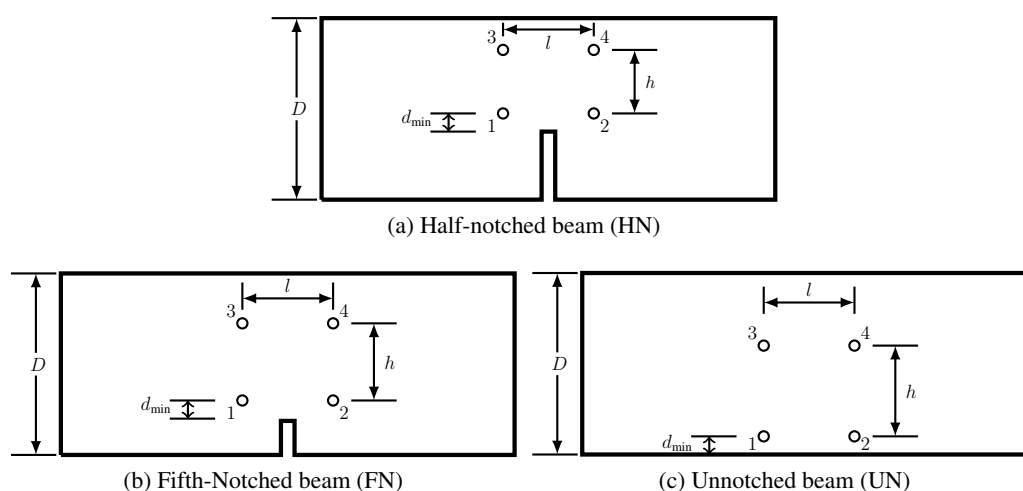


FIGURE 2.10 – Réponse globale Force/CMOD (a) et processus local de fissuration (b) pour la plus grande éprouvette entaillée à la moitié ($i=1$, $n=1$).

Grâce à ces évolutions, on peut ainsi se faire une idée qualitative de la forme et de l'évolution de la FPZ au cours du chargement et de la rupture de la structure considérée. Cependant et afin de valider la représentativité du processus local de fissuration obtenue à l'aide du modèle mésoscopique, il est nécessaire d'obtenir expérimentalement une information similaire sur les lieux d'endommagement.

Dans ce but, une nouvelle campagne expérimentale⁵ a été entreprise, similaire à celle présentée à la partie 2.2.1, mais où des capteurs acoustiques ont été ajoutés afin de localiser les lieux d'endommagement par triangulation d'émissions acoustiques. L'enregistrement et l'analyse d'émissions acoustiques sont des techniques de caractérisation non destructive habituellement utilisées afin de suivre l'endommagement des matériaux soumis à des sollicitations mécaniques. Grâce à cette technique, il est possible de détecter des processus dynamiques associés à la dégradation locale du matériau. Une émission acoustique (EA) est une onde micro-sismique engendrée par un relâchement d'énergie élastique stockée. Les ondes micro-sismiques sont captées grâce à des transducteurs piézoélectriques, dispositifs chargés de les convertir en des signaux électriques. Trois éprouvettes entaillées à la moitié, trois éprouvettes entaillées au cinquième et deux éprouvettes non entaillées de hauteur égale à 200mm ainsi que trois éprouvettes non-entaillées de hauteur égale à 100mm ont ainsi été testées en flexion 3 points. Les réponses globales de ces essais sont semblables à celles obtenues précédemment mais, durant cette nouvelle campagne d'essais, les émissions acoustiques dues à l'endommagement local ont été enregistrées et localisées. La figure 2.11 présente les positions respectives des différents capteurs acoustiques pour les différentes géométries.



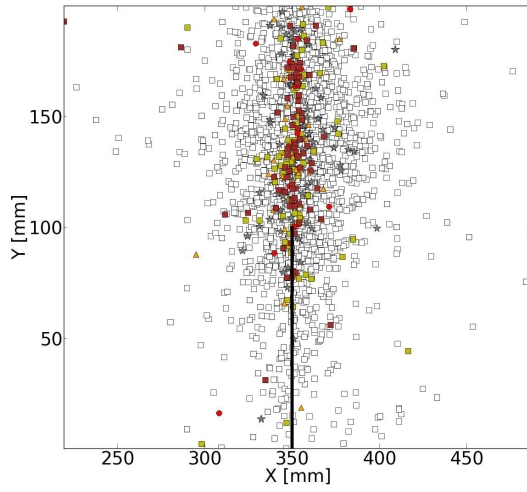
(mm)	HN200	SN200	UN200	UN100
d_{min}	12.5			
l	120			
h	75	105	110	60



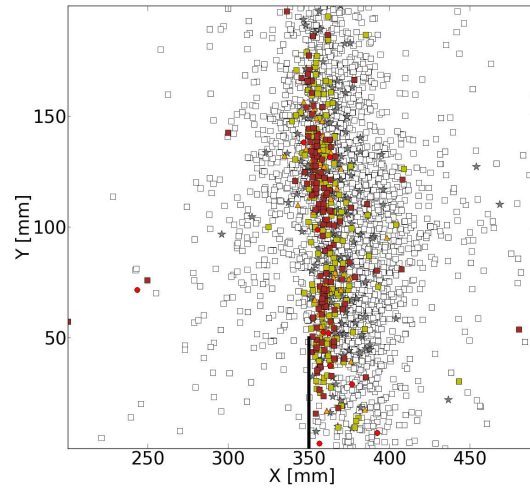
FIGURE 2.11 – Positions des capteurs acoustiques pour les différentes géométries.

5. Cette campagne expérimentale a été entreprise en collaboration avec le groupe du Pr. A. Loukili (GeM – École Centrale de Nantes) et est détaillée dans (Grégoire et al., 2014b).

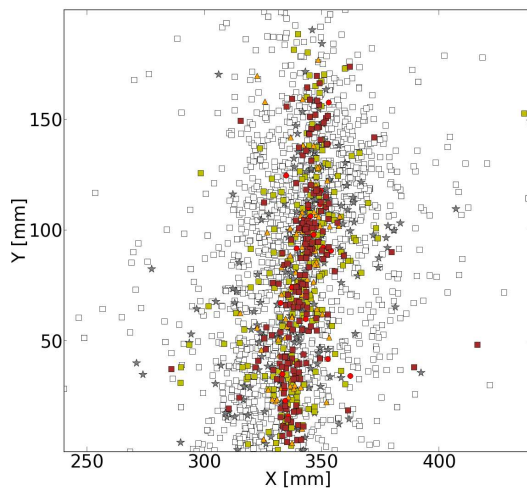
2.3. Études à l'échelle mésoscopique



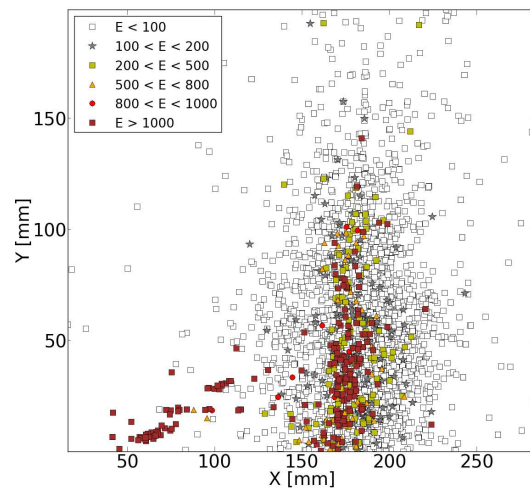
(a) Beam 1125 – $D = 200$ mm, $a = 0.5$



(b) Beam 1121 – $D = 200$ mm, $a = 0.2$



(c) Beam 1122 – $D = 200$ mm, $a = 0$



(d) Beam 1131 – $D = 100$ mm, $a = 0$

FIGURE 2.12 – Exemple de distributions d'événements acoustiques pour les différentes géométries testées.

La figure 2.12 présente les résultats cumulés des lieux d'apparition des événements acoustiques au fur et à mesure de la fissuration. Les points indiquent les sources d'émissions acoustiques au sein de la fenêtre d'observation centrée sur la pré-entaille. Les événements acoustiques transportent différents niveaux d'énergie et tous les événements sont ici indiqués. Les couleurs chaudes correspondent ainsi à des événements de haute énergie. En filtrant les événements suivant leur niveau d'énergie on peut décomposer le processus local de fissuration. Le processus de fissuration commence avec des événements à bas niveau d'énergie, distribués de manière diffuse au sein de la structure, soit autour de la pré-entaille pour les éprouvettes entaillées, soit le long de la face inférieure pour les éprouvettes non entaillées. Ensuite des événements à plus haute énergie se concentrent au fur et à mesure qu'une macrofissure se forme et le lieu des événements à plus haute énergie correspond à la macro-fissure propageant au sein de la structure. Le processus est qualitativement similaire à ce qui est observé numériquement à l'aide du modèle mésoscopique.

2.3.3.2 Comparaisons en terme de carte de densité d'énergie

Pour mieux encore qualifier l'évolution de la FPZ, on peut tracer des cartes de densité d'énergie dissipée au cours du processus de fissuration. Le domaine à analyser est tout d'abord discrétisé sous la forme d'une grille régulière de taille de cellule fixée. Au sein de chaque cellule, les énergies dissipées du fait de l'endommagement de chaque élément lattice présent sont estimées puis sommées et la somme est attribuée à la cellule.

La distribution spatiale de cette densité d'énergie doit être représentative de l'étendue de la FPZ à un instant de chargement donné dès lors que la taille de discrétisation de la grille sous-jacente est suffisamment fine. La figure 2.13 présente des cartes de densité d'énergie obtenue numériquement et moyennées sur 100 calculs mésoscopiques pour les différents instant de chargement présentés à la figure 2.10.

Pour caractériser l'évolution de la FPZ au cours du processus, on peut intégrer ces cartes de densité le long du ligament ou perpendiculairement au ligament (figure 2.14). La FPZ évolue au cours du chargement le long du ligament tandis que sa largeur, perpendiculairement au ligament, reste quasiment constante – égale à 40mm – soit environ 4 fois le diamètre du plus gros granulat.

Pour caractériser les effets de bord et les effets d'échelle sur l'évolution de la FPZ, toutes les géométries d'éprouvette ont été dépouillées suivant la même méthodologie et la figure 2.15 présente les résultats pour des éprouvettes entaillées et non-entaillées pour trois tailles de ligaments équivalentes. On observe ainsi qu'il n'y a pratiquement aucune influence de la présence ou non d'une pré-entaille sur la distribution spatiale d'énergie le long du ligament juste après le pic dans la courbe Force/CMOD.

La finesse du maillage mésoscopique permet ici de représenter l'évolution de la FPZ au cours du processus de fissuration. Du fait du faible nombre d'événements acoustiques enregistrables durant un essai et de l'incertitude de localisation inhérente à la taille des capteurs utilisés, il est difficile de faire de même expérimentalement. Par contre, si reproduire le même type de post-traitement à partir des résultats expérimentaux sur des grilles spatiales plus grandes et pour des instants de chargement plus longs ne permet pas de discuter réellement de l'évolution de la FPZ, cela peut permettre, en comparant les résultats numériques et expérimentaux obtenus, de valider ou d'invalidier la représentativité du processus local de fissuration observé à l'aide du modèle mésoscopique à une échelle plus fine. C'est ce que nous allons étudier par la suite.

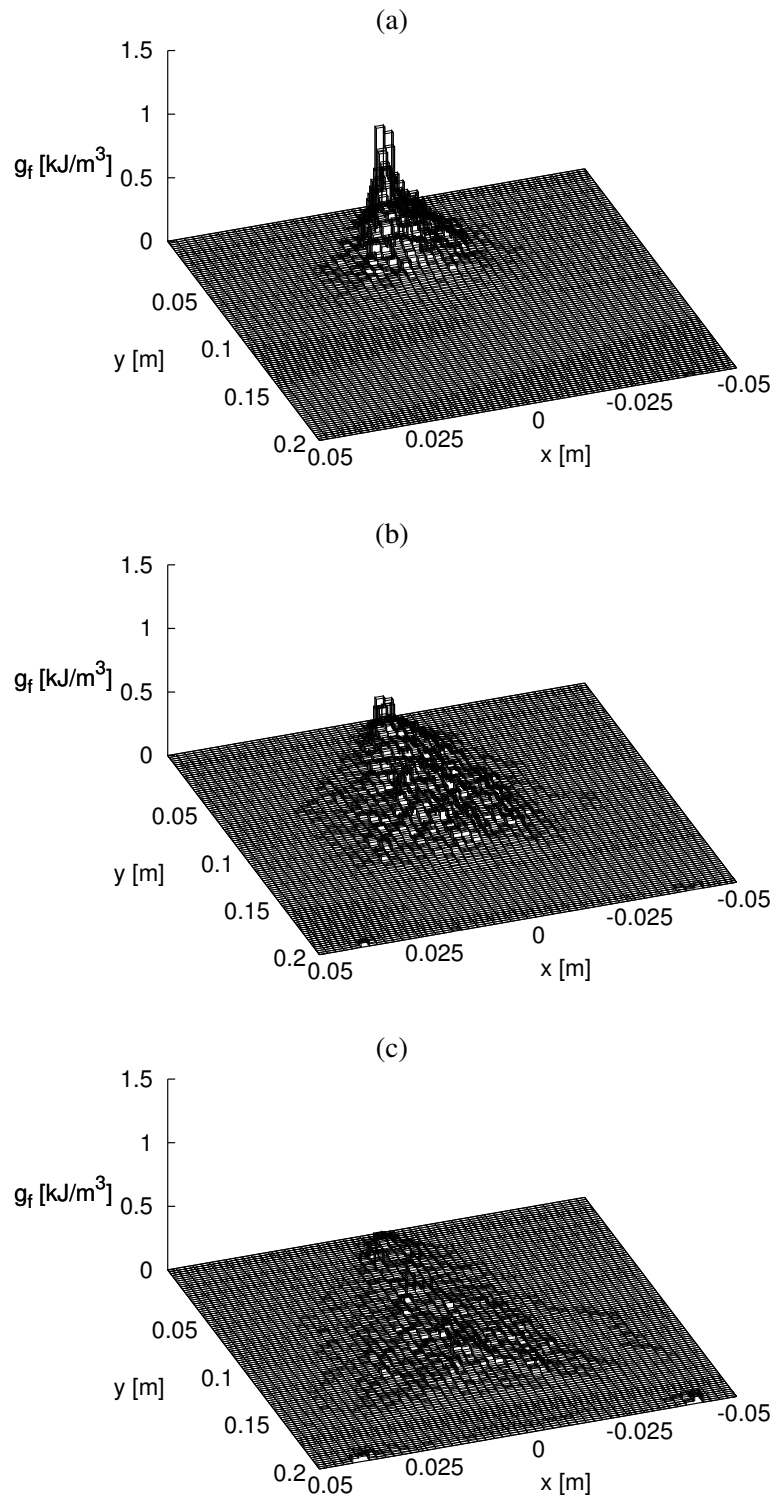


FIGURE 2.13 – Densité d'énergie dissipée dans le réseau lattice, moyennées sur 100 calculs pour les 3 incréments de chargement ((a) Stage 1, (b) Stage 2, (c) Stage 3) pour la plus grande éprouvette entaillée à la moitié.

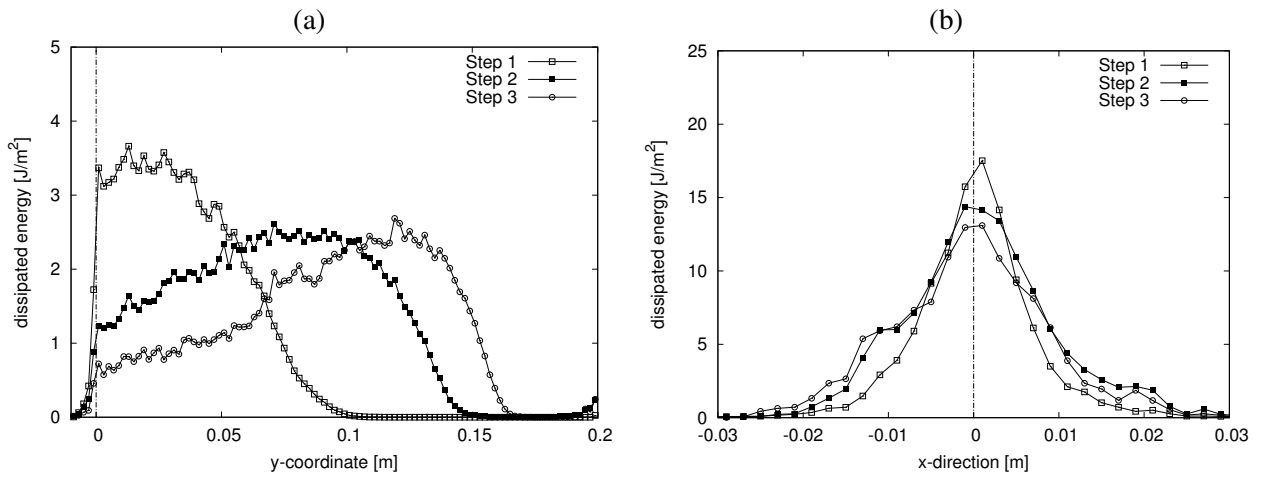


FIGURE 2.14 – Evolution de l'énergie dissipée le long du ligament (a) et perpendiculairement au ligament (b) pour les trois mêmes incréments de chargement pour la plus grande éprouvette entaillée à la moitié.

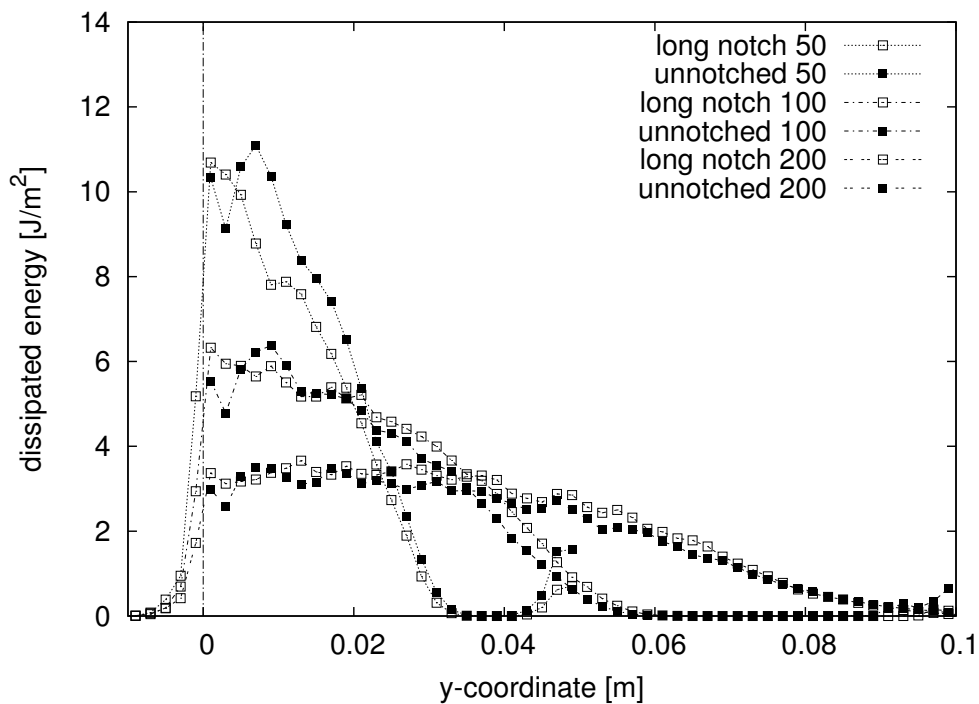


FIGURE 2.15 – Densité d'énergie intégrée le long du ligament pour des éprouvettes entaillées et non-entaillées pour 3 tailles de ligaments équivalentes.

2.3. Études à l'échelle mésoscopique

Afin de valider la représentativité de notre modèle mésoscopique à l'échelle locale en comparant les résultats numériques et expérimentaux, nous allons effectuer le même post-traitement en terme de cartes de densité d'énergie sur des grilles plus grossières et pour des instants de chargement plus long, ceci afin de s'assurer qu'un nombre significatif d'événements acoustiques aura été capturé lors des expériences. Contrairement aux résultats précédents où la moyenne de 100 calculs numériques était réalisée, pour les comparaisons numérique/expérimental le nombre de calculs numériques est choisi égal au nombre d'expériences réalisées.

Pour chaque géométrie d'éprouvette, trois incréments de charge différents sont choisis, un au pic et deux durant la phase d'adoucissement, de telle sorte qu'il y ait un nombre significatif d'événements acoustiques enregistrés et que la même quantité d'énergie soit dissipée durant ces incréments ($\Delta G_1 = \Delta G_2 = \Delta G_3 = 120 \times 10^{-3}$ J, voir figure 2.16). Ces incréments de charge sont environ 10 fois plus importants que ceux ayant servis au post-traitement purement numérique des figures 2.13 à 2.15.

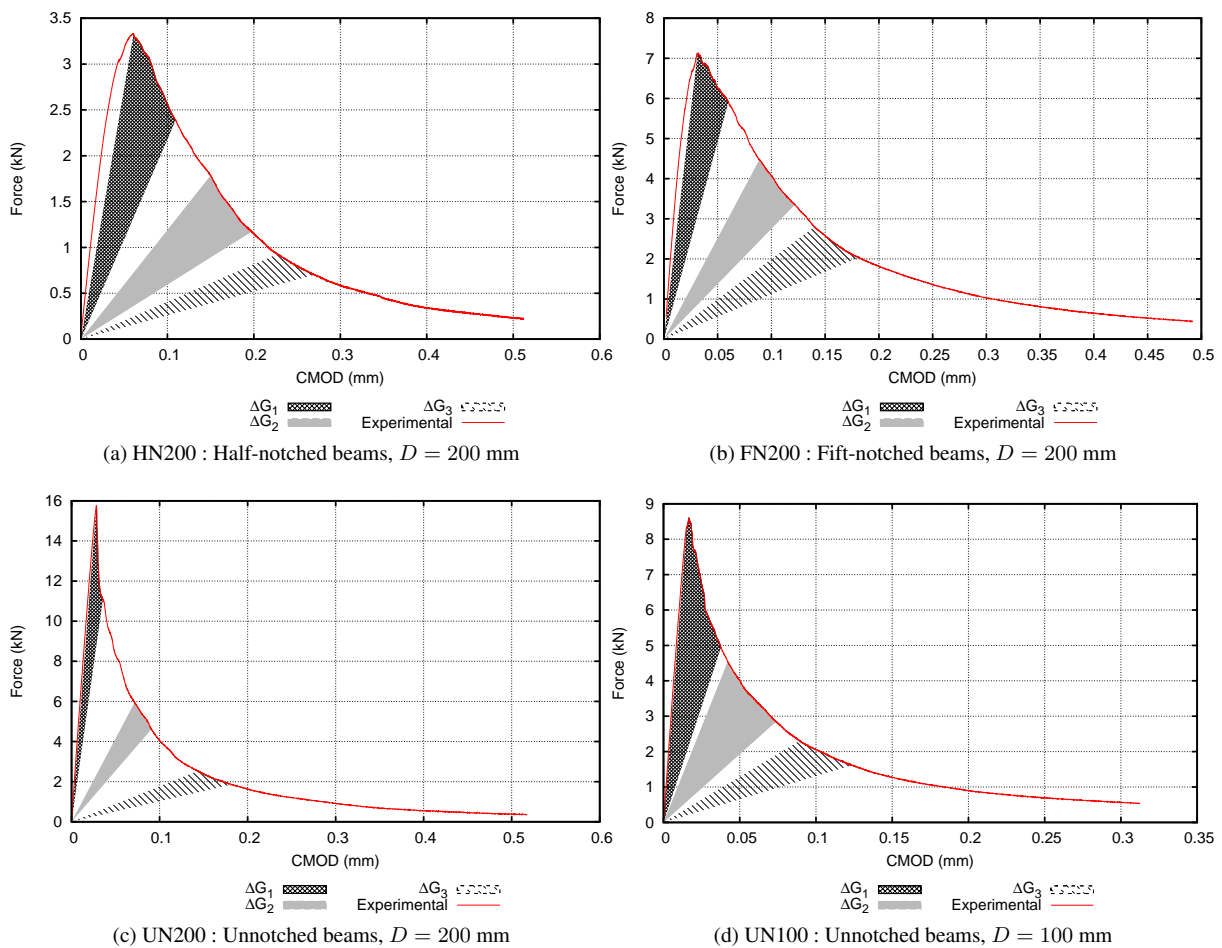


FIGURE 2.16 – Différents intervalles d'énergie dissipée représentés sur les courbes expérimentales moyennes Force vs. CMOD.

La figure 2.17 présente la comparaison des distributions moyennes d'énergie dissipée durant les essais numériques et expérimentaux correspondants à la géométrie d'éprouvettes entaillées à moitié, de hauteur 200mm, et ceci pour les trois intervalles de chargement considérés. Les résultats correspondants aux autres géométries testées sont présentés dans (Grégoire et al., 2014b). Les courbes ne sont pas superposées pour des questions de lisibilité et de plus les énergies mises en jeu sont très différentes. L'énergie acoustique est seulement une faible part de l'énergie dissipée lors du processus local de fissuration. La plus grande partie de l'énergie est utilisée pour créer les nouvelles surfaces libres de fissure. Cependant et même si les énergies numériques et expérimentales ne sont pas les mêmes, elles sont fortement corrélées (voir par exemple les travaux de Landis and Baillon, 2002) et une comparaison qualitative directe a du sens.

On observe que les profils d'énergie dissipée numérique et expérimentale, qui sont la trace de la FPZ, sont qualitativement similaires. A l'initiation (Δ_{G1}), les énergies numériques et expérimentales sont dissipées dans une région localisée autour du front de la préentaille, le maximum étant atteint sur le front d'entaille. Pour les éprouvettes non entaillées (voir figures dans Grégoire et al., 2014b), le nombre d'événements acoustiques n'est pas suffisamment importants avant le pic Force/CMOD pour observer une répartition diffuse des événements sur la partie inférieure de la poutre avant l'apparition d'une macrofissure. Cependant les profils numériques et expérimentaux sont également similaires une fois la propagation d'une macrofissure activée.

La similarité entre les résultats numériques et expérimentaux est encore plus visible lorsque l'on regarde les projections horizontales et verticales de ces profils d'énergies dissipées. La figure 2.18 présente ces projections pour les éprouvettes entaillées à moitié. Les résultats correspondants aux autres géométries sont présentés dans (Grégoire et al., 2014b). Qualitativement, les profils ont la même extension verticale et horizontale, ce qui signifie que la trace de la FPZ est similaire dans les deux directions. Cependant les résultats expérimentaux sont plus dispersés, présentant des pics plus irréguliers, liés à la précision de mesure et à la faible quantité d'événement enregistrable. La taille des granulates doit également avoir un rôle ici. Les fenêtres d'observation acoustique (AE measuring windows) correspondant à la région délimitée par les capteurs acoustiques sont présentées sur chaque figure. Les événements apparaissant à l'extérieur de cette fenêtre n'ont pas été filtrés mais ne sont pas localisés précisément. Finalement une bonne corrélation est observée entre les résultats numériques et expérimentaux quelque soit la géométrie des éprouvettes considérée, entaillée ou non-entaillée, ce qui montre que l'outil numérique est représentatif du processus local de fissuration.

2.3. Études à l'échelle mésoscopique

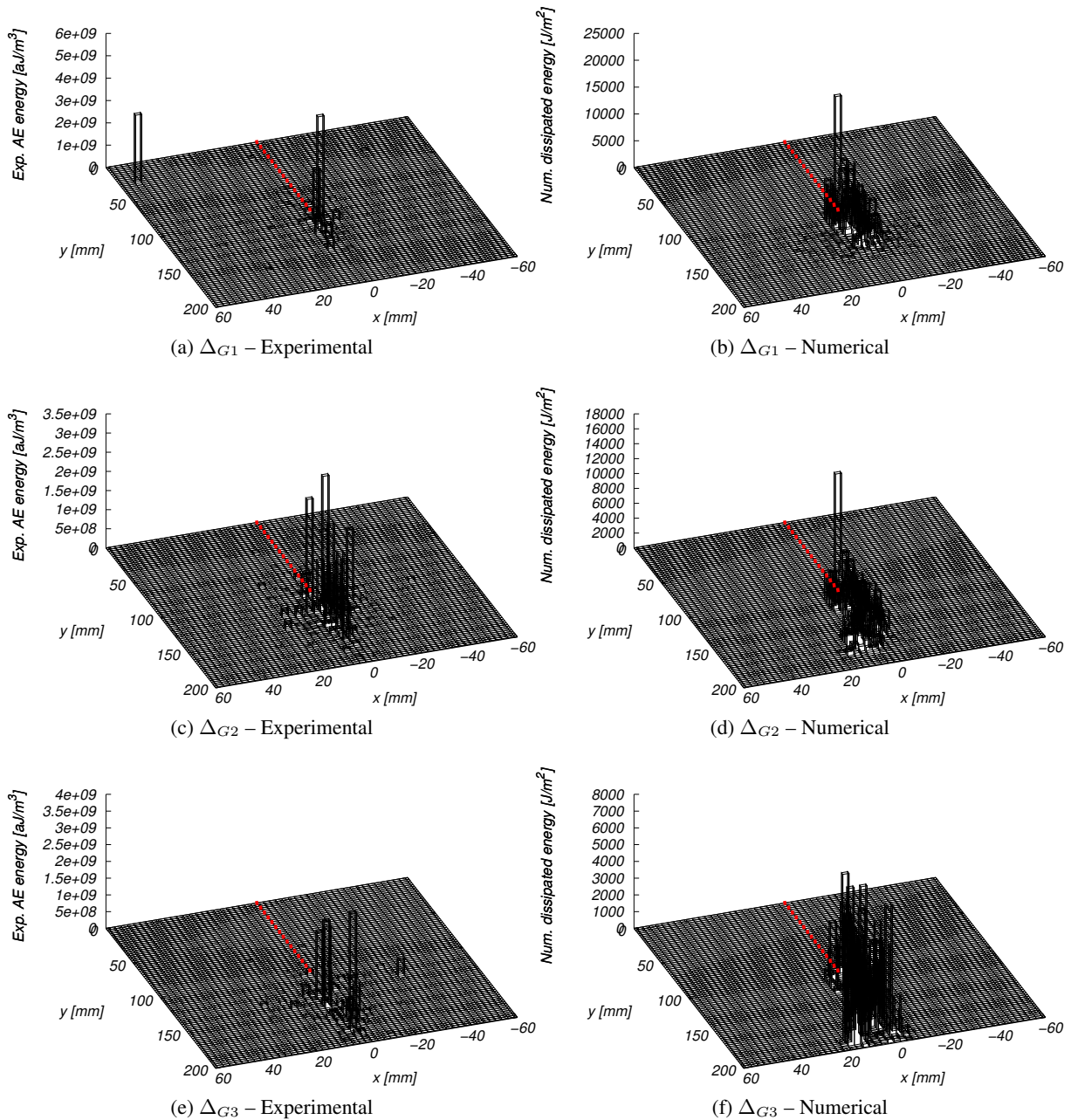


FIGURE 2.17 – Profils d'énergie dissipée durant les différents incréments de charge à partir des analyses acoustiques (Experimental) du modèle mésoscopique (Numerical) pour les éprouvettes entaillées à moitié. La préentaille est indiquée par une ligne pointillée rouge.

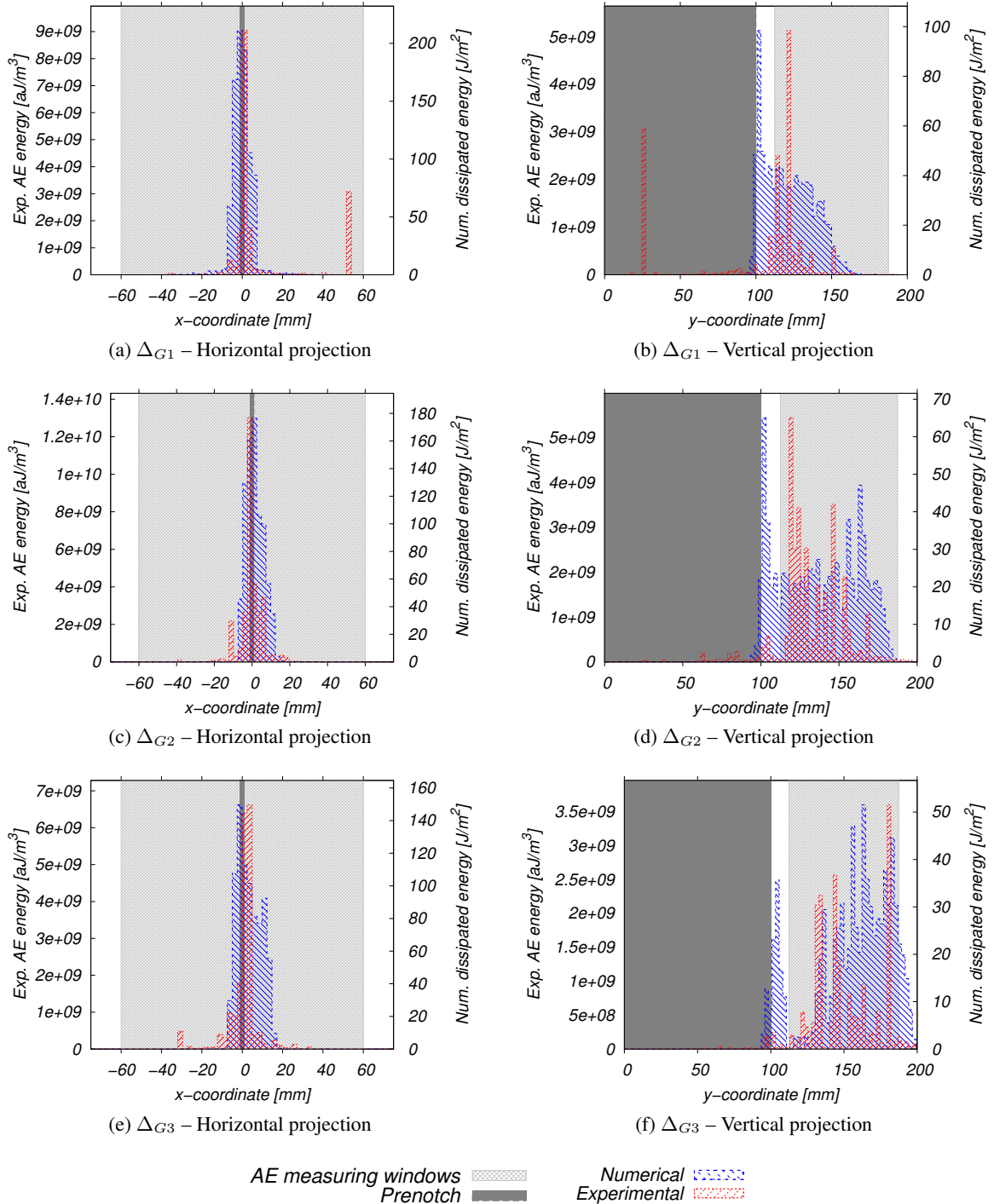


FIGURE 2.18 – Projections horizontales et verticales des profils d'énergie dissipée pour les éprouvettes entaillées à moitié.

2.3.4 Analyse des corrélations induites lors de la rupture quasi-fragile

Pour caractériser la cinétique d'évolution de la FPZ, on cherche à extraire du processus local de fissuration des longueurs de corrélation entre points endommagés.

2.3.4.1 Analyse en terme d'histogramme de distances relatives entre points endommagés

Tout d'abord on cherche à construire des histogrammes de distances relatives entre points endommagés. En effet, de tels histogrammes devraient mettre en évidence des corrélations dues à la redistribution des déformations et des corrélations dues aux interactions entre points matériels durant le processus de rupture. L'étude de telles corrélations a déjà été entrepris par Delaplace et al. (1996) et Delaplace et al. (2003) dans le cas d'éprouvettes de traction soumises à une rupture en mode I pur en étudiant la réponse numérique de maillages de type lattice.

En considérant un incrément d'énergie dissipée ΔG_f entre deux instants de chargement comme présenté à la figure 2.16, on recherche, pour les résultats numériques, tous les points matériels (point *C* des figures 2.7.c et 2.7.d) ayant subi une augmentation de leur endommagement et on estime les distances relatives entre ses points. De la même manière on considère, pour les résultats expérimentaux, tous les événements acoustiques ayant eu lieu durant le même incrément et on estime les distances relatives entre les sources acoustiques. Ensuite, on considère les projections horizontales (perpendiculaire à la propagation de la fissure) et verticales (parallèle à la propagation de la fissure) de ces distances relatives et leurs distributions est tracées. L'axe des abscisses représente alors chaque classe de distances relatives et l'axe des ordonnées leur nombre d'occurrences. Pour pouvoir comparer les résultats numériques, comportant un nombre très important d'événements, et les résultats expérimentaux, comportant relativement peu d'événements, le nombre d'occurrences est normalisé par le nombre total de distances relatives estimées et les distances sont normalisées par la taille du ligament de chaque éprouvette.

La figure 2.19 présente la comparaison de ces histogrammes de distances relatives entre points endommagés au pic pour le premier incrément de charge (Δ_{G1} à la figure 2.16) pour toutes les géométries d'éprouvette considérées (entaillée à la moitié HN200, au cinquième FN200 ou non-entaillée de hauteur 200mm UN200 et non-entaillée de hauteur 100mm UN100)⁶. Les résultats numériques et expérimentaux concordent bien, d'autant plus qu'aucun paramètre d'ajustement n'est présent dans le calcul numérique. On peut remarquer une dispersion plus importante des résultats expérimentaux pour la géométrie UN200 (non-entaillée, hauteur 200mm). En effet seulement quelques événements acoustiques ont été capturés au pic pour cette géométrie avec le dispositif d'émissions acoustiques et donc cela accroît la dispersion. Durant la phase adoucissante (voir les résultats dans Grégoire et al., 2014b), la comparaison est toujours acceptable même si des différences entre les résultats numériques et expérimentaux peuvent être notées. Les faibles distances relatives peuvent ne pas être détectées à partir du dispositif d'émissions acoustiques alors que tous les événements sont détectés numériquement. Ainsi le poids des faibles distances relatives est plus important dans les histogrammes numériques que dans les histogrammes expérimentaux. Par ailleurs seulement 2 à 3 essais ont été réalisés expérimentalement pour chaque géométrie et un nombre plus important d'analyse est nécessaire pour un traitement statistique.

Cependant, la concordance semble suffisante pour montrer que le modèle mésoscopique présente des résultats physiquement fondés et une analyse plus fine, correspondante à des incréments de charge plus faibles, peut être employée pour tenter de capturer les longueurs de corrélation induites.

6. Les résultats concernant les autres incréments de charge sont présentées dans (Grégoire et al., 2014b).

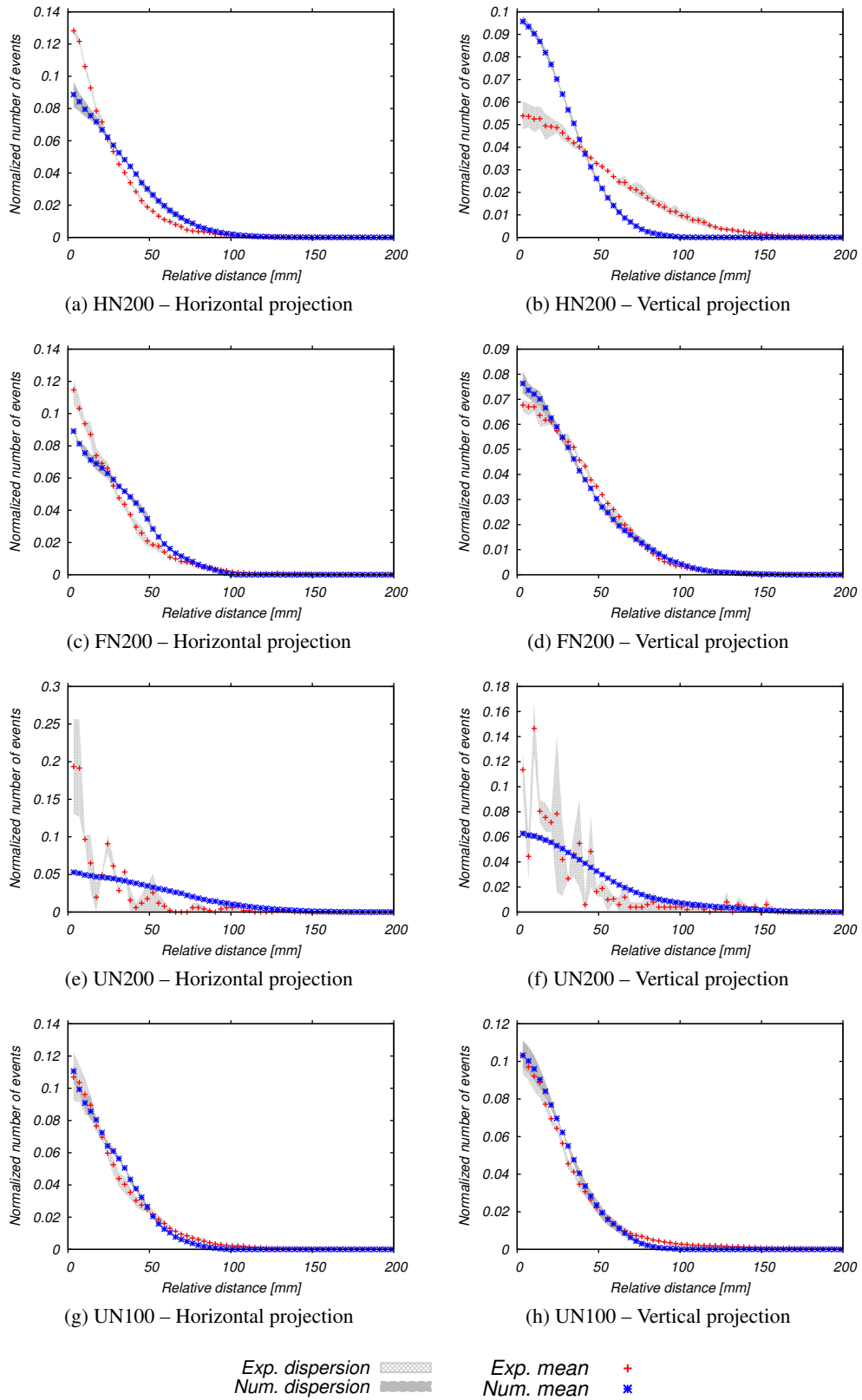


FIGURE 2.19 – Projections horizontales et verticales des distributions numériques et expérimentales de distances relatives au pic (premier incrément Δ_{G1} à la figure 2.16).

2.3. Études à l'échelle mésoscopique

L'étude précédente est donc répétée pour des incréments d'énergie dissipée 10 fois plus faibles ($\Delta G_f = 12.5 \times 10^{-3}$ J). On considère ici deux incréments, le premier au pic ΔG_1 et le second ΔG_2 dans la phase adoucissante, 10 incréments de charge plus tard (les tests numériques sont toujours contrôlés en ouverture d'entaille avec un pas de chargement égal à $\Delta_{CMOD} = 2 \times 10^{-6}$ m). Pour avoir une analyse statistique plus pertinente, 10 calculs sont effectués pour chaque géométrie. Puisque l'étude est purement numérique, le nombre de géométries a été significativement augmentée. On considère toujours des éprouvettes entaillée à la moitié, au cinquième et non-entaillée mais on varie les hauteurs afin de pouvoir étudier la réponse d'éprouvettes de géométries différentes mais de tailles de ligaments constantes.

TABLE 2.5 – Différentes géométries étudiées numériquement

Désignation	Hauteur (mm)	$\frac{\text{Pré-entaille}}{\text{Hauteur}}$	Ligament (mm)
HN400	400	0.5	200
HN200	200	0.5	100
HN100	100	0.5	50
FN250	250	0.2	200
FN125	125	0.2	100
FN62.5	62.5	0.2	50
UN200	200	0	200
UN100	100	0	100
UN50	50	0	50

Les figures 2.20 et 2.21 montrent les résultats pour les deux incréments d'énergie considérés. Deux commentaires peuvent être faits :

1. Dans le cas d'une sollicitation de traction pure comme étudié par Delaplace et al. (1996), on observe deux parties distinctes sur de tels histogrammes. Au dessus d'une longueur critique de corrélation, on observe un histogramme relativement horizontal correspondant à la distribution aléatoire des lieux d'endommagement. En dessous de cette longueur critique on observe une distribution de type loi puissance. Ce n'est pas du tout le cas pour une sollicitation de flexion. Pour les faibles distances, une loi puissance doit se traduire par une droite dans un diagramme logarithmique et ce n'est pas ce qui est observé. A grande distance la distribution horizontale n'est pas non plus retrouvée du fait de la présence d'un gradient de déformation sur la hauteur de l'éprouvette qui empêche la distribution aléatoire de se développer (l'endommagement est annihilé dans les zones de compression). Il est donc très difficile d'estimer une longueur de corrélation à partir de ces histogrammes.
2. Bien que ces histogrammes soient difficile à interpréter directement contrairement au cas de traction pure, ils apportent cependant quelques informations intéressantes : pour des ligaments égaux les histogrammes se superposent presque parfaitement. Ainsi une fois le processus de fissuration localisé mis en place, la propagation semble influencée uniquement par la taille du ligament et non pas par la géométrie initiale de l'entaille. Cela avait également été observé à la figure 2.15.

Pour conclure les essais de flexion et la méthodologie employée de construction d'histogrammes de distances relatives entre points endommagés ne sont pas suffisants pour identifier des longueurs de corrélation en lien avec la taille de la FPZ. Une autre stratégie doit donc être mise en place pour caractériser la

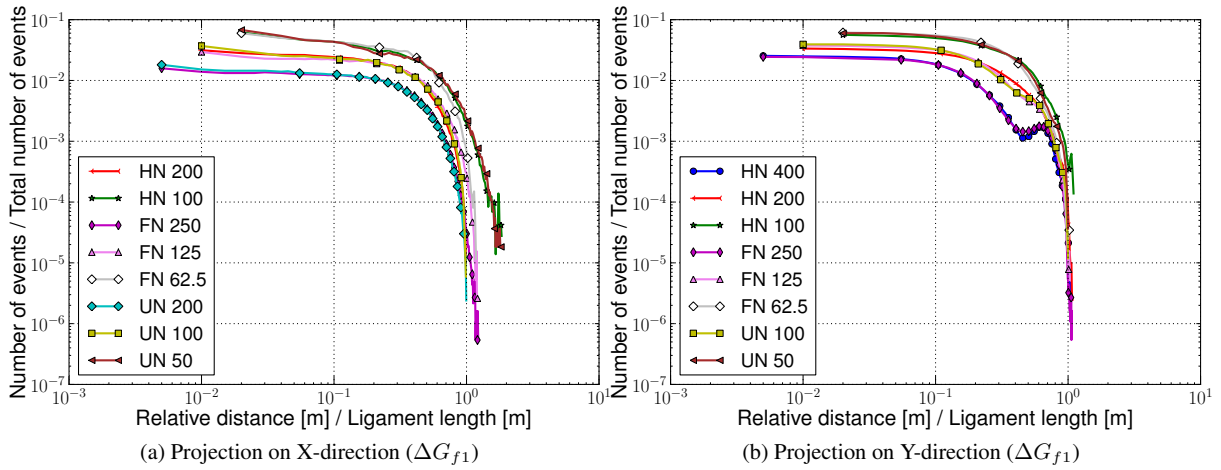


FIGURE 2.20 – Histogrammes en échelle logarithmique et normalisés des distances relatives calculées au pic (ΔG_{f1}).

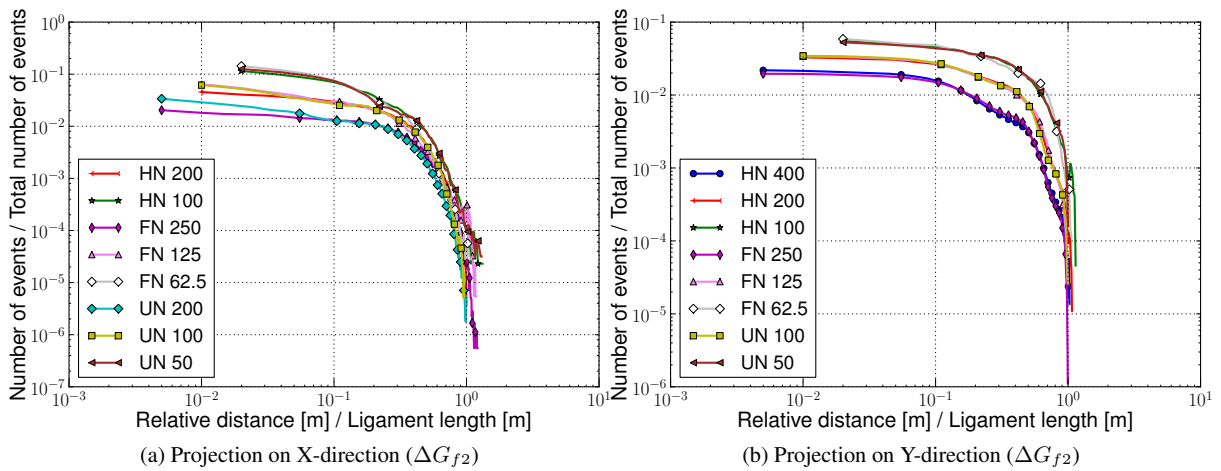


FIGURE 2.21 – Histogrammes en échelle logarithmique et normalisés des distances relatives calculées dans la phase adoucissante (ΔG_{f2}).

cinétique de formation de la FPZ et estimer une longueur interne à renseigner dans un modèle non-local macroscopique.

2.3.4.2 Analyse spatiale du processus de localisation à l'aide de fonctions de Ripley

Dans les parties précédentes, nous avons montré que le modèle mésoscopique était capable de reproduire globalement mais aussi localement le processus de fissuration en comparant expérimentalement des courbes globales de réponses force/ouverture d'entaille, des cartes d'énergies dissipées et des histogrammes de distances relatives entre points matériels endommagés. Cependant, du fait notamment du gradient de déformation le long du ligament, il est difficile d'identifier des longueurs de corrélation à partir de ces histogrammes et donc de quantifier la cinétique d'évolution de la zone d'élaboration (FPZ) au cours du processus de fissuration.

Une méthode alternative consiste à s'appuyer sur les fonctions de Ripley (1977) utilisée pour caractériser la répartition spatiale d'une population de points (Dixon, 2002). Ces fonctions sont notamment utilisées en écologie spatiale pour caractériser la migration de cellules (Ripley, 1977), la dissémination d'arbre (Duncan, 1993) ou de plantes (Stamp and Lucas, 1990) ou la propagation de maladie (Diggle and Chetwynd, 1991). Ces fonctions servent principalement à déterminer le caractère aléatoire ou non d'une population. Récemment, Tordesillas et al. (2012) a appliqué cette méthode dans un contexte non-biologique pour analyser la répartition de chaînes de force dans un assemblage granulaire. Nous cherchons à l'utiliser ici pour caractériser les interactions et les corrélations induites par la localisation de l'endommagement lors de la fissuration.

Pour une distribution spatiale de points, la fonction $K(r)$ de Ripley est défini comme le ratio entre la densité de point et le nombre moyen de points situés à une distance inférieure à r de tout autre point de la distribution :

$$K(r) = \frac{1}{N\rho} \sum_{i \in \mathcal{P}} \sum_{j \in \mathcal{P}} H(i, j, r) \quad (2.12)$$

et $H(i, j, r) = \begin{cases} 1 & \text{si } D(i, j) \leq r \\ 0 & \text{si } D(i, j) > r \end{cases}$

où N est le nombre total de point, ρ est la densité, \mathcal{P} est la distribution de point et $D(i, j)$ est la distance euclidienne entre les points i et j .

Par exemple, la fonction K^{ran} de Ripley d'une distribution parfaitement aléatoire de points est donnée par :

$$K^{\text{ran}}(r) = \pi r^2 \quad (2.13)$$

Afin de caractériser l'aléas d'une distribution, la fonction K de Ripley d'une distribution quelconque est souvent comparée à cette référence K^{ran} en estimant la fonction résiduelle $L(r)$ défini par :

$$L(r) = \sqrt{\frac{K(r)}{\pi}} - \sqrt{\frac{K^{\text{ran}}(r)}{\pi}} = \sqrt{\frac{K(r)}{\pi}} - r \quad (2.14)$$

Avec cette définition, la fonction résiduelle d'une distribution parfaitement aléatoire de points est égale à la fonction nulle.

Puisque la fonction résiduelle L défini à l'équation 2.14 est égale à la fonction nulle pour une distribution parfaitement aléatoire, déterminer l'évolution de cette fonction résiduelle pour une distribution quelconque revient à caractériser sa distance à une distribution parfaitement aléatoire et donc à estimer

son caractère localisée ou non. En appliquant ce concept à une distribution de points s'endommageant au cours d'un processus de fissuration, on peut ainsi déterminer les corrélations induites lors du processus.

Par exemple, la fonction résiduelle obtenue pour une distribution de points localisée dans une disque de rayon R présente un maximum dont l'abscisse est directement lié au rayon du disque (voir la figure 2.22). Malheureusement, la position du maximum ne correspond pas directement au rayon du disque car elle dépend également de la taille de la boîte d'analyse. Cependant, la fonction résiduelle L^{disk} d'une distribution localisée dans un disque de rayon R peut être estimée analytiquement (voir équation 2.15). Ainsi pour une distribution quelconque donnée, une longueur de corrélation peut être déduite en estimant le rayon minimisant la distance à cette fonction résiduelle analytique L^{disk} . Cela a été effectué pour la distribution présentée à la figure 2.22. On obtient $R^{\text{fit}} \approx 0.0192$ m, ce qui correspond à une erreur inférieur à 4% pour une distribution assez grossière de point.

$$L^{\text{disk}}(r, R) = \begin{cases} \sqrt{\frac{S}{\pi R^2}} \left(r - \frac{r^2}{4R} \right) & \text{for } r \leq 2R \\ \sqrt{\frac{S}{\pi}} & \text{for } r > 2R \end{cases} \quad (2.15)$$

où S est la surface de boîte d'analyse ($S = 0.1 \times 0.1 \text{ m}^2$ à la figure 2.22).

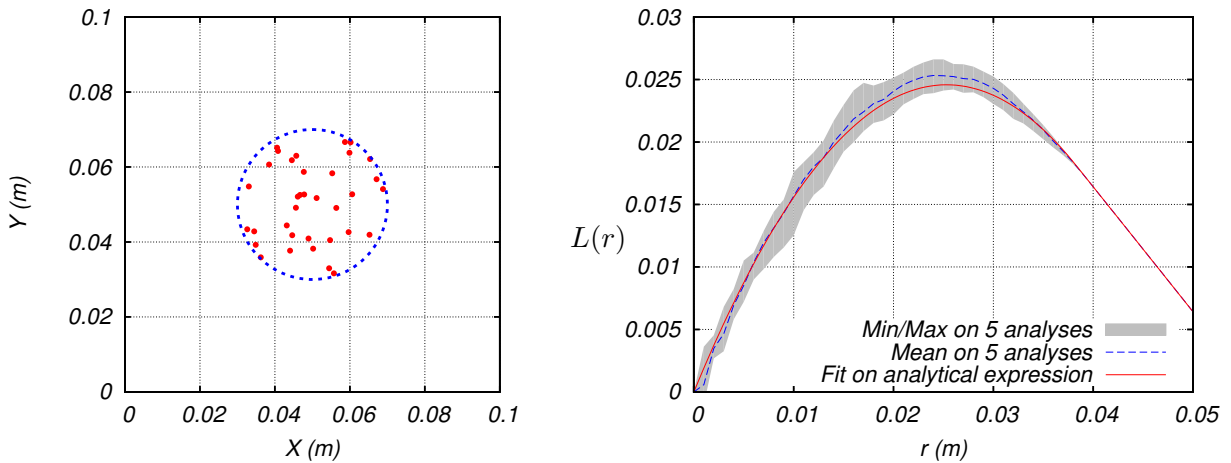


FIGURE 2.22 – Distribution de points localisée dans un disque de rayon $R = 0.02$ m et fonction résiduelle correspondante.

◇ *Traction directe*

On cherche ici à appliquer la méthode proposée à un cas de traction directe. On considère une poutre faite du même béton que celui étudié jusqu'à présent. La figure 2.23 présente la géométrie de la poutre, les conditions limites et la réponse globale en terme de courbe Force/CMOD. La poutre est pré-entaille sur la moitié de sa hauteur. L'essai numérique est contrôlé en ouverture d'entaille (CMOD) afin de limiter l'instabilité post-pic.

A chaque incrément de CMOD, la distribution incrémentale d'endommagement est estimée, c'est à dire que l'on représente les points matériels ayant subi une croissance d'endommagement durant l'incrément de charge considéré (voir la figure 2.24.a) et la fonction résiduelle de Ripley correspondante est calculée. Une longueur de corrélation en est ensuite déduite en estimant le rayon optimum qui minimise la distance à la fonction résiduelle analytique donnée à l'équation 2.15. Cette longueur de corrélation est

2.3. Études à l'échelle mésoscopique

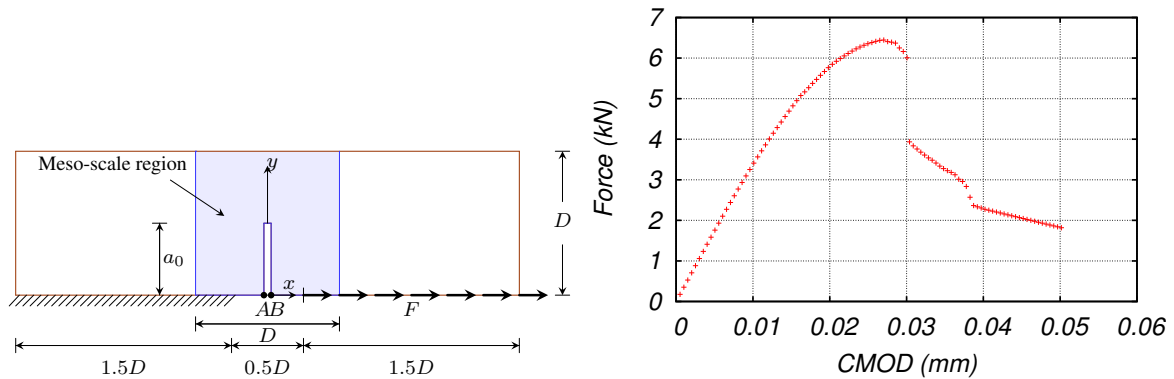


FIGURE 2.23 – Géométrie et courbe force/CMOD pour l'essai numérique de traction directe ($D = 100$ mm).

directement reliée à la taille de la zone endommagée et donc à une longueur interne au sens d'un modèle non-local.

L'évolution de cette longueur de corrélation est présentée à la figure 2.24.b. Dans le béton, l'endommagement se développe à l'interface entre les agrégats et le mortier (voir la figure 2.24.a). Au début du test, l'endommagement se développe et se répartit dans toute la structure. Ainsi la longueur de corrélation croît à partir de 0 et tendrait à atteindre la taille de la boîte. Cependant, pour une ouverture d'entaille donnée ($CMOD \approx 0.01$ mm), l'endommagement commence à se localiser au sein d'une zone d'élaboration entourant la pré-entaille et la longueur de corrélation décroît pour atteindre un plateau. Plus tard et au fur et à mesure que la FPZ se développe afin de former une macro-fissure, la longueur de corrélation décroît. Une fois la macro-fissure pleinement développée, elle propage, entourée d'une zone d'élaboration, et la longueur de corrélation atteint un nouveau plateau à une valeur correspondante à environ quatre fois la taille du plus gros granulats ($\approx 4 \times 10$ mm).

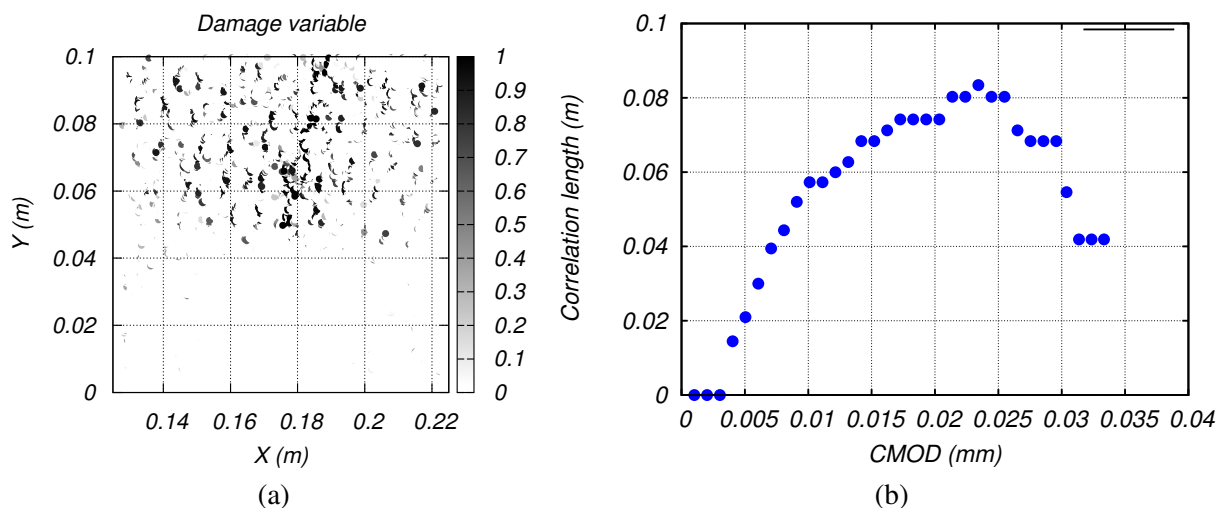


FIGURE 2.24 – Réponse en traction directe : distribution de l'endommagement au pic (a) et évolution de la longueur de corrélation (b).

◇ Flexion 3 points

On cherche ici à appliquer la méthode proposée à un cas de flexion 3 points pour une poutre entaillée à la moitié et non-entaillée (hauteur 100mm). Les géométries des poutres sont présentées à la figure 2.8. La même procédure que pour le cas de traction directe est ici appliquée : l'essai est contrôlé en CMOD et à chaque pas de chargement, la distribution incrémentale d'endommagement est déterminée (voir figures 2.25.a-b) et les fonctions résiduelles de Ripley correspondantes sont estimées. Les évolutions des longueurs de corrélation pour les deux géométries, entaillée et non-entaillée sont présentées à la figure 2.25.c.

Pour l'éprouvette entaillée à la moitié, la pré-entaille sert de précurseur à la localisation de l'endommagement et la longueur de corrélation croît de 0 pour atteindre un plateau à une valeur correspondante à environ quatre fois la taille du plus gros granulat ($\approx 4 \times 10 \text{ mm}$). L'évolution est similaire à celle observée en traction directe à la différence qu'à l'initiation l'endommagement ne se développe pas dans toute la structure du fait du gradient de déformation qui contraint la zone s'endommageant en pointe de pré-entaille. C'est pour cela que l'on observe uniquement une phase monotone croissante avant d'atteindre le plateau dans l'évolution de la longueur de corrélation.

Pour l'éprouvette non-entaillée, l'évolution est totalement différente. Puisqu'il n'y a pas de pré-entaille pour agir comme un précurseur de la localisation, l'endommagement se développe dès le départ sur toute la face inférieure de l'éprouvette. Ainsi, dès l'initiation de l'endommagement, la longueur de corrélation est égale à la taille de la boîte d'analyse. A un instant donnée, une macrofissure va émerger à partir de cette face inférieure et se propager, entourée par une FPZ complètement formée. La longueur de corrélation est donc décroissante depuis la taille de la zone d'analyse pour atteindre le même plateau observée pour une éprouvette pré-entaillée à une valeur correspondante à environ quatre fois la taille du plus gros granulat ($\approx 4 \times 10 \text{ mm}$).

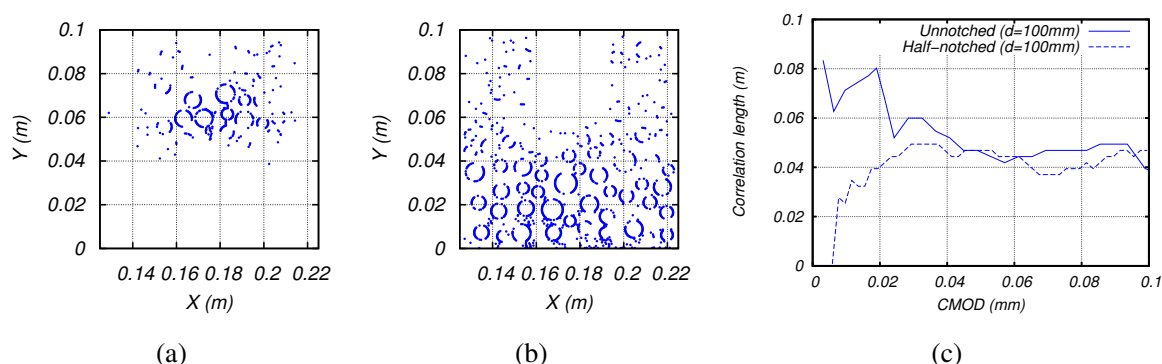


FIGURE 2.25 – Réponse en flexion 3 points : distributions de l'endommagement au pic pour des éprouvettes entaillée à moitié (a) et non-entaillée (b) ; évolution des longueurs de corrélation pour les deux géométries (c).

Les mêmes fonctions de Ripley ont été utilisées pour caractériser l'évolution des longueurs de corrélation lors des expériences présentées à la partie 2.3.3.1 où les lieux d'endommagement ont été localisés par émissions acoustiques. Encore une fois une bonne concordance est obtenue entre les résultats expérimentaux et les résultats numériques mais le faible nombre d'événements acoustiques enregistrables ne permet pas d'obtenir plus d'informations sur la cinétique d'évolution de la FPZ.

2.4 Transfert d'échelles et étude des interactions à l'échelle macroscopique

Dans la partie précédente, on a montré que notre modèle mésoscopique permettait d'obtenir des résultats physiquement fondés et représentatifs du processus de fissuration à la fois d'un point de vue global, en terme de réponse force/ouverture d'entaille, mais également d'un point de vue local, en terme de cinétique d'évolution de la FPZ. Cependant et dans un objectif de calculs de structures ou de simulations de réservoirs géologiques, l'échelle mésoscopique n'est pas l'échelle de modélisation pertinente. Même si les performances des moyens de calcul croissent de façon exponentielle, il n'est pas raisonnable de vouloir représenter explicitement des hétérogénéités de l'ordre de quelques millimètres ou centimètres pour prédire la réponse globale d'une structure de plusieurs dizaines de mètres jusqu'au kilomètre. Ainsi il est toujours nécessaire d'améliorer la représentativité des modèles macroscopiques pour la prédiction de la rupture des matériaux quasi-fragiles. Les modèles non-locaux, permettant de régulariser le problème numérique en s'affranchissant des problèmes de localisation et de dépendances aux maillages, semblent être les meilleurs candidats.

Dans les modèles classiques non-locaux, comme les modèles de type-intégraux (Pijaudier-Cabot and Bazant, 1987, équation 2.16), la longueur interne l_c est le paramètre qui représente et caractérise la non-localité. Associée à une fonction poids, classiquement gaussienne (voir équation 2.17), la longueur interne pilote comment et à quelle distance les interactions non-locales se produisent au sein du matériau. Cependant, un inconvénient majeur de la formulation est que ce paramètre est supposé constant quelque soit la géométrie et le processus de rupture. Par exemple, à proximité d'un bord, la part du domaine sur lequel est réalisé la moyenne non-locale qui sort de la structure est classiquement simplement coupée (Pijaudier-Cabot and Bazant, 1987). Il y a maintenant un consensus au sein de la communauté sur le fait que ce paramètre doit varier. Par exemple des modèles améliorés sont maintenant disponibles dans la littérature proposant des méthodes différentes pour traiter les problèmes aux bords (Krayani et al., 2009; Bažant et al., 2010) ou faisant varier la longueur interne au fur et à mesure de l'endommagement ou de l'état de contrainte (Grégoire et al., 2012; Pijaudier-Cabot et al., 2010; Giry et al., 2011). Cependant, et même si ces variations sont basées sur des concepts micromécaniques comme les interactions entre défauts ou le transfert d'information au travers d'une zone endommagée, le choix final de la fonction poids (gaussienne ou autre) et donc l'évolution de la non-localité est finalement assez empirique. De plus certains de ces modèles sont difficiles à implémenter dans des codes numériques 2D ou 3D. Enfin, même avec une longueur interne variable, le choix de la fonction poids à intégrer dans un modèle non-local intégral reste très empirique.

$$\bar{\varepsilon}(x) = \frac{1}{\Omega_r} \int_{\Omega} \psi_0(x, \xi) \varepsilon(\xi) d\xi \quad (2.16)$$

$$\psi_0(x, \xi) = \exp\left(-\left(\frac{2\|x - \xi\|}{l_c}\right)^2\right) \quad (2.17)$$

$$\Omega_r = \int_{\Omega} \psi_0(x, \xi) d\xi \quad (2.18)$$

où l_c est la longueur interne.

Dans les modèles mésoscopiques, la non-localité est intrinsèquement décrite en représentant explicitement la mésostructure du matériau (par exemple, agrégats, matrice et interfaces dans le béton). Ainsi, la

non-localité n'est pas représentée de la même manière à proximité d'un bord, d'une zone endommagée, à l'initiation ou durant le processus de rupture. Il a été montré récemment (voir partie 2.3.1 et pour plus de détails Grassl et al., 2012; Grégoire et al., 2012) que de tels modèles mésoscopiques ont réussi à relever quelques-uns des défis majeurs concernant la rupture et l'endommagement des matériaux quasi-fragiles.

Dans cette partie, on cherche à reconstruire de façon intrinsèque une fonction poids à intégrer dans un modèle non-local macroscopique à partir de l'observation des interactions non-locales qui apparaissent et évoluent au sein de la mésostructure durant le processus de rupture. Les interactions non-locales induites par la déformation d'un domaine entourant un point sur un autre point voisin sont estimées explicitement et numériquement à la manière d'un problème d'Eshelby. Ces interactions sont ensuite sommées et converties en une fonction poids qui est classiquement introduite dans un modèle non-local intégral. Ainsi, la fonction poids centrée en un point peut être différente de celle centrée en un autre, en fonction de la distribution d'endommagement au sein de la structure ou de la proximité d'un bord et ces fonctions poids évoluent au fur et à mesure de la rupture et de l'endommagement de la structure.

Puisque les fonctions poids évoluent avec l'endommagement, elles doivent être reconstruites explicitement à chaque pas de chargement. De ce fait la méthode proposée n'est pas efficace d'un point de vue coût numérique et le but n'est pas de l'utiliser directement pour effectuer un calcul des structures ou une simulation de réservoir. L'idée est plutôt d'étudier l'évolution des fonctions poids reconstruites afin de proposer de nouvelles fonctions poids analytiques dont l'évolution de ne serait plus empirique mais basée sur ces observations.

2.4.1 Interactions non-locales et fonctions poids

La structure est vue comme un assemblage d'inclusions qui sont successivement dilatées afin de caractériser le transfert d'information au sein du matériau et de reconstruire la fonction poids à introduire dans un modèle non-local intégral. La nouvelle fonction poids ainsi reconstruite prend intrinsèquement en compte l'évolution des interactions durant la rupture et l'endommagement du matériau. Par interaction, nous entendons l'effet qu'aura une déformation induite sur un récepteur localisé au point x par la dilatation ε^* d'une inclusion de rayon a localisée au point ξ (voir figure 2.26).

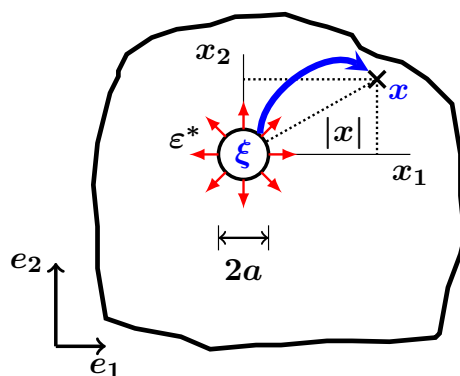


FIGURE 2.26 – Principe du transfert d'information.

Cela revient à dire qu'une interaction est la quantité d'énergie de déformation transmise de ξ à x . Cette interaction dépend de la géométrie de la structure, de la taille de l'inclusion, des propriétés élas-

tiques du matériau à l'intérieur et à l'extérieur de l'inclusion ainsi que du rapport entre elles. Formellement, la quantité d'énergie A transmise en un point x par la dilatation ε^* d'une inclusion localisée en ξ peut s'estimer au travers de la norme euclidienne⁷ du tenseur des déformations (équation 2.19).

$$A(x, \xi, \varepsilon^*, a) = \sqrt{\sum_{i=1}^3 |\varepsilon_i(x)|^2} \quad (2.19)$$

où ε_i est la $i^{\text{ème}}$ déformation principale.

Formellement, la norme A transmise à x par la dilatation ε^* s'écrit également :

$$A(x, \xi, \varepsilon^*, a) = \|\varepsilon^*\| A^*(x, \xi, a) \quad (2.20)$$

où A^* représente alors l'interaction produit en x du fait d'une dilatation unité en ξ .

On suppose que c'est cette fonction d'interaction qui gouverne la non-localité et donc qui doit pondérer la moyenne non-locale dans un modèle intégral. Ainsi la moyenne non-locale s'écrit :

$$\bar{\varepsilon}_{eq}(x) = \frac{1}{\Omega_r} \int_{\Omega} \psi(x, \xi) \varepsilon_{eq}(\xi) d\xi \quad (2.21)$$

et

$$\Omega_r = \int_{\Omega} \psi(x, \xi) d\xi \quad (2.22)$$

où $\bar{\varepsilon}_{eq}$ la déformation non-local et ε_{eq} est la déformation effective définie par Mazars (1986) :

$$\varepsilon_{eq} = \sqrt{\sum_{i \in \llbracket 1, 3 \rrbracket} \langle \varepsilon_i \rangle_+^2} \quad (2.23)$$

où $\langle \bullet \rangle_+$ est la partie positive de \bullet . Ω est le volume de la structure, Ω_r est un volume caractéristique introduit de telle sorte que l'opérateur non-local ne modifie pas une distribution uniforme de déformation effective loin des bords en absence d'endommagement.

Puisque l'on suppose qu'il y a analogie entre fonction A^* et la fonction poids ψ , on a :

$$\psi(x, \xi) \equiv A^*(x, \xi, a) = \frac{A(x, \xi, \varepsilon^*, a)}{\|\varepsilon^*\|} \equiv \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^3 |\varepsilon_i|^2}}{\|\varepsilon^*\|} \quad (2.24a)$$

$$\Omega_r = \int_{\Omega} A_0^*(x, \xi, a) d\xi \quad (2.24b)$$

où $A_0^*(x, \xi, a)$ est la fonction d'interaction reconstruite en absence d'endommagement dans la structure (typiquement au début du calcul).

7. Le choix de cette norme est arbitraire, d'autres choix sont possibles. Par exemple on aurait pu choisir d'utiliser effectivement l'énergie élastique au lieu de la norme du tenseur des déformations. Même si cela ne doit pas changer drastiquement les résultats obtenus, l'influence de ce choix n'a pas encore été étudié.

Par ailleurs, la contribution non-local induite par l'interaction entre x et ξ est donnée par :

$$e_{NL}(x, \xi) = A^*(x, \xi, a)\varepsilon_{eq}(\xi) \quad (2.25)$$

où $e_{NL}(x, \xi)$ est la contribution non-local induite par l'interaction entre x et ξ .

En pratique, le calcul des interactions est réalisé à l'aide du code éléments finis Cast3M en dilatant thermiquement, chacune à leur tour, toutes les inclusions de la structure. Si la structure possède n inclusions, n calculs élastiques d'interactions sont réalisés pour reconstruire la fonction poids à chaque pas de chargement. Le maillage élément fini est le même que celui utilisé pour le calcul mécanique et les inclusions sont représentées par un ensemble de point de Gauss. Puisque le processus de reconstruction de la fonction poids est piloté cinématiquement par les dilatations successives de ces inclusions, toutes les conditions limites en déplacement sont supposées bloquées durant le processus de reconstruction afin de ne pas perturber la cinématique du problème sur les bords. Le seul paramètre du nouveau modèle est donc la taille des inclusions de rayon a . Cette taille d'inclusion doit être liée à la taille moyenne des hétérogénéités présentes dans la structure matérielle à l'échelle mésoscopique.

Afin de quantifier l'influence de la taille des inclusions, on considère le problème simple unidimensionnel d'une barre encadrée sous tension. La barre présente une zone centrale endommagée (figure 2.27), le reste restant sain. La distribution d'endommagement est fixée a priori afin d'étudier l'influence de la présence d'une zone endommagée sur la nouvelle fonction poids proposée. La distribution de déformation au sein de la barre est compatible avec cet endommagement au travers des déformations ε_u et ε_t obtenues à partir d'une loi de comportement adoucissante bilinéaire (figure 2.27).

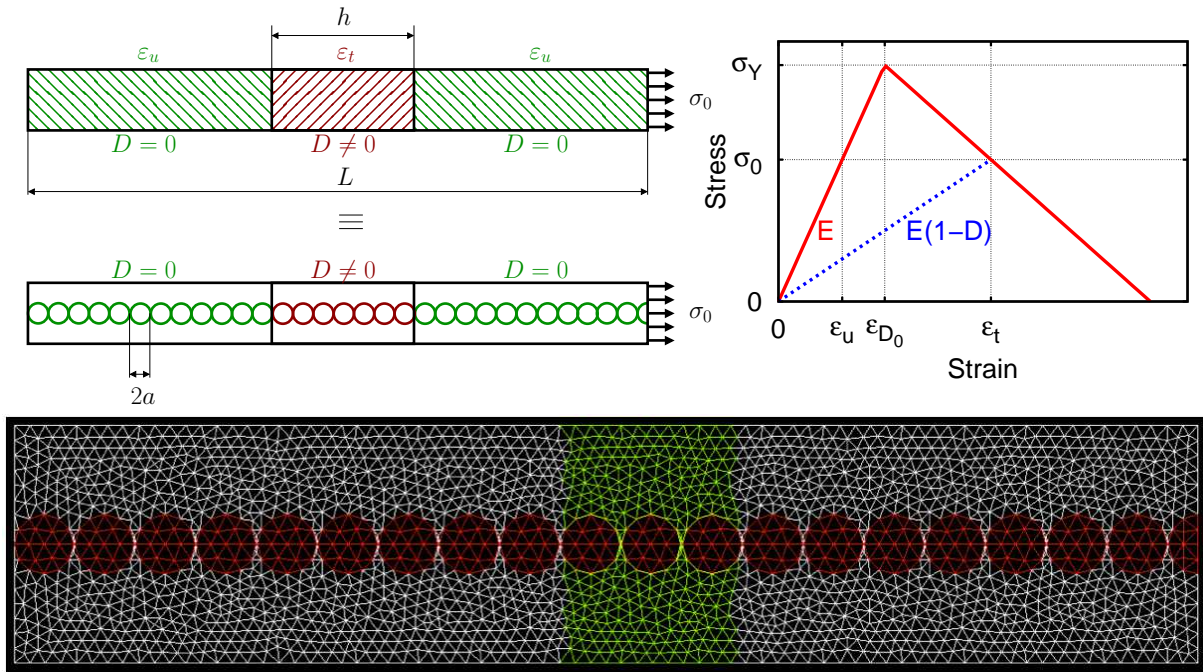


FIGURE 2.27 – Problème simple d'une barre sous tension ($L = 10cm$, $\sigma_Y = 3MPa$, $E = 30GPa$, $\varepsilon_{D_0} = 10^{-4}$, $\sigma_0 = 1.8MPa$, $D = 70\%$).

Bien que la barre soit unidimensionnelle, les interactions sont estimées et reconstruites suivant une description bidimensionnelle en contraintes planes. Les nouvelles fonctions poids sont estimées à partir d'un ensemble d'inclusions circulaires explicitement maillées et localisées sur l'axe neutre de la poutre (figure 2.27). Leur taille est bien inférieure à la hauteur de la barre afin de limiter l'influence des bords supérieurs et inférieurs et de conserver un comportement global unidimensionnel. Le maillage éléments-finis consiste en des triangles à un point d'intégration et le maillage est construit de telle sorte qu'il y ait toujours 4 éléments sur le diamètre de l'inclusion. Chaque inclusion est successivement thermiquement dilatée afin de reconstruire la fonction poids qui est normalisée ensuite au travers du volume caractéristique Ω_r , défini à l'équation 2.24b.

La figure 2.28 représente l'influence de la taille des inclusions sur la fonction poids reconstruite dans le cas où il n'y a aucun endommagement au sein de la barre. Loin du bord (figure 2.28.a), la fonction poids reconstruite ne dépend pas de la taille de l'inclusion et décroît en $1/X^2$ suivant la théorie d'Eshelby (voir par exemple Mura, 1987). La figure 2.28.b présente la même influence après normalisation. Si la taille de l'inclusion tend vers 0, l'estimation de l'effet des interactions se réduit à la construction des fonctions de Green où aucune longueur interne n'intervient. Ainsi la fonction poids tend vers une fonction Dirac et la réponse devient purement locale. La figure 2.28.c présente la même influence proche du bord gauche de la structure. La fonction poids est centrée sur l'inclusion la plus proche du bord. Lorsque la taille de cette inclusion décroît, la fonction poids tend de même vers une fonction Dirac et donc la réponse redevient purement locale comme prédit par (Pijaudier-Cabot et al., 2010; Krayani et al., 2009; Bažant et al., 2010) à partir de considérations micromécaniques. Dans la structure mésoscopique, il y a un effet de bord et on ne peut pas trouver de larges agrégats à proximité directe du bord ainsi les interactions tendent à disparaître près du bord. Ainsi cet effet de bord sera introduit dans le modèle en faisant décroître la taille des inclusions au fur et à mesure que l'on se rapproche du bord considéré.

La figure 2.29 présente l'évolution des contributions non-locales estimées au centre de l'inclusion située à proximité immédiate de la zone centrale au fur et mesure qu'elle s'endommage pour la formulation originale (figure 2.29.a) et la nouvelle formulation basée sur les interactions (figure 2.29.b). La zone endommagée contient 7 inclusions ($a = 1.25\text{mm}$, $h = 8.75\text{mm}$). Avec une fonction poids classique gaussienne, et du fait que la déformation au sein de la zone endommagée est plus importante que dans la zone saine, la contribution non-locale des points situés au sein de la zone endommagée est plus importante que celle des points situés au dehors. Ainsi il n'y a pas d'effet d'écran au travers de la zone endommagée et cela peut entraîner une expansion artificielle de la zone endommagée au fur et à mesure de l'estimation des moyennes non-locales. Au contraire, figure 2.29.b montre qu'un effet d'écran est observé avec la nouvelle formulation. Les contributions non-locales à l'extérieur de la zone restent plus importantes que celle à l'intérieur de la zone au fur à mesure que la zone centrale s'endommage. Cet effet d'écran est intrinsèque à la nouvelle formulation. Dans le cas extrême d'une bande entièrement endommagée, la dilatation d'une inclusion présente au sein de la zone n'aura aucun effet à l'extérieur de la bande. Il y a cependant une limitation à cet effet d'écran si le rayon de l'inclusion est plus grand que celui de la zone endommagée. Dans ce cas, la dilatation d'une inclusion peut avoir un effet au travers de la zone endommagée puisque cette zone est englobée au sein de l'inclusion. Pour éviter cela, la taille de l'inclusion est diminuée au fur et à mesure que l'endommagement croît de telle sorte que l'effet d'écran soit toujours conservé.

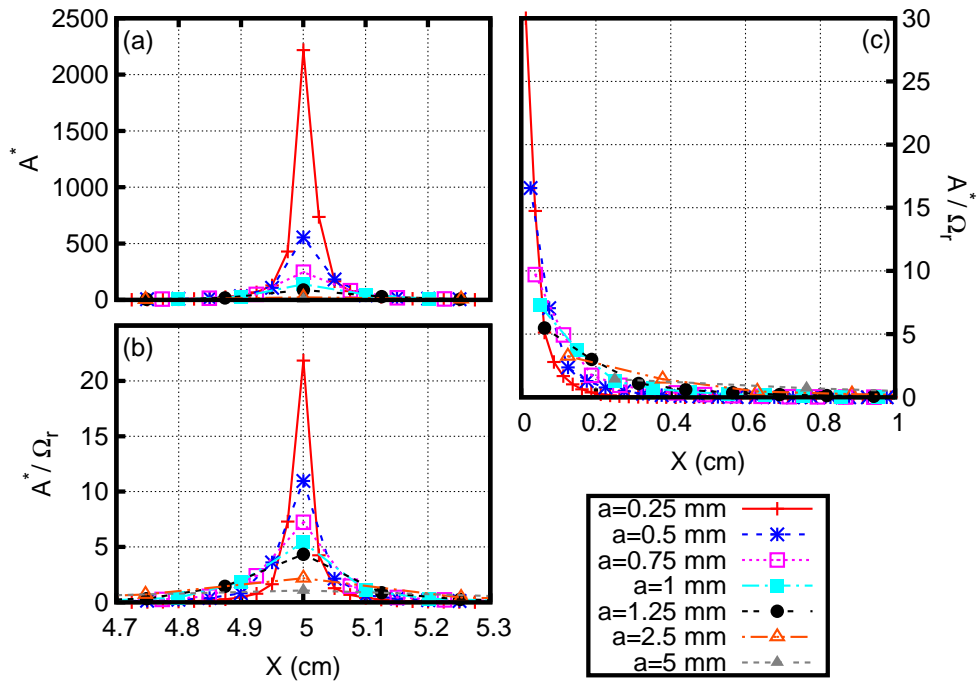


FIGURE 2.28 – Influence de la taille des inclusions : (a) loin du bord avant normalisation, (b) loin du bord après normalisation et (c) près du bord après normalisation.

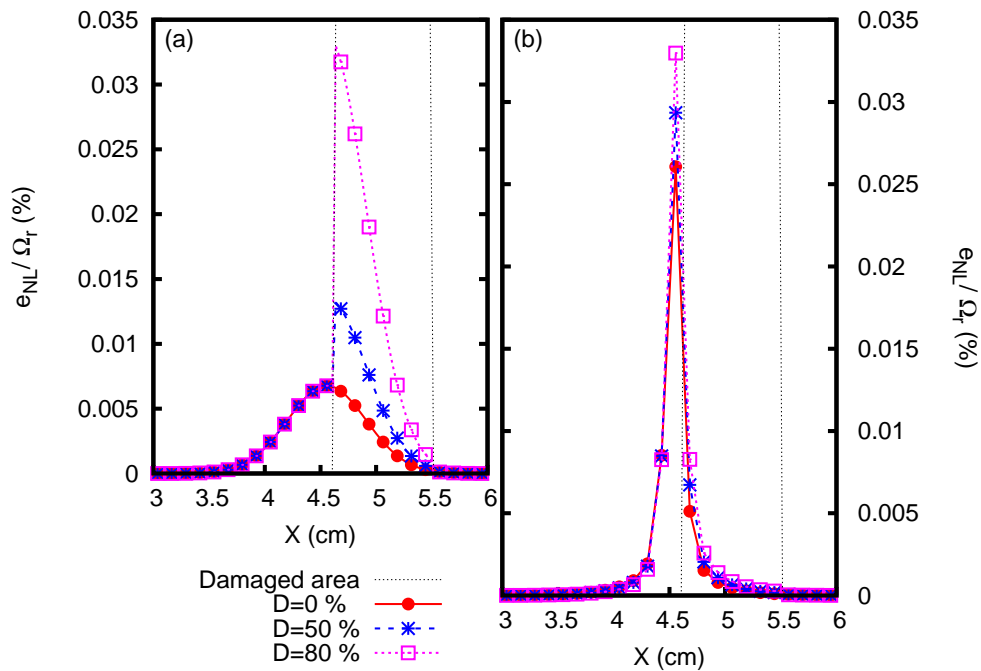


FIGURE 2.29 – Réponse à proximité d'une zone endommagée avec la formulation originale (a) et la nouvelle formation basée sur les interactions (b).

2.4.2 Formulation finale

L'endommagement est supposé isotrope. Les effets de température et les effets différés sont négligés. L'endommagement est une fonction de l'extension tensile au sein du matériau, défini localement par la déformation effective (équation 2.23). L'évolution de l'endommagement est une fonction de la déformation non-locale au travers d'une variable d'histoire suivant la méthode proposée par Mazars (1986) et est gouvernée par les conditions de Kuhn-Tucker. Enfin la taille de l'inclusion est adaptée à proximité des bords et au fur et à mesure de l'endommagement de telle sorte que les effets de bord et d'écran discutés auparavant soit respectés. La formulation finale s'écrit⁸ :

$$\sigma = (1 - D)\mathbb{C} : \varepsilon \quad (2.26)$$

$$\varepsilon_{eq} = \sqrt{\sum_{i \in \llbracket 1,3 \rrbracket} \langle \varepsilon_i \rangle_+^2} \quad (2.27)$$

$$\bar{\varepsilon}_{eq}(x) = \frac{1}{\Omega_r} \int_{\Omega} \psi(x, \xi) \varepsilon_{eq}(\xi) d\xi \quad (2.28)$$

$$\psi(x, \xi) \equiv A^*(x, \xi, a) = \frac{A(x, \xi, \varepsilon^*, a)}{\|\varepsilon^*\|} \equiv \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^3 |\varepsilon_i|^2}}{\|\varepsilon^*\|} \quad (2.29)$$

$$\Omega_r = \int_{\Omega} A_0^*(x, \xi, a) d\xi \quad (2.30)$$

$$D(h, x) = \left[1 - (1 - A) \frac{\varepsilon_{D_0}}{h(x)} - A e^{(-B(h(x) - \varepsilon_{D_0}))} \right] \quad (2.31)$$

$$\Gamma(\varepsilon, h) = \bar{\varepsilon}_{eq}(\varepsilon) - h, \quad \Gamma(\varepsilon, h) \leq 0, \quad \dot{h} \geq 0, \quad \dot{h} \Gamma(\varepsilon, h) = 0 \quad (2.32)$$

$$h = \max(\varepsilon_{D_0}, \max(\bar{\varepsilon}_{eq})) \quad (2.33)$$

$$a(x) = \min(a_0 \sqrt{1 - D(x)}, d(x)) \quad (2.34)$$

2.4.3 Application à l'étude de la rupture dynamique d'une barre en traction

On considère ici le cas unidimensionnel de la rupture d'une barre en traction. Si le problème mécanique est traité comme étant 1D, la reconstruction des interactions est toujours réalisée au travers d'un problème 2D comme dans la section précédente. La barre est soumise à ses deux extrémités à deux ondes de traction constantes qui propagent vers le centre en régime élastique (figure 2.30). Lorsque les deux ondes de déformation se rencontrent au centre, leur amplitude est doublée et le matériau entre dans son régime adoucissant soudainement et la rupture se produit. Lors de ces simulations numériques 1D en dynamique, l'intégration en temps est explicite avec un pas de temps correspondant au pas de temps critique. A chaque pas de temps, les nouvelles fonctions poids basées sur les interactions sont reconstruites en utilisant la formulation finale présentée à l'équation 2.26 avec une taille d'inclusion variable. Ainsi à chaque pas de temps le champs d'endommagement est projeté sur un maillage 2D consistant en des éléments rectangulaires à 4 noeuds et à 4 points d'intégration permettant la reconstruction des fonctions poids (les inclusions ne sont de ce fait pas explicitement maillées mais représentées par un ensemble de point de Gauss). Ces fonctions poids sont ensuite re-projetées sur le maillage 1D où les quantités mécaniques sont estimées. Les paramètres de cet essai numérique sont collectés dans le tableau 2.6.

8. voir Rojas-Solano et al. (2013) pour plus de détails

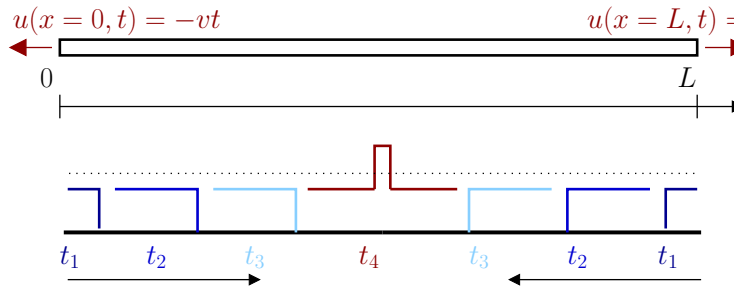


FIGURE 2.30 – Rupture dynamique d’une barre en traction : description du test et évolution temporelle de l’amplitude des déformations le long de la barre.

TABLE 2.6 – Rupture dynamique d’une barre en traction : paramètres de l’essai numérique.

Parameter	L	E	ρ	lc	a_0	ε_{D_0}	α_t	A_t	B_t	α_c
Unit	cm	GPa	kgm^{-3}	cm	cm	–	–	–	–	–
Value	8	32	2,500	2	0.5	10^{-4}	1	1	20,000	0

Au cours de l’endommagement, l’ouverture de fissure peut être estimée en utilisant la méthode proposée par Dufour et al. (2008, 2012). Le profil de déformation non-local est comparé à un profil idéal correspondant à la régularisation d’une distribution de déformation correspondant à une discontinuité forte (équation 2.36). La comparaison, c’est à dire la distance entre les deux profils, est un critère de performance permettant de savoir si le profil de déformation est proche d’une fissure réelle ou non. Lors de cette comparaison, les quantités non-locales sont estimées à l’aide d’une fonction de poids gaussienne constante.

$$\Delta(x) = \frac{\int_{\Omega} \|\bar{\varepsilon}_{sd}(x, s) - \bar{\varepsilon}_{eq}(x)\| ds}{\int_{\Omega} \bar{\varepsilon}_{eq}(s) ds} \quad (2.35)$$

$$\bar{\varepsilon}_{sd}(x, s) = \frac{[U](x)\psi_0(x, s)}{\Omega_r(s)}, \quad [U](x) = \frac{\bar{\varepsilon}(x)\Omega_r(x)}{\psi_0(x, x)}$$

La figure 2.31.a montre l’évolution de la distance entre les deux profils pour la formulation originale et la nouvelle formulation. Avec le nouveau modèle, cette distance tend rapidement vers 0, ce qui signifie qu’à la limite d’une macrofissure complètement formée, le modèle fournit une description consistante de la distribution de déformation. Ce n’est pas le cas avec la formulation classique où une distance non nulle est obtenue, signifiant que la distribution de déformation ne permet pas d’atteindre celle d’une discontinuité forte correspondant à une macrofissure. Pour une telle modélisation 1D et en considérant que l’ouverture de fissure est répartie entièrement dans l’élément qui contient la discontinuité une fois la rupture complète atteinte, cette ouverture de fissure doit être égale à la déformation multipliée par la taille de l’élément (équation 2.36). Ainsi après la rupture complète de la barre, la déformation dans l’élément central doit être proportionnelle à la discontinuité de déplacement et doit évoluer en proportion inverse de la taille de l’élément :

$$[U](x) \approx \varepsilon h = \text{constant} \quad (2.36)$$

La figure 2.31.b montre que c'est effectivement le cas pour la nouvelle formulation mais que ce n'est pas le cas pour la formulation originale. Avec la nouvelle formulation, la déformation en fonction de la taille de l'élément adimensionnée suit une droite dans un graphe logarithmique. De plus, la pente de la droite est cohérente avec l'estimation de l'ouverture de fissure. Avec le nouveau modèle basé sur les interactions, une déviation est observée lorsque la taille de l'élément est proche de la taille de l'inclusion. Dans ce cas, la taille de l'élément fini n'est pas assez fine pour estimer les interactions précisément, il faut plusieurs éléments au sein d'une inclusion.

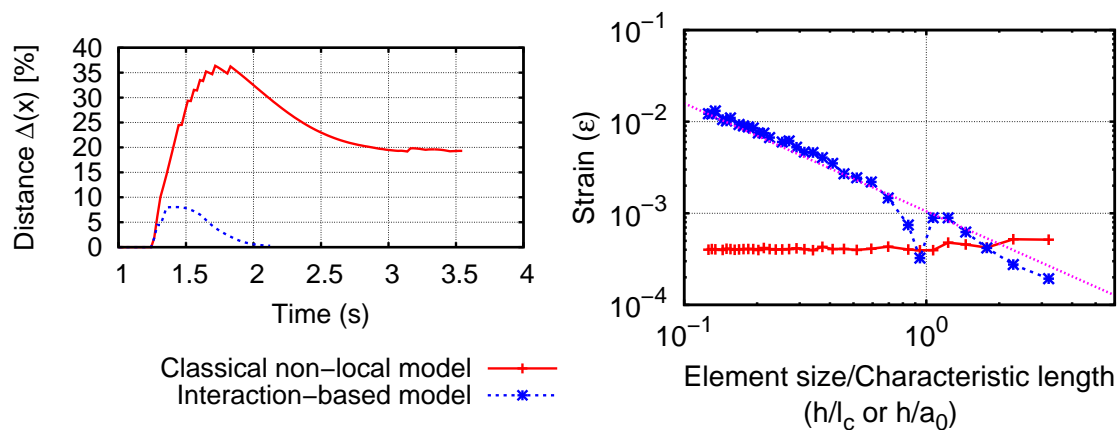


FIGURE 2.31 – Rupture dynamique d'une barre en traction : (a) distance entre l'ouverture de fissure estimée et celle correspondant à un profil idéal d'une discontinuité forte ; (b) déformation dans l'élément central fissuré en fonction de la taille des éléments adimensionnée à rupture complète.

2.4.4 Application à l'étude de l'écaillage

On considère ici un nouveau cas unidimensionnel pour tester la réponse du nouveau modèle près d'un bord. Cet exemple 1D consiste en un essai d'écaillage dynamique basé sur l'essai au barre de Hopkinson développé à la base par Kolsky (1949) pour la caractérisation du comportement dynamique des matériaux mais souvent adapté pour réaliser des essais de rupture dynamique (Grégoire et al., 2007, 2009). Un impacteur génère une onde de compression créneau qui propage le long de la barre entrante dans un régime linéaire élastique. Lorsque cette onde de compression se réfléchit à l'extrémité libre de la barre, elle est convertie en une onde de traction et ajoutée à l'onde de compression incidente (voir figure 2.32 et tableau 2.7). L'onde résultante reste égale à zéro jusqu'à ce que l'onde de traction atteigne une distance au bord égale à la moitié de la longueur du créneau initial. La rupture est initiée à ce moment si l'amplitude de l'onde résultante est supérieure à la résistance matérielle en traction. Une écaille est donc créée à une distance bien contrôlée du bord qui dépend uniquement de la durée du créneau de compression initial. Pour toutes les études numériques, le pas de temps est choisi égal au pas de temps critique correspondant à la taille de l'élément.

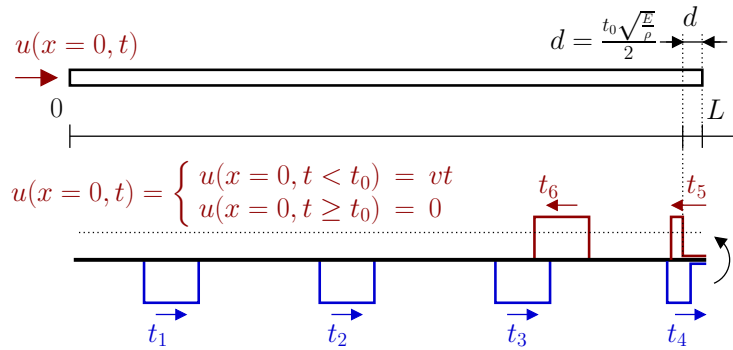


FIGURE 2.32 – Écaillage dynamique : paramètres de l’essai numérique.

TABLE 2.7 – Rupture dynamique d’une barre en traction : paramètres de l’essai numérique.

Parameter	L	t_0	v	E	ρ	lc	a_0	ε_{D_0}	α_t	A_t	B_t	α_c
Unit	cm	s	cms ⁻¹	MPa	kgm ⁻³	cm	cm	–	–	–	–	–
Value	20	2	1.5	1	1	4	4	1	1	1	2	0

La figure 2.33 montre que l’écaillage est mieux décrit avec le nouveau modèle basé sur les interactions puisque la position de l’écaillage est prédite à l’intérieur de la barre alors le modèle original prédit un endommagement maximum exactement au bord, ce qui n’est pas acceptable physiquement.

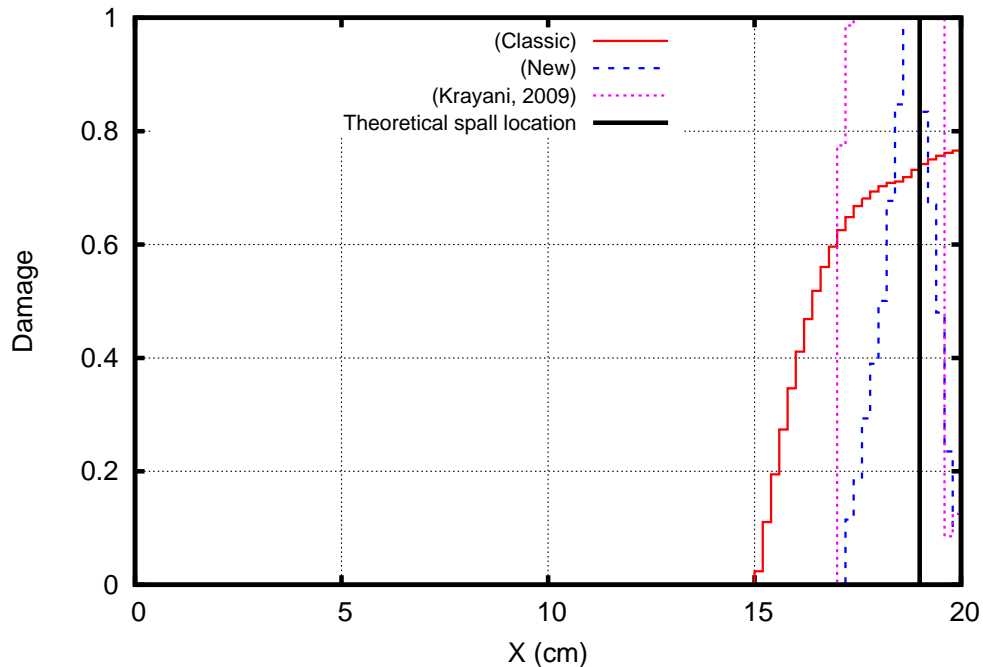


FIGURE 2.33 – Écaillage dynamique : répartition de l’endommagement le long de la barre.

2.5 Conclusion

Différentes actions ont été entreprises dans le but de préciser le comportement mécanique à la rupture de la phase solide des matériaux poreux peu perméable, au comportement quasi-fragile. La plupart des développements ont été réalisés sur le béton, considéré comme un matériau poreux artificiel modèle, mais la même méthodologie pourrait s'appliquer à des roches naturelles dans un contexte géomécanique.

Des essais de flexions trois points ont été réalisés afin de construire une base de données expérimentales permettant la validation de modèles numériques. Pour étudier à la fois les effets d'échelles et les effets de bords, quatre tailles d'éprouvettes différentes (hauteurs (50, 100, 200, 400) mm) et différentes géométries de pré-entailles (éprouvette entaillée à la moitié, au cinquième ou non-entaillée) ont été testées. Pour caractériser le processus de fissuration de façon globale, des courbes forces/ouverture d'entaille (CMOD) et des courbes forces/déflexion ont été acquises. Les essais ont été pilotés en ouverture d'entaille pour pouvoir étudier la partie adoucissante post-pic. Même si ces résultats peuvent permettre la validation de lois d'effet d'échelle en comparant les valeurs aux pics, c'est réellement cette partie adoucissante post-pic qui est discriminante pour tester la validité de modèles numériques. Pour caractériser le processus de fissuration à l'échelle locale, des capteurs acoustiques ont été utilisés pour localiser les lieux d'endommagement et ainsi caractériser la cinétique d'évolution de la zone d'élaboration, siège de la microfissuration.

Un modèle numérique mésoscopique a également été développé et utilisé afin d'étudier la cinétique d'évolution de cette zone d'élaboration (FPZ). Pour s'assurer que les résultats fournis par le modèle étaient physiquement fondés, plusieurs comparaisons avec notre base de données expérimentales ont été réalisées. Des comparaisons en terme de courbes force/CMOD ont montré que le modèle mésoscopique était représentatif du processus global de fissuration pour toutes les tailles et toutes les géométries d'entailles testées. Des comparaisons en terme de carte d'énergie dissipée, d'histogramme de distances relatives entre points endommagés et d'analyse du processus de localisation à l'aide de fonctions de Ripley, ont montré que le modèle mésoscopique était également représentatif du processus local de fissuration.

Dans un objectif de calculs de structures ou de simulations de réservoirs géologiques, l'échelle mésoscopique n'est pas l'échelle de modélisation pertinente. Même si les performances des moyens de calcul croissent de façon exponentielle, il n'est pas raisonnable de vouloir représenter explicitement des hétérogénéités de l'ordre de quelques millimètres ou centimètres pour prédire la réponse globale d'une structure de plusieurs dizaines de mètres jusqu'au kilomètre. Ainsi il est toujours nécessaire d'améliorer la représentativité des modèles macroscopiques pour la prédiction de la rupture des matériaux quasi-fragiles. Les modèles non-locaux, permettant de régulariser le problème numérique en s'affranchissant des problèmes de localisation et de dépendances aux maillages, semblent être les meilleurs candidats. Il a été montré que les modèles non-locaux classiques, à longueur interne constante, ont plusieurs limitations et ne sont pas représentatifs des effets d'échelle ou des effets de bords. Afin de préciser la forme et surtout l'évolution au cours de l'endommagement de la fonction poids à introduire dans un modèle non-local pour en améliorer la représentativité, un nouveau modèle non-local intégral a été développé où la fonction poids n'est pas choisie a priori mais reconstruite a posteriori à partir des interactions non-locales qui apparaissent et évoluent au fur et à mesure de la rupture et de l'endommagement de la structure. Des cas tests académiques unidimensionnels ont montré que le nouveau modèle non-local intégral ainsi reconstruit ne souffre pas des mêmes limitations que celles observées pour les modèles non-locaux classiques. Des résultats préliminaires de modélisation des essais de flexion 3 points sont prometteurs.

2.6 Bibliographie du chapitre

- Bažant, Z. P., Le, J.-l., Hoover, C. G., 2010. Nonlocal boundary layer (NBL) model : overcoming boundary condition problems in strength statistics and fracture analysis of quasibrittle materials. In : Fracture Mechanics of Concrete and Concrete Structures—Recent Advances in Fracture Mechanics of Concrete (Proc., FraMCoS-7, 7th Int. Conf. held in Jeju, Korea, plenary lecture), B.-H. Oh, ed., publ. by Korea Concrete Institute, Seoul. pp. 135–143.
- Bažant, Z., Le, J., Hoover, C., 2010. Nonlocal boundary layer (NBL) model : overcoming boundary condition problems in strength statistics and fracture analysis of quasibrittle materials. In : Proc., FraMCoS-7, Korea. pp. 135–143.
- Bazant, Z. P., Kim, J.-K., 1984. Size effect in shear failure of longitudinally reinforced beams. *ACI Journal* 81, 456–468.
- Bazant, Z. P., Planas, J., 1998. Fracture and size effect in concrete and other quasibrittle materials. CRC press.
- Bažant, Z. P., Yu, Q., 2009. Universal size effect law and effect of crack depth on quasi-brittle structure strength. *Journal of engineering mechanics* 135 (2), 78–84.
- Carpinteri, A., 1994. Fractal nature of material microstructure and size effects on apparent mechanical properties. *Mechanics of Materials* 18 (2), 89–101.
- Delaplace, A., Pijaudier-Cabot, G., Roux, S., 1996. Progressive damage in discrete models and consequences on continuum modelling. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 44 (1), 99–136.
- Delaplace, a., Roux, S., Pijaudier-Cabot, G., May 2003. Study of avalanches during the fracture of discrete models. *Engineering Fracture Mechanics* 70 (7-8), 943–955.
- Diggle, P. J., Chetwynd, A. G., 1991. Second-Order Analysis of Spatial Clustering for Inhomogeneous Populations. *Biometrics* 47 (3), 1155–1163.
- Dixon, P. M., 2002. Ripley’s K function. In : El-shaarawi, A. H., Piegorsch, W. W. (Eds.), Encyclopedia of Environmetrics, volume 3. Vol. 3. John Wiley & Sons, Ltd., Chichester, pp. 1796–1803.
- Dufour, F., Legrain, G., Pijaudier-Cabot, G., Huerta, A., 2012. Estimation of crack opening from a two-dimensional continuum-based finite element computation. *Int J Numer Anal Met* 36 (16), 1813–1830.
- Dufour, F., Pijaudier-cabot, G., Choinska, M., Huerta, A., 2008. Extraction of a crack opening from a continuous approach using regularized damage models. *Computers and Concrete* 5 (4), 375–388.
- Duncan, R. P., 1993. Flood Disturbance and the Coexistence of Species in a Lowland Podocarp Forest, South Westland, New Zealand Author(s) :. *Journal of Ecology* 81 (3), 403–416.
- Fahy, C., Gallipoli, D., Grassl, P., 2011. On the Mesh Dependence of Lattice Models for Analysing Concrete Fracture. In : UK Conference of the Association For Computational Mechanics in Engineering. Edinburgh, p. 4.
- Giry, C., Dufour, F., Mazars, J., Dec. 2011. Stress-based nonlocal damage model. *International Journal of Solids and Structures* 48 (25-26), 3431–3443.

-
- Grassl, P., Grégoire, D., Rojas Solano, L., Pijaudier-Cabot, G., Jun. 2012. Meso-scale modelling of the size effect on the fracture process zone of concrete. *International Journal of Solids and Structures* 49 (13), 1818–1827.
- Grassl, P., Jirásek, M., Apr. 2010. Meso-scale approach to modelling the fracture process zone of concrete subjected to uniaxial tension. *International Journal of Solids and Structures* 47 (7-8), 957–968.
- Grégoire, D., Maigre, H., Combescure, A., Sep. 2009. New experimental and numerical techniques to study the arrest and the restart of a crack under impact in transparent materials. *International Journal of Solids and Structures* 46 (18-19), 3480–3491.
- Grégoire, D., Maigre, H., Réthoré, J., Combescure, A., Oct. 2007. Dynamic crack propagation under mixed-mode loading – Comparison between experiments and X-FEM simulations. *International Journal of Solids and Structures* 44 (20), 6517–6534.
- Grégoire, D., Rojas-Solano, L., Lefort, V., Grassl, P., Pijaudier-Cabot, G., 2014a. Size and Boundary Effects During Failure in Quasi-brittle Materials : Experimental and Numerical Investigations. *Procedia Materials Science* 3, 1269–1278.
- Grégoire, D., Rojas-Solano, L. B., Lefort, V., Grassl, P., Saliba, J., Regoin, J.-p., Loukili, A., Pijaudier-Cabot, G., 2014b. Mesoscale analysis of failure in quasi-brittle materials : comparison between lattice model and acoustic emission data. *International Journal of Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* submitted, 1–29.
- Grégoire, D., Rojas-Solano, L. B., Pijaudier-cabot, G., 2012. Continuum to discontinuum transition during failure in non-local damage models. *International Journal for Multiscale Computational Engineering* 10.1615/In.
- Grégoire, D., Rojas-Solano, L. B., Pijaudier-Cabot, G., 2013. Failure and size effect for notched and unnotched concrete beams. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*.
- Kolsky, H., 1949. An investigation of the mechanical properties of material at a very high rate of loading. *Proceedings of the Physical Society* B62, 676–700.
- Krayani, A., Pijaudier-Cabot, G., Dufour, F., Sep. 2009. Boundary effect on weight function in nonlocal damage model. *Engineering Fracture Mechanics* 76 (14), 2217–2231.
- Landis, E., Baillon, L., 2002. Experiments to Relate Acoustic Emission Energy to Fracture Energy of Concrete. *Journal of Engineering Mechanics* 128 (6), 698–702.
- Mazars, J., 1986. A description of micro-and macroscale damage of concrete structures. *Eng Fract Mech* 25 (5-6), 729–737.
- Mura, T., 1987. Micromechanics of defects in solids. Vol. 3. Springer.
- Pastor, J., Guinea, G., Planas, J., Elices, M., 1995. Nueva expresión del factor de intensidad de tensiones para la probeta de flexión en tres puntos. In : *Anales de Mecánica de la Fractura*. Vol. 12. pp. 85–90.
- Peerlings, R., Nov. 2001. A critical comparison of nonlocal and gradient-enhanced softening continua. *International Journal of Solids and Structures* 38 (44-45), 7723–7746.

-
- Peerlings, R., De Borst, R., Brekelmans, W., De Vree, J., Spee, I., 1996. Some observations on localisation in non-local and gradient damage models. *European Journal of Mechanics - A/Solids* 15 (6), 937–953.
- Pijaudier-Cabot, G., Bazant, Z. P., 1987. Nonlocal Damage Theory. *Journal of Engineering Mechanics* 113 (10), 1512–1533.
- Pijaudier-Cabot, G., Rojas-Solano, L. B., Grégoire, D., 2010. Endommagement, effets d'échelle, fissuration et perméabilité des matériaux quasi-fragiles. In : *Matériaux 2010, Nantes*. Vol. 76.
- Ripley, B. . D. ., 1977. Modelling Spatial Patterns. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)* 39 (2), 172–212.
- Rojas-Solano, L. B., 2012. Endommagement non-local, interactions et effets d'échelle. Ph.D. thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour.
- Rojas-Solano, L. B., Grégoire, D., Pijaudier-cabot, G., 2013. Interaction-based non-local damage model for failure in quasi-brittle materials. *Mechanics Research Communications* 54, 56–62.
- Simone, A., Askes, H., Sluys, L. J., Jan. 2004. Incorrect initiation and propagation of failure in non-local and gradient-enhanced media. *International Journal of Solids and Structures* 41 (2), 351–363.
- Stamp, N. E., Lucas, J. R., 1990. Spatial Patterns and Dispersal Distances of Explosively Dispersing Plants in Florida Sandhill Vegetation. *Journal of Ecology* 78 (3), 589–600.
- Tordesillas, A., Pucilowski, S., Sibille, L., Nicot, F., Darve, F., Sep. 2012. Multiscale characterisation of diffuse granular failure. *Philosophical Magazine* (September), 1–41.
- van Vliet, M., Jan. 2000. Experimental investigation of size effect in concrete and sandstone under uniaxial tension. *Engineering Fracture Mechanics* 65 (2-3), 165–188.
- van Vliet, M. R., van Mier, J. G., 2000. Experimental investigation of size effect in concrete and sandstone under uniaxial tension. *Engineering Fracture Mechanics* 65 (2), 165–188.

Chapitre 3

Couplage endommagement/perméabilité dans les milieux mesoporeux

Sommaire

3.1	Introduction	54
3.1.1	Cadre de travail	54
3.1.2	Contexte	54
3.1.3	Verrous scientifiques	54
3.1.4	Bilan des actions de recherche réalisées	56
3.2	Prédiction de perméabilités, intrinsèque et apparente, à partir d'une mesure de distribution tailles de pore	57
3.2.1	Assemblage d'un réseau de pore hiérarchique et aléatoire	57
3.2.2	Estimation de la perméabilité apparente	58
3.3	Validation par comparaisons expérimentales	60
3.3.1	Matériau, échantillon et procédure expérimentale	60
3.3.2	Mesures expérimentales	61
3.3.3	Comparaisons entre les résultats expérimentaux et les prédictions du modèle	63
3.3.4	Influence du type de gaz utilisé	63
3.4	Étude de la sélectivité naturelle d'un milieu poreux vis à vis d'un mélange de gaz donné	65
3.4.1	Sélectivité dans un capillaire simple	65
3.4.2	Sélectivité dans un milieu poreux et premiers résultats expérimentaux	69
3.5	Conclusion	70
3.6	Bibliographie du chapitre	70

3.1 Introduction

3.1.1 Cadre de travail

Les travaux sur ce thème ont été effectués en collaboration avec Fadi Khaddour dans le cadre de sa thèse de doctorat (Khaddour, 2014)¹ financée par le projet ERC Failflow, par le projet CEPAGE de la région Aquitaine, par le Ministère Syrien de l'Enseignement Supérieur et l'Agglomération Côte Basque-Adour (ACBA)². Les observations et analyses effectuées ainsi que les méthodes développées autour de ce thème ont été principalement réalisées sur du mortier, analogue de roche naturelle et considéré comme un matériau quasi-fragile artificiel modèle. Cependant la même méthodologie pourrait s'appliquer directement à des roches naturelles.

3.1.2 Contexte

Le but de cette partie est de permettre une meilleure compréhension des liens entre endommagement, rupture et propriétés de transport dans les milieux poreux. Les contextes industriels en Génie Pétrolier concernent le développement de nouvelles techniques d'extraction, alternatives à la fracturation hydraulique, dans des réservoirs à très faible perméabilité (Tight gas reservoir – TGR). Les Tight Gas Reservoirs (TGR) sont des milieux poreux à très faible perméabilité contenant des hydrocarbures. Cette caractéristique les rend difficiles à exploiter, d'autant plus que les fluides imbibant sont multiphasiques et éventuellement réactifs avec la phase solide. Bien qu'encore peu exploités, les Tight Gas Reservoirs représentent un potentiel en gaz naturel équivalent à celui des ressources classiques. La stimulation des procédés d'extraction repose principalement sur les méthodes de fracturation du milieu destinées à accroître sa perméabilité. Le processus usuel de fracturation hydraulique est peu efficace car la production subit une diminution très rapide au court du temps. La raison de cette diminution repose sur la conjonction d'un milieu très peu perméable avec un petit nombre de fissures de grande longueur rendant accessible à un gradient de pression (naturel et nécessaire à l'extraction) peu de fluide. Une nouvelle technique de fracturation électrique a été développée au Laboratoire des Fluides Complexes et leurs Réservoirs dans le cadre d'une collaboration avec le groupe TOTAL (Chen, 2010; Chen et al., 2012). Le travail présenté s'inscrit dans une meilleure compréhension des principes guidant le développement de cette technique, c'est à dire une meilleure compréhension du couplage entre la fracturation, la microfissuration et l'évolution de la perméabilité et de la porosité d'un milieu quasi-fragile.

Plus généralement, l'étude concerne tous les domaines où la maîtrise de la perméabilité du milieu poreux considéré et la connaissance de son évolution avec l'endommagement ou la fissuration sont de la première importance, que l'on cherche à garantir une (faible) perméabilité visée comme dans les ouvrages de stockage géologique, la construction durable ou la sûreté nucléaire ou que l'on cherche au contraire à l'augmenter comme dans l'exploitation responsable des ressources non-conventionnelles ou en géothermie profonde.

3.1.3 Verrous scientifiques

Depuis de nombreuses années, les auteurs ont cherché des modèles prédictifs analytiques et numériques de la perméabilité des milieux poreux. La représentation du milieu poreux par un assemblage de capillaires a été beaucoup utilisée dans la littérature. La forme la plus simple en est l'expression de

1. Consulter en ligne

2. Les différents projets et contrats de recherche sont détaillés en partie A.5.2.

Kozeny-carman (Kozeny, 1927; Carman, 1937), qui est basée sur le concept d'un diamètre hydraulique (i.e. longueur caractéristique du réseau en supposant les pores cylindriques, parallèles et de tailles identiques). Puis une modification a été faite en prenant en compte un assemblage de pores de diamètre différent d'un pore à l'autre. (Garcia-Bengochea et al. 1979) ont modélisé le milieu poreux comme un assemblage de capillaires parallèles et cylindriques de diamètre variable d'un pore à l'autre. Chaque capillaire a le même diamètre sur toute sa longueur. La représentativité de chaque classe de pores est déterminée par la distribution de tailles de pore. Ce modèle a donné une meilleure corrélation que le modèle de diamètre hydraulique. D'autres auteurs ont développé le modèle de pores parallèles en autorisant l'interaction entre les pores parallèles (Dong et al., 2006; Watanabe and Flury, 2008). Katz and Thompson, 1986 proposent de calculer la perméabilité à partir de la conductivité électrique du matériau poreux au travers d'un rayon de pores critique.

D'autres auteurs ont considéré le milieu poreux comme un assemblage de pores en parallèle (diamètre constant) ou en série (diamètre variable). Childs and Collis-George (1950) ont proposé un modèle statistique. Plus tard, Millington and Quirk (1961) ont modifié ce modèle. Leurs hypothèses sont que le milieu poreux contient des pores de plusieurs diamètres distribués aléatoirement dans l'espace. La quantité totale de l'écoulement à travers la section dépend statistiquement du nombre de paires de pores interconnectés et de leurs configurations. La quantité de l'écoulement dans chaque paire de pores interconnectés est déterminée par la taille la plus petite entre les deux pores. Plus récemment, Bartley and Ruth (1999) ont employé un modèle d'assemblage de pores en parallèle et en série afin de caractériser la perméabilité relative dans le cas d'un écoulement diphasique en utilisant une distribution log-normale de tailles de pore. Wong et al. (2012) ont proposé un modèle se servant des surfaces de pores et d'images acquises par SEM. Ainsi, la structure de pore est idéalisée comme un réseau cubique ayant des pores de taille arbitraire. La conductance de chaque pore est calculée à partir de l'approximation de rayon hydraulique. L'orientation des pores est prise en compte par un facteur dans le modèle. Un autre facteur est utilisé pour prendre en compte la variation de diamètre de pores le long de l'axe des pores. Aït-Mokhtar et al. (1999) ont proposé un modèle basé sur une distribution de taille des pores (PSD) modélisée par une distribution log-normale statistique sous l'hypothèse que les pores sont des cylindres parallèles de différents diamètres. Plus tard, Aït-Mokhtar et al. (2002) ont considéré le milieu poreux comme un réseau cubique tridimensionnel avec une distribution bimodale des tailles de pore. Une extension à une distribution de la taille des pores (PSD) multimodale a été proposée par Amiri et al. (2005).

Dans ces différents modèles, la PSD expérimentalement mesurée est tout d'abord idéalisée afin de prédire la perméabilité du milieu. Ici, on propose une stratégie qui permet une estimation directe de la perméabilité à partir des mesures de PSD. Ainsi le couplage entre la perméabilité intrinsèque du matériau et l'endommagement qui induit des microfissures ou des macrofissures est réalisé au travers de l'évolution de la PSD du fait de l'endommagement mécanique.

Préliminairement à cette étude, des essais de fracturation dynamique (Chen, 2010; Maurel et al., 2010; Chen et al., 2012) par chocs électriques ont été réalisés sur des roches artificielles (mortier) ayant des propriétés similaires aux roches présentes dans les TGR. Les perméabilités à l'azote des éprouvettes ont été mesurées avant et après qu'elles aient subies différents chocs électriques. Durant cette étude, l'évolution du squelette poreux a été caractérisée par porosimétrie par intrusion de mercure permettant de reconstruire les courbes de répartition de tailles de pore (PSD – pore size distribution). A partir de ces PSD, un nouveau modèle permettant de déterminer les évolutions de perméabilités suite aux différents chocs électriques est présenté. Ce modèle consiste à représenter le milieu poreux comme un assemblage de pores parallèles dont les diamètres sont directement déduits des courbes de PSD issues

de porosimétrie par intrusion de mercure. La perméabilité intrinsèque est ensuite calculée en associant la loi de Darcy représentant l'écoulement d'un gaz dans un milieu poreux à l'échelle macroscopique et la loi de Poiseuille à l'échelle microscopique.

Cependant dans une volonté d'étendre cette méthodologie aux mélanges de gaz dans un contexte Génie Pétrolier (par exemple CO₂ et CH₄) la première étape est d'être capable de prédire non seulement la perméabilité intrinsèque mais aussi la perméabilité apparente pour un gaz pur. En effet, lors du transport de mélanges, une sélectivité peut apparaître qui n'est pas prise en compte dans un contexte classique d'écoulement de Poiseuille, lorsque les interactions entre les molécules de gaz et les pores ne sont plus négligeables. Dans le cas d'un corps pur, ces interactions entraînent la dépendance bien connu de la perméabilité à la pression (Klinkenberg, 1941). Pour tenir compte de cet effet dans les modèles, la loi de Poiseuille doit être étendue pour prendre en compte l'effet de Knudsen (Kast and Hohenthanner, 2000).

3.1.4 Bilan des actions de recherche réalisées

- A partir d'essais expérimentaux de fracturation dynamique réalisés par Chen et al. (2012), l'évolution du squelette poreux a été caractérisée par porosimétrie par intrusion de mercure permettant de reconstruire les courbes de répartition de tailles de pore. Suivant le type de chargement appliqué, différentes évolutions des familles de pores ont été observées.
Cette action est détaillée dans (Khaddour et al., 2014, **consulter en ligne**).
- Un modèle d'assemblage des pores en parallèle a été développé afin de prédire la perméabilité intrinsèque du matériau directement à l'aide de mesures expérimentales de distribution de tailles de pore par intrusion de mercure. Le modèle a été comparé à des modèles simples, de type Kozeny-Carman, où le milieu poreux ne possède qu'une seule taille de pore et il a été utilisé pour déterminer l'évolution de la perméabilité intrinsèque d'éprouvettes ayant subies différents chocs électriques et donc différents niveaux d'endommagement.
Cette action est détaillée dans (Khaddour et al., 2013, **consulter en ligne**).
- Le modèle a ensuite été étendu pour prendre en compte l'effet de Knudsen afin de prédire la perméabilité apparente du matériau. Dans ce cas, un diamètre de coupure est introduit pour limiter l'influence des pores de grands diamètres sur la perméabilité. De ce fait, ce paramètre doit être identifié par comparaison avec les mesures expérimentales et le modèle perd son caractère prédictif. Cependant, l'identification permet également de déterminer indirectement la tortuosité du milieu.
Cette action est détaillée dans (Khaddour et al., 2014, **consulter en ligne**).
- Afin de s'affranchir du diamètre de coupure et ainsi retrouver un caractère prédictif, un nouveau modèle d'assemblage de pores aléatoire et hiérarchique a été proposé. Chaque pore est discrétisé en petits tronçons qui sont assemblés aléatoirement, du plus grand au plus petit, tout en respectant la PSD mesurée par intrusion mercure. Ainsi, en effectuant une moyenne sur plusieurs tirages aléatoires, on minimise l'influence des pores de grand diamètre qui sont assemblés en série avec les pores de plus petit diamètre. Ce modèle d'assemblage de pores aléatoire et hiérarchique permet de prédire à la fois les perméabilités intrinsèque et apparente du milieu à partir d'une unique mesure de PSD.
Cette action est détaillée dans la partie 3.2.

- Pour valider le caractère prédictif du modèle, une série de mesure expérimentale de perméabilité apparente sous charge a été réalisée pour différent type de gaz purs (N₂, CH₄, He, CO₂). Une très bonne concordance entre les mesures expérimentales et les résultats du modèle est obtenue. Cette action est détaillée dans la partie 3.3.
- Enfin, la sélectivité naturelle du milieu pour un mélange de gaz donné, du fait des interactions fluide/paroi et donc des effets de Knudsen induits différents, a été étudiée. Pour un mélange donné, le modèle est capable de prédire la séparation naturelle produit par une distribution de tailles de pore donnée. Des comparaisons expérimentales ont permis de valider les séparations prédites par le modèle. Cette action est détaillée dans la partie 3.4.

3.2 Prédiction de perméabilités, intrinsèque et apparente, à partir d'une mesure de distribution tailles de pore

3.2.1 Assemblage d'un réseau de pore hiérarchique et aléatoire

On considère ici que la microstructure du milieu poreux consiste en des pores cylindriques de différentes longueurs et diamètres. En supposant que l'espace poral a été caractérisé en terme de distribution de tailles de pore (PSD), par exemple par une technique d'intrusion au mercure, on peut relier, pour chaque taille de pore, la longueur L_i du pore considéré à la fraction volumique mesurée V_{pi} et à son diamètre d_i :

$$L_i = \frac{4V_{pi}}{\pi d_i^2} \quad (3.1)$$

En considérant que le milieu poreux consiste en des pores cylindriques, le matériau poreux lui-même est considéré comme un échantillon cylindrique où l'assemblage aléatoire sera réalisé. La dimension de ce cylindre fictif est relié au volume poral total V_t , qui peut également être caractérisé par intrusion de mercure. On définit alors la longueur du cylindre fictif L_e , sa section S et la longueur critique de l'échantillon L_c , correspondante à la longueur maximal d'un pore pouvant être contenu dans le cylindre, par :

$$L_e = \sqrt[3]{V_t} \quad S = L_e^2 \quad L_c = TL_e \quad \text{où } T \text{ est la tortuosité du milieu.} \quad (3.2)$$

Le réseau hiérarchique aléatoire est réalisé en discrétisant de façon aléatoire chaque longueur de pore L_i en petits incréments de longueur ΔL_i . L'assemblage est réalisé du plus gros pore au plus petit, suivant les mêmes hypothèses que celles utilisées pour déterminer la PSD par intrusion de mercure. Chaque nouveau petit incrément de pore est ainsi soit connecté à un incrément existant de taille plus grande soit placé de telle sorte à créer un nouveau site d'assemblage (voir la figure 3.1). Dès qu'un assemblage percole le cylindre fictif (c'est à dire lorsque la somme des longueurs des incréments de pore atteint la longueur critique de l'échantillon), la perméabilité de cet assemblage est estimée et ajoutée à la perméabilité globale de l'échantillon. Cette assemblage hiérarchique mais aléatoire est réalisé jusqu'à obtenir une convergence de la perméabilité globale ainsi estimée. Une fois ce critère de convergence atteint, la porosité restante est organisée suivant un réseau parallèle de capillaire et sa contribution est également ajoutée à celle de la perméabilité globale de l'échantillon.

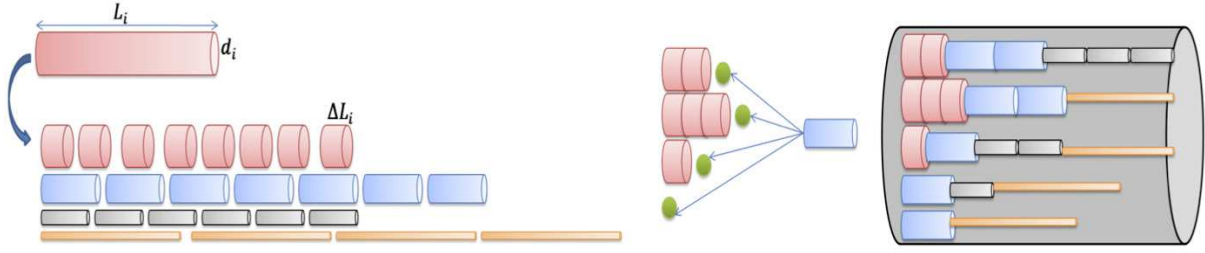


FIGURE 3.1 – Génération du réseau hiérarchique et aléatoire.

3.2.2 Estimation de la perméabilité apparente

Pour un assemblage donné et aléatoire, l'objectif est d'estimer non seulement la perméabilité intrinsèque mais également la perméabilité apparente. La perméabilité apparente est obtenue en combinant la loi de Darcy, qui représente l'écoulement à l'échelle macroscopique, et les lois de Poiseuille et de Knudsen, qui représentent les écoulement à la petite échelle. Cette approche est détaillée dans (Khadour et al., 2014) pour un assemblage parallèle de pores purement déterministe. Elle est résumé ici et adaptée pour un assemblage aléatoire comme décrit en partie 3.2.1.

3.2.2.1 Écoulement de Poiseuille

On considère un pore cylindrique unique de diamètre d_i . Le débit volumique (c'est à dire le volume de fluide par unité de temps) passant au travers de ce pore de longueur L_c est donné par :

$$Q_P^v = \left(\frac{\pi}{128\mu} \right) \left(\frac{P_1^2 - P_2^2}{2P_2} \right) \left(\frac{d_i^4}{L_c} \right) \quad (3.3)$$

où (P_1, P_2) sont les pressions amont et aval respectivement. Q_P^v est le débit volumique estimé à la pression aval et μ est la viscosité dynamique du fluide. Cette expression classique est basée sur l'hypothèse d'écoulement laminaire (Poiseuille, 1840).

3.2.2.2 Écoulement de Knudsen

Dans les macropores ou dans les microfissures de petites tailles, si le libre parcours moyen des molécules de fluides est suffisamment proche de l'espace inter-parois, l'écoulement est alors influencé par les collisions entre les particules de fluide et ces parois. Ainsi l'écoulement ne satisfait plus au régime visqueux de Poiseuille simple mais on observe un glissement sur les parois dû aux chocs particules/parois. Ce glissement se traduit par une dépendance de la perméabilité à la pression du fluide considéré. Dans les micropores, l'effet de ces collisions devient prédominant, le fluide ne peut plus être considéré comme un milieu continu et l'écoulement rentre dans le régime de la diffusion libre moléculaire ou diffusion de Knudsen (Steckelmacher, 1986). Bien entendu, plus que le diamètre du pore, c'est le rapport entre le libre parcours moyen et ce dernier qui est déterminant pour savoir quel type d'écoulement est prédominant. Ce rapport, appelé nombre de Knudsen N_i^{Kn} , est donné par :

$$N_i^{Kn} = \frac{\lambda}{d_i} = \left(\frac{1}{d_i} \right) \left(\frac{RT}{\pi \sqrt{2} d_j^2 N_{Av} P_m} \right) \quad (3.4)$$

où (λ, d_j, P_m) sont respectivement le libre parcours moyen, le diamètre moléculaire et la pression moyenne du gaz considéré et N_{Av} est le nombre d'Avogadro.

3.2. Prédiction de perméabilités, intrinsèque et apparente, à partir d'une mesure de distribution tailles de pore

Quand le nombre de Knudsen est supérieur à un, les interactions entre les parois du pore et les molécules de gaz sont prédominant est l'écoulement fluide est très différent d'un écoulement visqueux de Poiseuille. Le volume de fluide passant dans le pore est alors donné par (Steckelmacher, 1986) :

$$Q_{Kn}^v = \frac{\pi}{12} \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}} \left(\frac{P_1 - P_2}{P_2} \right) \left(\frac{d_i^3}{L_c} \right) \quad (3.5)$$

Dans la zone de transition, définie comme ($0.01 < N_i^{Kn} < 1$), on suppose que le débit volumique au travers d'un pore i du fait d'un gradient de pression est donné par la somme des contributions de l'écoulement visqueux (3.3) et de l'écoulement de Knudsen (3.5) :

$$Q_{tot}^i = Q_P^v + Q_{Kn}^v = \frac{\pi d_i^4}{L_c} \left(\frac{1}{128\mu} + \frac{1}{12d_i} \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}} \frac{1}{P_m} \right) \frac{(P_1 - P_2)P_m}{P_2} \quad (3.6)$$

3.2.2.3 Transfert d'échelle des propriétés de transport pour un assemblage aléatoire de pore

Pour une distribution de tailles de pore donnée (PSD) et donc une reconstruction aléatoire et hiérarchique du réseau poreux donnée, les propriétés de transport sont obtenues en additionnant la contribution des N_{inc}^{tot} capillaires percolants. Chaque capillaire percolant i est composé de $N_{inc}(i)$ incréments de pore de différentes tailles (voir partie 3.2.1). Ainsi le débit volumique total au travers de l'échantillon est donné par :

$$Q_{tot}^v = \frac{(P_1 - P_2)P_m}{P_2} \sum_{i=1}^{N_{inc}^{tot}} \left[\sum_{k=1}^{N_{inc}(i)} \frac{1}{\frac{\pi d_k^4}{\Delta L_k} \left(\frac{1}{128\mu} + \frac{1}{12d_k} \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}} \frac{1}{P_{mk}} \right)} \right]^{-1} \quad (3.7)$$

où P_{mk} , la pression moyenne dans chaque incréments de pore, est déterminée de façon itérative.

3.2.2.4 Écoulement de Darcy à la macro-échelle et identification de la perméabilité apparente

À l'échelle macroscopique, le débit au travers du milieu poreux est décrit par la loi de Darcy (1856) :

$$Q_D^v = \left(\frac{K_a}{\mu} \right) \left(\frac{S}{L_e} \right) \frac{(P_1 - P_2) P_m}{P_2} \quad (3.8)$$

La comparaison des expressions (3.7) et (3.8) permet d'identifier l'expression de la perméabilité apparente K_a ³ :

$$K_a = \frac{\mu L_e}{S} \sum_{i=1}^{N_{inc}^{tot}} \left[\sum_{k=1}^{N_{inc}(i)} \frac{1}{\frac{\pi d_k^4}{\Delta L_k} \left(\frac{1}{128\mu} + \frac{1}{12d_k} \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}} \frac{1}{P_{mk}} \right)} \right]^{-1} \quad (3.9)$$

3. La démarche complète pour obtenir ces différentes expressions est détaillée dans Khaddour (2014)

3.3 Validation par comparaisons expérimentales

3.3.1 Matériau, échantillon et procédure expérimentale

Pour valider le modèle présenté à la partie précédente, des expériences ont été réalisées sur des échantillons de mortier. La composition du mortier est choisie de telle sorte que les propriétés mécaniques et les propriétés de transport du mortier soient analogues de roches typiques de réservoirs non-conventionnels à faible perméabilité (Tight gas reservoirs). Un ratio eau/ciment de 0.7 et un diamètre maximal d'agrégat de 3mm sont ainsi choisis. La composition du mortier est donnée au tableau 3.1.

TABLE 3.1 – Composition du mortier.

Ingredient	Water	Cement	Sand
Quantity (kg/m^3)	243	412	1651

Le mortier est coulé dans des moules d'aluminium (dimensions : 40x60x400mm). Des réservations cylindriques sont créées en insérant des barres métalliques de diamètre 6.5mm dans les moules. Finalement, un carottier est utilisé pour extraire un tube cylindrique de mortier (diamètre extérieur : 24.5mm, diamètre intérieur : 6.5mm, hauteur : 40mm). Les surfaces inférieure et supérieure sont rectifiées à l'aide d'une scie de précision. Avant essai, les éprouvettes sont maintenues 48h dans un four ventilé à 80°C.

La machine d'essai consiste en une presse conventionnelle électro-mécanique couplée à un perméamètre à gaz permettant ainsi de mesurer les évolutions de perméabilité sous charge. Un schéma du dispositif est présenté à la figure 3.2.

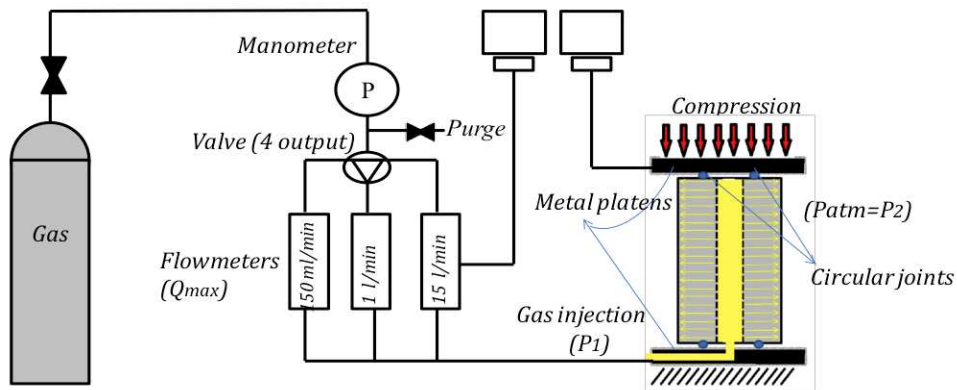


FIGURE 3.2 – Schéma du dispositif de mesure de perméabilité sous charge.

La perméabilité initiale est tout d'abord mesurée. Ensuite, différents cycles de compression sont appliqués pour soumettre le matériau à différents niveaux d'endommagement. Pour chaque niveau d'endommagement, la perméabilité est mesurée sous charge et après déchargement. Après déchargement complet, la partie centrale de l'éprouvette (15mm sur 40mm) est extraite afin de caractériser la distribution de tailles de pore (PSD) par intrusion de mercure. L'intrusion de mercure est une technique de caractérisation irréversible. Ainsi le même échantillon ne peut être caractérisé en PSD et ensuite ré-endommagé. Ainsi les évolutions de PSD avec l'endommagement ont été étudiées à partir de différents échantillons. Cependant, il a été vérifié que la méthode est bien reproductible, que le matériau initial est bien homogène et que la partie centrale des éprouvettes utilisées pour déterminer la PSD est bien représentative de l'échantillon entier.

3.3.2 Mesures expérimentales

La sollicitation de compression est appliquée à l'aide d'une presse électro-mécanique (Zwick Pro-line Z20, maximal force : 20kN). Les essais sont contrôlés en déplacement afin d'éviter des instabilités post-pic. Des cycles successifs de chargement-déchargement ont été réalisés afin de caractériser l'évolution de l'endommagement à partir d'une courbe contrainte-déformation. L'endommagement scalaire D est défini comme la réduction relative du module d'élasticité après déchargement-rechargement. Une courbe typique contrainte-déformation est représentée à la figure 3.3 avec l'évolution correspondante d'endommagement.

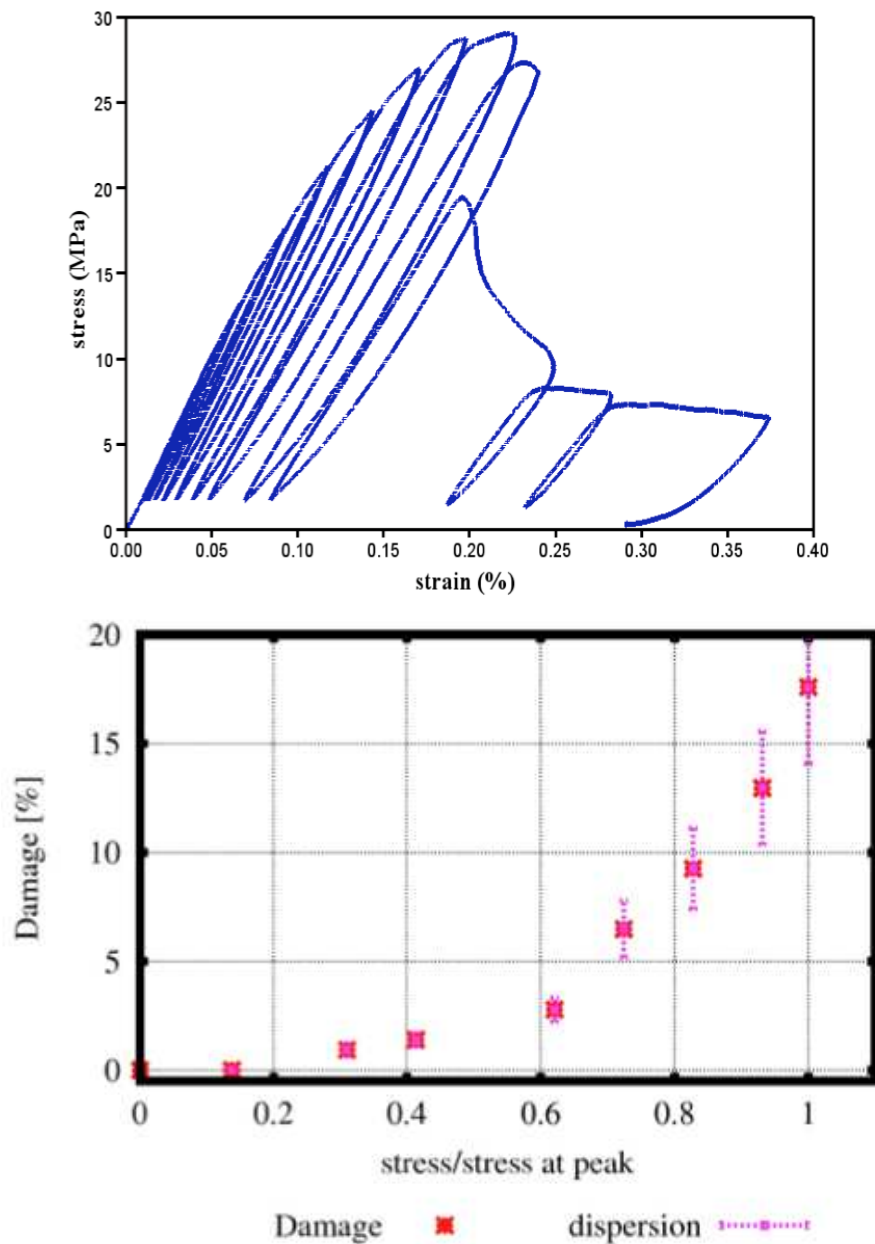


FIGURE 3.3 – Courbe contrainte-déformation et évolution de l'endommagement.

La perméabilité apparente est classiquement mesurée en appliquant un gradient de pression et en mesurant le débit radial au travers du tube en mortier :

$$K_a = \frac{Q_1 \mu P_1}{\pi h (P_1^2 - P_2^2)} \ln \left(\frac{R_2}{R_1} \right) \quad (3.10)$$

où μ est la viscosité dynamique, Q_1 est le débit volumique amont, (h, R_1, R_2) sont respectivement la hauteur, le diamètre intérieur et le diamètre extérieur de l'échantillon et (P_1, P_2) sont les pression amont et aval respectivement. Typiquement P_2 est la pression atmosphérique.

Cette expression de perméabilité contient à la fois les effets de l'écoulement laminaire visqueux et les effets de glissement. Afin de déterminer la perméabilité intrinsèque, l'approche de Klinkenberg (1941) est utilisée :

$$K_a = K_{in} \left(1 + \frac{\beta}{P_m} \right) \quad (3.11)$$

où β est le coefficient de Klinkenberg, K_{in} la perméabilité intrinsèque et P_m la pression moyenne.

Les mesures de PSD sont réalisées par intrusion de mercure (Micromeritics–AutoPore IV). L'analyse est basée sur l'équation de Washburn et les hypothèses (très réductrices) que les pores sont cylindriques et connectés du plus grand au plus petit. Seule la porosité accessible depuis la surface extérieure de l'échantillon est prise en compte. Les effets "bouteille d'encre" et l'influence de la porosité piégée sont limités en effectuant plusieurs cycles d'intrusion de mercure. La figure 3.4 présente les évolutions de PSD au fur et à mesure de l'endommagement. Principalement on observe la croissance de deux familles de pores, l'une autour de $1\mu\text{m}$ et l'autre autour de $10\mu\text{m}$.

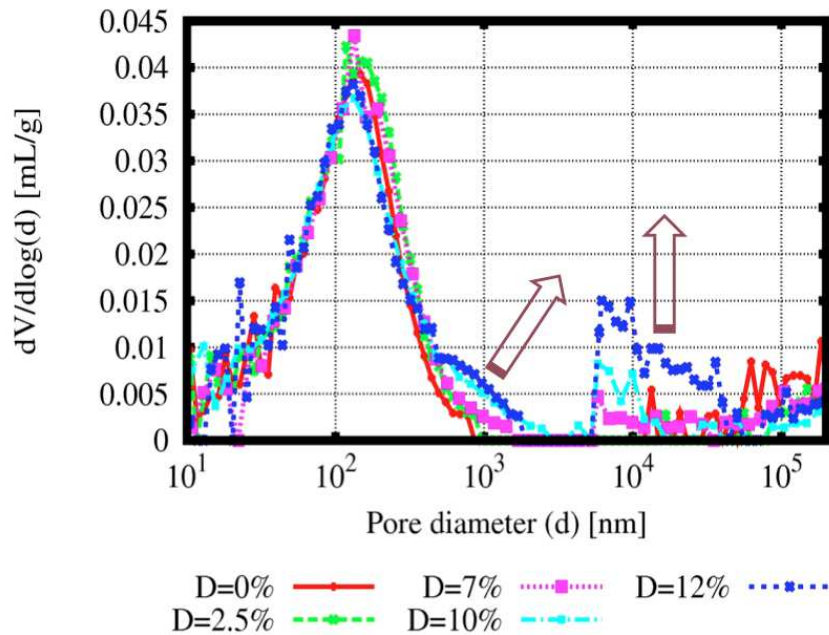


FIGURE 3.4 – Évolution des PSD avec l'endommagement.

3.3.3 Comparaisons entre les résultats expérimentaux et les prédictions du modèle

La figure 3.5 présente une comparaison entre les perméabilités intrinsèques à l'azote mesurées expérimentalement et estimées par le modèle pour un taux d'endommagement variant entre 0% et 12%. On voit que les valeurs estimées par le modèle sont en bonne concordance avec les mesures expérimentales quelque soit le niveau d'endommagement. Il faut remarquer qu'aucun paramètre de tortuosité n'a été introduit ici (elle est considérée égale à 1 pour tous les échantillons). Par ailleurs, on observe que les valeurs estimées par le modèle sont plus proches des mesures expérimentales sous charge que des mesures expérimentales après déchargement. En effet, les mesures de PSD, qui sont la seule donnée d'entrée du modèle, sont mesurées après déchargement. Cependant, l'intrusion de mercure réouvre certainement les microfissures qui étaient refermées après déchargement. Ainsi l'état du réseau poreux caractérisé par intrusion de mercure est certainement plus proche de celui sous charge que de celui après déchargement.

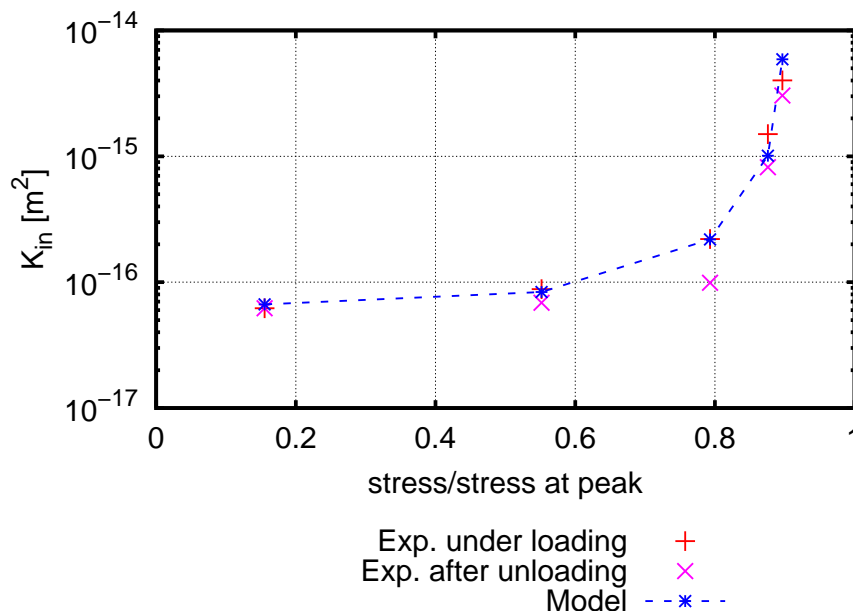


FIGURE 3.5 – Comparaisons des mesures expérimentales et des valeurs estimées par le modèle en terme d'évolution de perméabilité intrinsèque.

La figure 3.6 montre l'évolution de coefficient de Klinkenberg pour les mêmes essais. Ici encore une bonne concordance des mesures expérimentales sous charge et des valeurs estimées à partir du modèle est observée.

3.3.4 Influence du type de gaz utilisé

Puisque des gaz différents ont des tailles de molécules différentes, pour un même milieu poreux, les interactions des molécules avec les parois des pores sont différentes. Ceci doit influencer l'écoulement de Knudsen mais pas l'écoulement visqueux de Poiseuille. Ainsi on doit retrouver des perméabilités apparentes différentes mais une unique perméabilité intrinsèque quelque soit le gaz utilisé. Pour un capillaire unique, le tableau 3.2 présente les diamètres critiques, correspondant au seuil où la contribution de la diffusion de Knudsen est égale à la contribution de l'écoulement visqueux de Poiseuille, pour différents gaz purs étudiés.

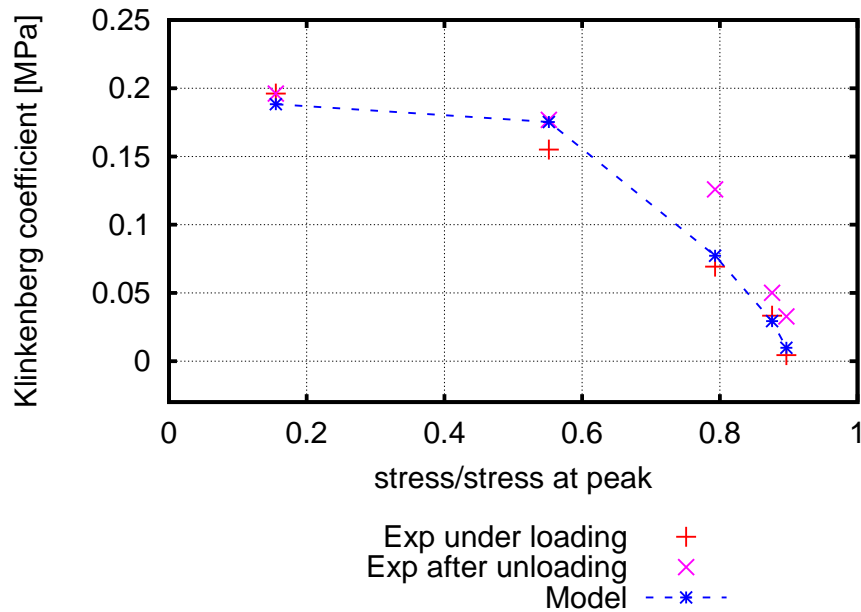


FIGURE 3.6 – Comparaisons des mesures expérimentales et des valeurs estimées par le modèle en terme d'évolution du coefficient de Klinkenberg.

TABLE 3.2 – Diamètre critique correspondant à une contribution équivalente des écoulements de Knudsen et Poiseuille pour un capillaire unique.

Type de gaz	He	N2	CH4	CO2
Diamètre critique (nm)	2600	881	731	591

Pour un échantillon sain, les perméabilités apparentes ont été estimées pour les gaz (N₂, CH₄, CO₂) purs à l'aide du modèle d'assemblage hiérarchique aléatoire et comparées avec des mesures expérimentales. Les résultats sont présentés à la figure 3.7 et concordent bien quelque soit le gaz considéré. Cela montre que la méthode de prédiction de perméabilité apparente basée sur un assemblage hiérarchique aléatoire est robuste puisque la seule donnée d'entrée ici est la PSD de l'échantillon.

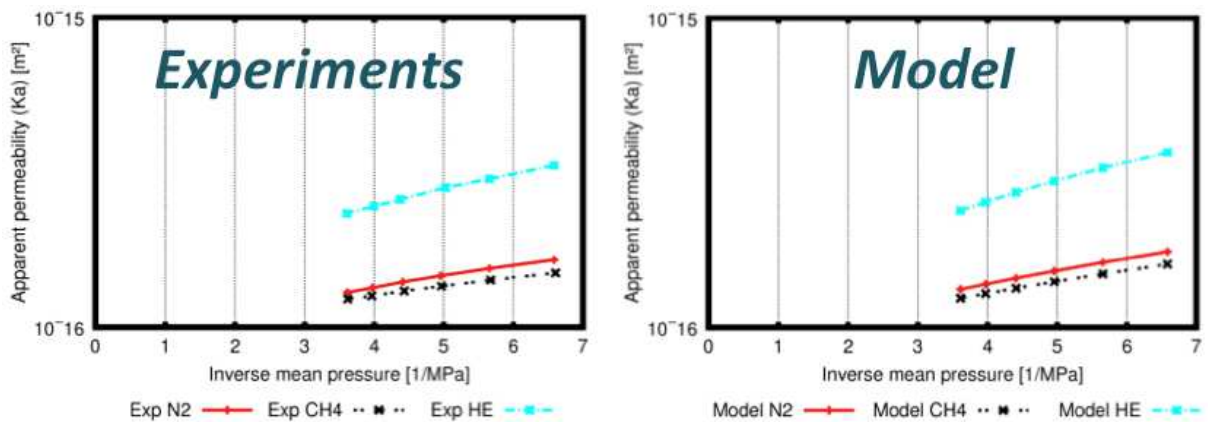


FIGURE 3.7 – Comparaison des perméabilités apparentes estimées et mesurées d'un échantillon sain pour différents gaz purs (N₂, CH₄, CO₂).

3.4 Étude de la sélectivité naturelle d'un milieu poreux vis à vis d'un mélange de gaz donné

3.4.1 Sélectivité dans un capillaire simple

Dans le cas d'un mélange de gaz {A+B}, chaque espèce a des interactions différentes avec les parois du pore du fait de leurs différentes tailles moléculaires. Ainsi, le poids de la contribution de l'écoulement de Knudsen vis à vis de celui de Poiseuille est différent pour les deux espèces. De ce fait une espèce se voit "accélérer" par rapport à l'autre du fait d'un glissement aux parois plus important et le milieu poreux est sélectif vis à vis d'une espèce par rapport à l'autre. Si l'entrée du capillaire est reliée à un réservoir infini contenant un mélange dans une proportion donnée et qu'un gradient de pression est appliqué, le mélange à la sortie n'aura pas la même composition qu'à l'entrée. A la différence d'un filtre moléculaire ou d'une membrane, aucune des deux espèces n'est piégée au sein du milieu poreux, mais la composition change du fait que le milieu n'a pas la même perméabilité apparente vis-à-vis des deux espèces. On considère ici que les interactions entre les deux espèces et les parois des pores sont prépondérantes devant les interactions entre les espèces elles-mêmes et on néglige ces dernières interactions.

3.4.1.1 Écoulement de Poiseuille du mélange

Dans le cas de l'écoulement visqueux de Poiseuille, on considère que le mélange s'écoule comme un gaz homogène équivalent et qu'il n'y a pas de séparation (Kast and Hohenthanner, 2000). Pour un capillaire de diamètre d_i , le débit massique, passant au travers d'un tronçon dx de capillaire, est alors donné par⁴ :

$${}^m_{dx}Q_{\{A+B\}}^P = -C_{\{A+B\}}P \frac{\partial P}{\partial x} = -\frac{M_{\{A+B\}}}{RT} \frac{\pi}{128} \frac{d_i^4}{\mu_{\{A+B\}}} P \frac{\partial P}{\partial x} \quad (3.12)$$

où $M_{\{A+B\}}$ et $\mu_{\{A+B\}}$ sont respectivement la masse molaire et la viscosité dynamique du mélange.

3.4.1.2 Écoulement de Knudsen du mélange

On néglige les interactions entre les espèces et donc on suppose qu'elles s'écoulent séparément et indépendamment au sein du capillaire. Ainsi la vitesse de chaque particule est calculée comme dans le cas d'un gaz pur où chaque espèce serait soumise à son gradient de pression partielle ($P_j = x_j P$). Le débit massique, passant au travers d'un tronçon dx de capillaire, pour l'espèce j est alors donné par⁴ :

$${}^m_{dx}Q_j^{Kn} = -D_j \frac{\partial P_j}{\partial x} = -\frac{M_j}{RT} \frac{\pi d_i^3}{12} \sqrt{\frac{8RT}{\pi M_j}} \frac{\partial P_j}{\partial x} \quad (3.13)$$

3.4.1.3 Écoulement global du mélange et sélectivité

Le débit massique global, passant au travers d'un tronçon dx de capillaire, est égal à la somme des contributions des débits massiques de Poiseuille pour le mélange et de Knudsen pour les deux composés :

$${}^m_{dx}Q_{\{A+B\}}^{tot} = {}^m_{dx}Q_{\{A+B\}}^P + {}^m_{dx}Q_A^{Kn} + {}^m_{dx}Q_B^{Kn} = -C_{\{A+B\}}P \frac{\partial P}{\partial x} - D_A \frac{\partial P_A}{\partial x} - D_B \frac{\partial P_B}{\partial x} \quad (3.14)$$

4. Voir Khaddour (2014) pour plus de détails.

En considérant que la variation de $C_{\{A+B\}}$ avec la sélectivité est du second ordre, on peut intégrer cette relation le long du capillaire⁵ :

$${}^m Q_{\{A+B\}}^{tot} = C_{\{A+B\}} \frac{P_m \Delta P}{L_c} + D_A \frac{\Delta P_A}{L_c} + D_B \frac{\Delta P_B}{L_c} \quad (3.15)$$

où l'on a noté le gradient de pression positif $\Delta P = P_{amont} - P_{aval}$ et $P_m = \frac{P_{amont} + P_{aval}}{2}$ la pression moyenne.

En séparant les débits massiques correspondant à chacune des espèces, on peut déterminer alors numériquement la nouvelle composition en aval, connaissant la composition d'entrée en amont⁵.

3.4.1.4 Résultats pour un mélange binaire (50%CH4/50%He)

On considère un capillaire de longueur 87mm et on va regarder l'influence du diamètre et du gradient de pression sur la séparation.

◇ Effet du diamètre

Pour un gradient de pression de 1 bar ($P_{amont} = 2\text{bar}$, $P_{aval} = 1\text{bar}$), on fait varier le diamètre du capillaire entre 1nm et 10cm. La figure 3.8 présente l'évolution des fractions molaires avales de CH4 et He en fonction du diamètre du capillaire. La séparation est maximale pour les petites tailles de capillaire car les effets de Knudsen y sont plus importants. Pour une taille de capillaire supérieure à $100\mu\text{m}$, l'effet de la séparation devient négligeable.

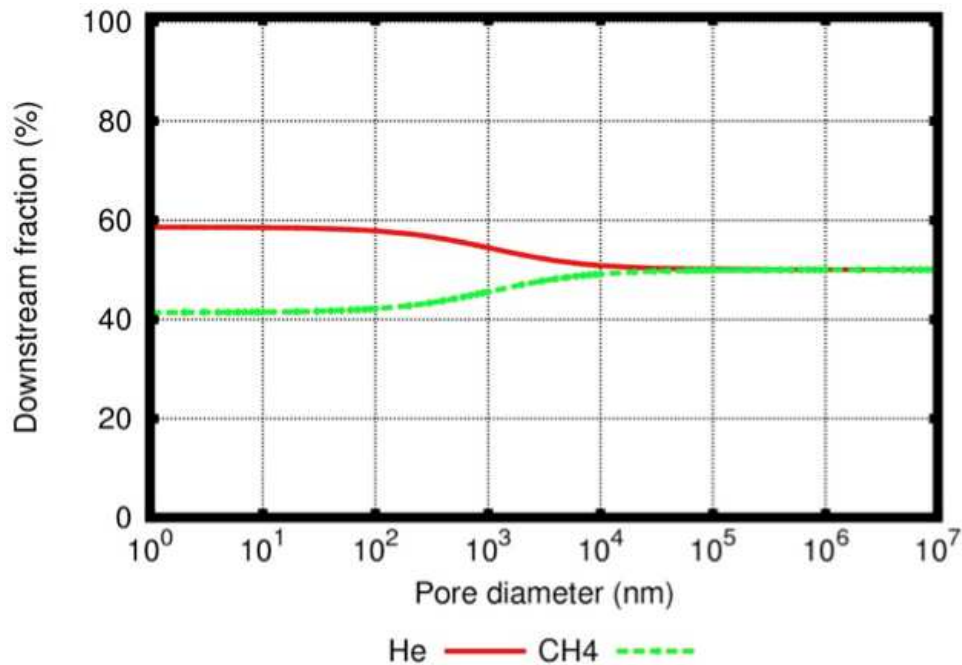


FIGURE 3.8 – Effet du diamètre sur la séparation dans un capillaire pour un mélange initial (50%CH4/50%He).

5. Voir Khaddour (2014) pour plus de détails.

3.4. Étude de la sélectivité naturelle d'un milieu poreux vis à vis d'un mélange de gaz donné

◇ Effet de la pression

Pour un diamètre de capillaire de $1\mu\text{m}$, on fait varier la pression amont de 0 à 100 bar ($P_{\text{aval}} = 0\text{bar}$). La figure 3.9 présente l'évolution des fractions molaires aval de CH₄ et He en fonction de la pression moyenne. L'influence des effets de Knudsen diminuant au fur et à mesure que la pression augmente (pour une pression infinie, cette influence est nulle et la perméabilité apparente est égale à la perméabilité intrinsèque), on retrouve que la séparation est maximale pour les faibles pressions moyennes.

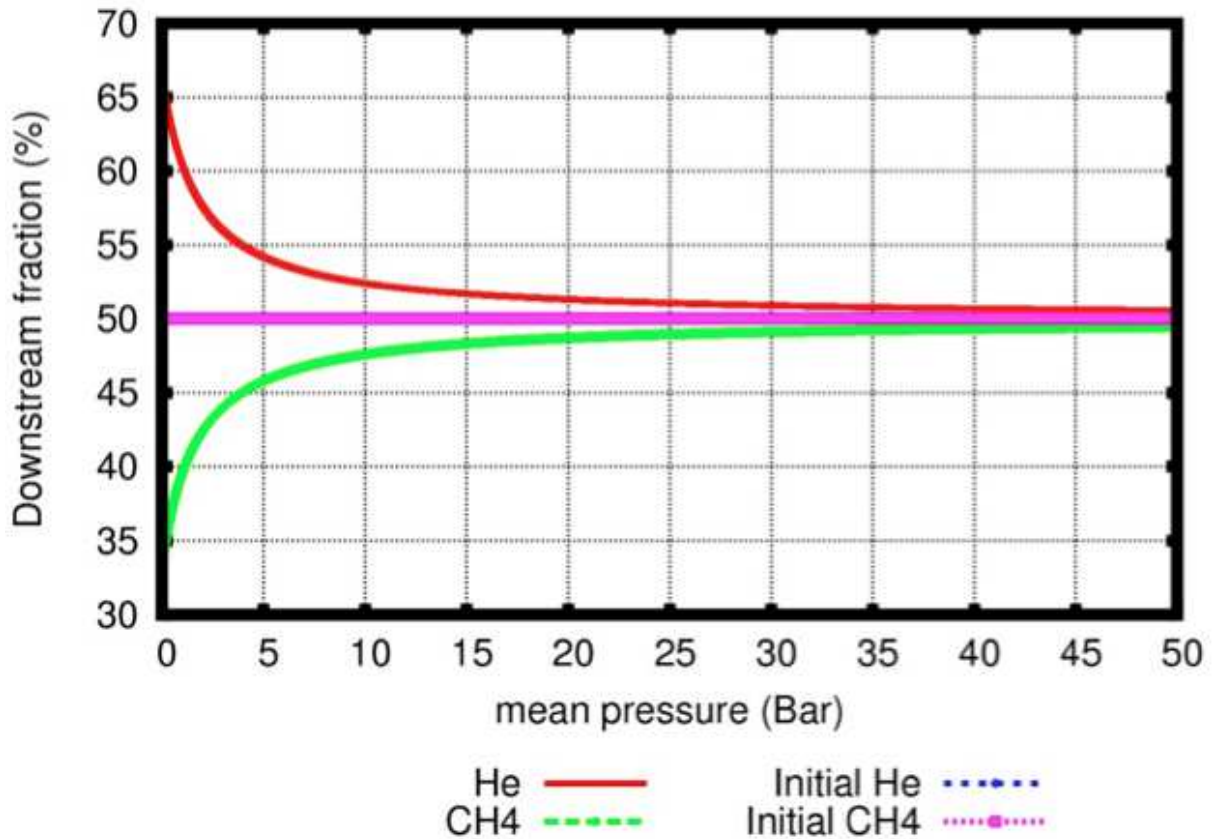


FIGURE 3.9 – Effet de la pression sur la séparation dans un capillaire pour un mélange initial (50%CH₄/50%He).

3.4.1.5 Comparaisons avec des résultats de la littérature

Adzumi (1937) a effectué des mesures expérimentales de séparation pour un mélange (51% H₂/49% C₂H₂) s'écoulant dans un capillaire de diamètre 2.42mm. La figure 3.10 présente la comparaison entre la séparation estimée par le modèle et les résultats expérimentaux présentés dans (Adzumi, 1937). Il faut remarquer que dans cette référence l'unité de pression n'est pas indiquée. Avec notre modèle, nous avons estimé une séparation pour des pressions amont variant entre 0 et 40mmHg ($P_{\text{aval}} = 0\text{mmHg}$). Les résultats obtenus avec notre modèle concordent assez bien avec les résultats expérimentaux, surtout à basse pression où les effets de Knudsen sont dominants. Pour une pression amont nulle, la composition du mélange en aval est de (79% H₂/21% C₂H₂).

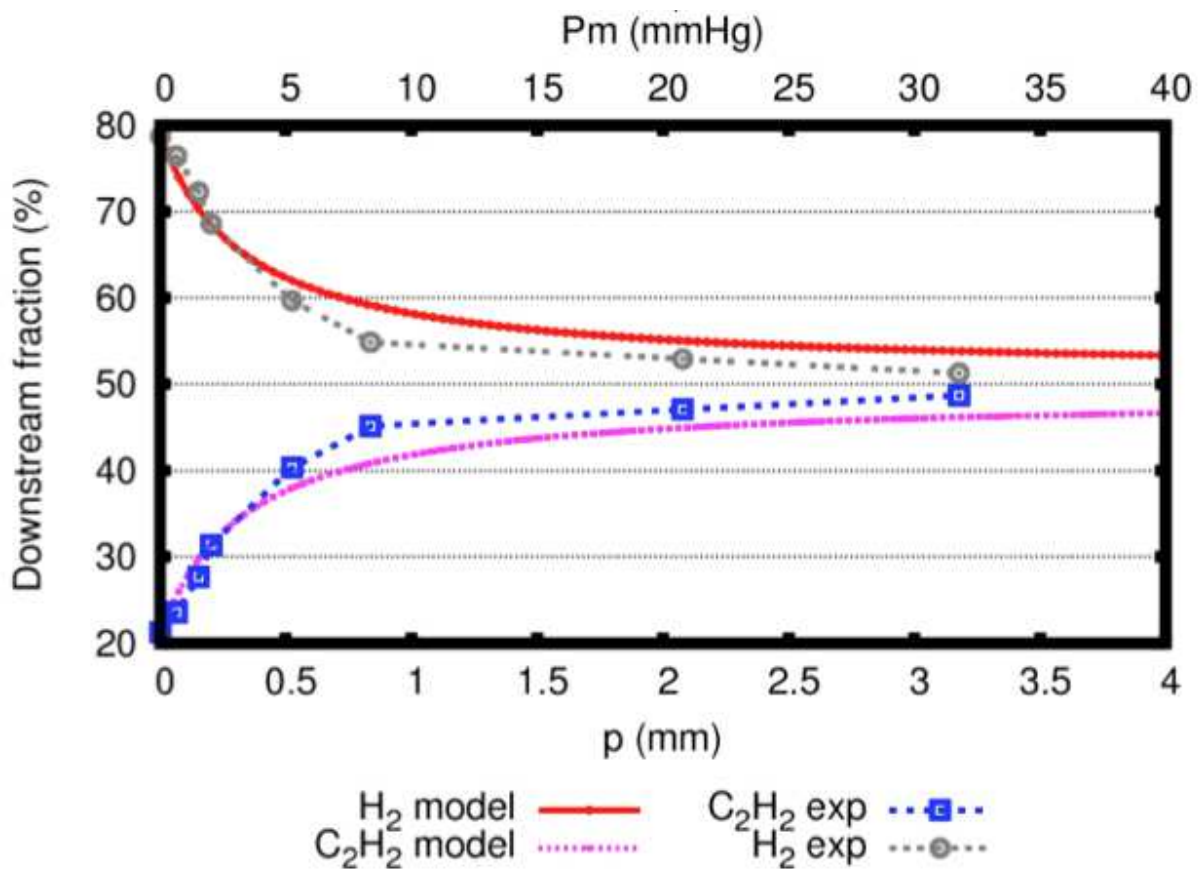


FIGURE 3.10 – Comparaisons expérimentales (Adzumi, 1937) quant à l'effet de la pression sur la séparation dans un capillaire pour un mélange initial (51% H₂/49% C₂H₂).

3.4.2 Sélectivité dans un milieu poreux et premiers résultats expérimentaux

Les équations développées dans la partie 3.4 peuvent être réécrites pour un milieu poreux ayant été reconstruit sous la forme d'un assemblage hiérarchique aléatoire à partir d'une mesure de sa distribution de tailles de pore. Les équations sont détaillées dans Khaddour (2014) et on peut ainsi prédire la sélectivité du milieu pour un mélange donné.

Afin d'effectuer des mesures expérimentales de validation, le banc d'essai présenté à la figure 3.2 a été associé à un chromatographe en phase gazeuse pour déterminer les compositions de mélange (CH₄/He) avant et après passage au sein d'un mortier sain. La figure 3.11 présente la comparaison entre la sélectivité estimée à l'aide du modèle et 5 points expérimentaux correspondants à différentes compositions initiales. Les résultats semblent bien concordés même si ils doivent être affinés en effectuant des mesures pour des variations de composition initiale plus importantes.

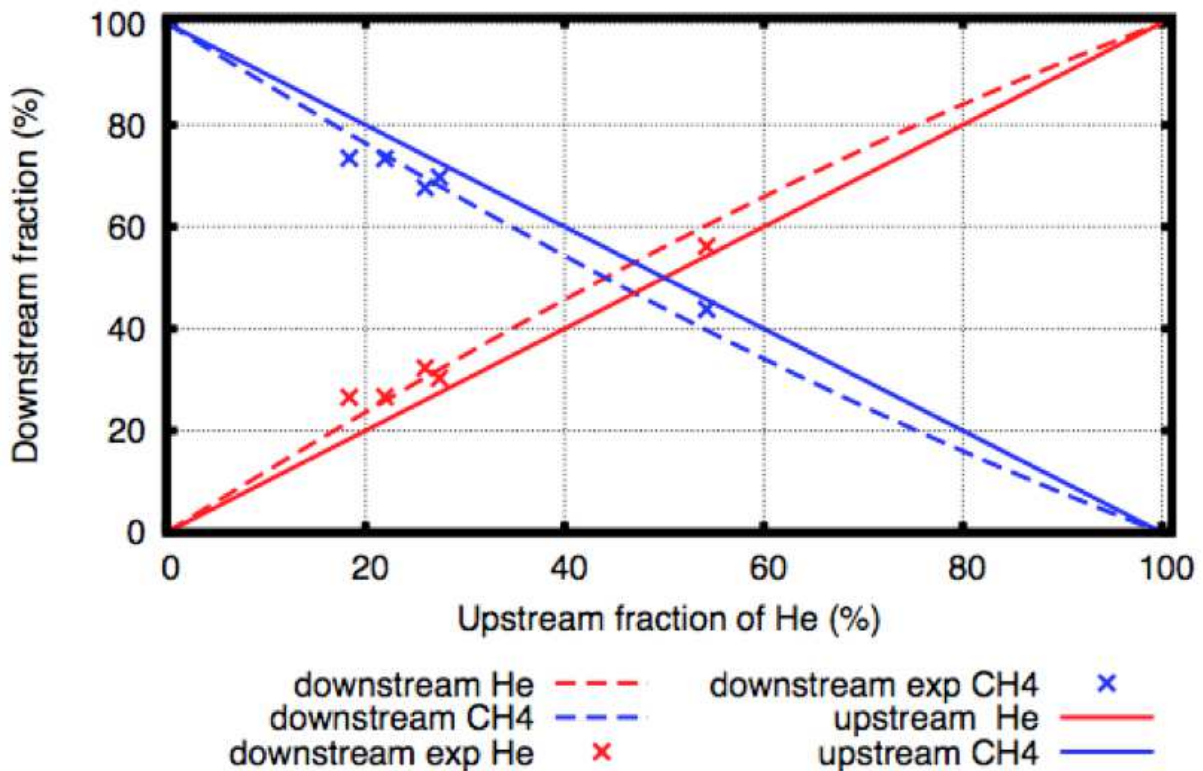


FIGURE 3.11 – Sélectivité dans un milieu poreux et comparaison avec de premiers résultats expérimentaux.

3.5 Conclusion

Différentes actions ont été entreprises dans le but de préciser les couplages entre endommagement, rupture et propriétés de transport dans les milieux poreux peu perméables. Dans ces milieux peu perméables, le libre parcours moyen des molécules de fluide est proche de la distance inter-parois du pore et de ce fait, l'écoulement est fortement influencé par les collisions entre les particules de fluide et ces parois. Ainsi l'écoulement ne satisfait plus au régime visqueux de Poiseuille simple mais on observe un glissement sur les parois (effet de Klinkenberg) dû aux chocs particules/parois. Ce glissement se traduit par une dépendance de la perméabilité à la pression du fluide considéré.

Afin de prédire les perméabilités, intrinsèque et apparente, du milieu, un nouveau modèle a été développé où le réseau poreux est reconstruit de manière fictive sous la forme d'un assemblage aléatoire mais hiérarchique de capillaires de différents diamètres à partir d'une mesure de distribution de tailles de pore, par exemple par intrusion de mercure. Les lois d'écoulement de Poiseuille et de Knudsen sont ensuite combinées à l'échelle du capillaire puis transférées à l'échelle macroscopique au travers de l'assemblage réalisé. Une comparaison avec la loi macroscopique d'écoulement de Darcy permet d'estimer non seulement la perméabilité intrinsèque du milieu mais également la perméabilité apparente et leurs évolutions dès lors que la distribution de tailles de pore est connue.

Des mesures expérimentales de perméabilité radiale sous charge ont permis de valider la représentativité du modèle pour différents niveaux d'endommagement d'éprouvettes en mortier. Différents gaz ont été utilisés (azote, méthane, dioxyde de carbone) et pour chacun des gaz, une bonne concordance avec les résultats fournis par le modèle est observée, la seule donnée d'entrée étant la distribution de tailles de pore du milieu poreux considéré.

Le modèle et le banc d'essai expérimental ont ensuite été étendus pour étudier l'écoulement de mélange de gaz. Une sélectivité naturelle du milieu poreux due à la contribution de Knudsen à l'écoulement est mise en évidence par le modèle et confirmée expérimentalement.

3.6 Bibliographie du chapitre

- Adzumi, H., 1937. Studies on the flow of gaseous mixtures through capillaries. II. The molecular flow of gaseous mixtures. *Bulletin of the Chemical Society of Japan* 12 (6), 285–291.
- Aït-Mokhtar, A., Amiri, O., Dumargue, P., Sammartino, S., 2002. A new model to calculate water permeability of cement materials from MIP results. *Magazine of Concrete Research* 14 (2), 43–49.
- Aït-Mokhtar, A., Amiri, O., Sammartinot, S., 1999. Analytic modelling and experimental study of the porosity and permeability of a porous medium—application to cement mortars and granitic rock. *Magazine of Concrete Research* 51 (6), 391–396.
- Amiri, O., Aït-Mokhtar, A., Sarhani, M., 2005. Tri-dimensional modelling of cementitious materials permeability from polymodal pore size distribution obtained by mercury intrusion porosimetry tests. *Advances* 17 (1), 39–45.
- Bartley, J., Ruth, D., 1999. Relative Permeability Analysis of Tube Bundle Models. *Transport in Porous Media* 36 (2), 161–188.

-
- Carman, P., 1937. Fluid flow through granular beds. *Chemical Engineering Research and Design* 75, S32–S48.
- Chen, W., 2010. Fracturation électrique des géomatériaux. Etude de l'endommagement et de la perméabilité. Ph.D. thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour.
- Chen, W., Maurel, O., Reess, T., De Ferron, A. S., La Borderie, C., Pijaudier-Cabot, G., Rey-Bethbeder, F., Jacques, A., Jun. 2012. Experimental study on an alternative oil stimulation technique for tight gas reservoirs based on dynamic shock waves generated by Pulsed Arc Electrohydraulic Discharges. *Journal of Petroleum Science and Engineering* 88-89, 67–74.
- Childs, E. C., Collis-George, N., 1950. The Permeability of Porous Materials. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 201 (1066), 392–405.
- Darcy, H., 1856. Les fontaines publiques de la ville de Dijon. Dalmont.
- Dong, M., Dullien, F., Dai, L., Li, D., 2006. Immiscible Displacement in the Interacting Capillary Bundle Model Part II. Applications of Model and Comparison of Interacting and Non-Interacting Capillary Bundle Models. *Transport in Porous Media* 63 (2), 289–304.
- Kast, W., Hohenthanner, C.-R., Mar. 2000. Mass transfer within the gas-phase of porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 43 (5), 807–823.
- Katz, A., Thompson, A., 1986. Quantitative prediction of permeability in porous rock. *Physical review* 34 (11), 8179–8181.
- Khaddour, F., 2014. Amélioration de la production de gaz des « Tight Gas Reservoirs ». Ph.D. thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour.
- Khaddour, F., Grégoire, D., Pijaudier-cabot, G., 2013. Upscaling Permeation Properties in Porous Materials from Pore Size Distributions. In : Gilles Pijaudier-Cabot, J.-M. P. E. (Ed.), *Geomechanical Issues in CO2 Storage Facilities*. John Wiley & Sons, Inc., pp. 43–56.
- Khaddour, F., Grégoire, D., Pijaudier-cabot, G., 2014. Capillary bundle model for the computation of the apparent permeability from pore size distributions. *European journal of environmental and civil engineering* doi :10.1080/19648189.2014.939307.
- Klinkenberg, L., 1941. The permeability of porous media to liquids and gases. In : *Drilling and Production Practice*, American Petroleum Inst. pp. 200–213.
- Kozeny, J., 1927. Über kapillare Leitung des Wassers im Boden. *Wien, Akad. Wiss* 136 (2a), 271.
- Maurel, O., Reess, T., Matallah, M., De Ferron, A., Chen, W., La Borderie, C., Pijaudier-Cabot, G., Jacques, A., Rey-Bethbeder, F., Dec. 2010. Electrohydraulic shock wave generation as a means to increase intrinsic permeability of mortar. *Cement and Concrete Research* 40 (12), 1631–1638.
- Millington, R., Quirk, J. P., 1961. Permeability of porous solids. *Transactions of the Faraday Society* 57, 1200—1207.
- Poiseuille, J., 1840. Recherches expérimentales sur le mouvement des liquides dans les tubes de très petits diamètres. *Comptes rendus hebdomadaires des séances de l'Académie des sciences* T11 (1), 1041—1048.

-
- Steckelmacher, W., 1986. Knudsen flow 75 years on : the current state of the art for flow of rarefied gases in tubes and systems. *Reports on Progress in Physics* 49 (10), 1083.
- Watanabe, K., Flury, M., 2008. Capillary bundle model of hydraulic conductivity for frozen soil. *Water Resources Research* 44 (12), n/a–n/a.
- Wong, H., Zimmerman, R., Buenfeld, N., 2012. Estimating the permeability of cement pastes and mortars using image analysis and effective medium theory. *Cement and Concrete Research* 42 (2), 476 – 483.

Chapitre 4

Couplage gonflement/adsorption dans les milieux microporeux

Sommaire

4.1	Introduction	74
4.1.1	Cadre de travail	74
4.1.2	Contexte	74
4.1.3	Verrous scientifiques	74
4.1.4	Bilan des actions de recherche réalisées	76
4.2	Modèle poromécanique avec porosité variable pour la prédiction du gonflement induit par adsorption en milieux microporeux	76
4.2.1	Cadre poromécanique général	76
4.2.2	Extension pour tenir compte des variations de porosité	77
4.2.3	Choix d'un modèle d'homogénéisation	78
4.2.4	Effet du gonflement sur l'isotherme adsorption et correction du formalisme de Gibbs	79
4.2.5	Formulation finale	79
4.2.6	Résultats et comparaisons expérimentales	80
4.3	Un nouveau montage expérimental permettant la mesure in situ simultanée des quantités adsorbées et du gonflement induit par l'adsorption en milieux microporeux	86
4.3.1	Matériau, échantillon et procédure expérimentale	86
4.3.2	Mesure des quantités adsorbées	87
4.3.3	Mesure du gonflement induit par adsorption	87
4.3.4	Résultats	88
4.4	Conclusion	91
4.5	Bibliographie du chapitre	91

4.1 Introduction

4.1.1 Cadre de travail

Les travaux sur ce thème sont en cours de réalisation avec Laurent Perrier dans le cadre de sa thèse de doctorat (soutenance prévue en 2015) financée par le projet CEPAGE de la région Aquitaine¹. Les observations et analyses effectuées ainsi que les méthodes développées autour de ce thème ont été réalisées sur du charbon actif (Chemviron). Cependant la même méthodologie pourrait s'appliquer à des roches ou charbons naturels dans un contexte géomécanique.

4.1.2 Contexte

Le but de cette partie est de permettre une meilleure compréhension des liens entre le gonflement de la matrice solide et l'adsorption dans les matériaux microporeux. Dans le contexte de l'exploitation des réserves non conventionnelles de gaz, il est nécessaire de mieux appréhender les interactions entre les espèces adsorbées et la matrice poreuse. Par exemple, dans le cadre de l'exploitation des réservoirs de gaz naturels non conventionnels tels que les lits de charbon (Coal Bed Methane), le procédé industriel utilisé pour l'extraction consiste à venir chasser le méthane adsorbé dans la veine de charbon en y injectant du CO₂ sous pression. Le CO₂ s'adsorbant préférentiellement au méthane dans le charbon (Durucan and Shi, 2009), cette technique constitue également une méthode de stockage géologique et de valorisation du CO₂. Dans ces réservoirs, on distingue deux types de porosité : 1) les microfissures et les macropores, de taille allant du micromètre à la centaine de nanomètres et qui assurent la perméabilité de la roche ; 2) les micropores, de taille nanométrique et dans lesquels le confinement des molécules de gaz peut entraîner un gonflement de la roche. Ainsi, l'adsorption préférentielle du CO₂ dans le charbon se traduit par un gonflement de la matrice nanoporeuse et par une fermeture du réseau de microfissures. Ce phénomène résulte donc en une diminution importante de la perméabilité de la roche et donc une chute importante du rendement industriel de ces techniques d'extraction. Une meilleure description du couplage adsorption/gonflement contribuerait à une meilleure optimisation des techniques actuelles d'exploitation de ces réserves ainsi qu'au développement de nouvelles techniques où, par exemple, un gonflement bien maîtrisé induirait une microfissuration et donc augmenterait la perméabilité du milieu.

4.1.3 Verrous scientifiques

Dans les matériaux microporeux², la pomécanique classique ne permet pas de rendre compte des interactions fluides-solides présentes dans les nanopores où le fluide est fortement confiné. Par ailleurs, dans ces matériaux des effets de surface importants sont attendus du fait que le rapport surface/volume augmente lorsque la taille des pores diminue.

Expérimentalement, différents auteurs ont essayé de combiner des résultats d'adsorption de gaz et des mesures de gonflement volumique, essentiellement pour des charbons bitumineux (Levine, 1996; Day et al., 2008; Ottiger et al., 2008a; Pini et al., 2009; Hol and Spiers, 2012) du fait de l'importance de ces couplages dans un contexte de stockage géologique de CO₂ ou d'exploitation de réservoirs à lits de charbon. En effet, le gonflement in-situ produit par l'adsorption a été identifié (Larsen, 2004; van Bergen et al., 2006; Pan and Connell, 2007) comme étant le principal facteur expliquant la chute de production dans les lits de charbon par injection de CO₂. Le gonflement de la matrice microporeuse tend à refermer

1. Les différents projets et contrats de recherche sont détaillés en partie A.5.2.

2. Suivant la notation recommandée par l'IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) les microporeux sont des matériaux poreux dont les diamètres de pores sont inférieurs à 2nm.

la perméabilité naturelle du milieu. Cependant, les couplage adsorption-gonflement n'ont pas seulement un intérêt industriel fort et doivent être pris en compte dans les études plus académiques en lien avec la thermodynamique du processus d'adsorption lui-même Meehan (1927); Bangham and Fakhoury (1928); Grosman and Ortega (2009). En effet, la déformation de la matrice poreuse change intrinsèquement les propriétés d'adsorption du milieu.

Théoriquement, la plupart des approches continues permettant de relier le gonflement des matériaux microporeux à l'adsorption sont basées sur un couplage entre une isotherme d'adsorption et la déformation mécanique (Pan and Connell, 2007; Pijaudier-cabot et al., 2011; Brochard et al., 2012; Vermorel and Pijaudier-Cabot, 2014). Cependant, on pourrait s'attendre instinctivement à ce que les déformations induites par adsorption résultent des efforts locaux appliqués sur les parois des pores qui en moyenne se traduisent par un gonflement global à l'échelle macroscopique. Pour des configurations simples (slit pore), ces efforts peuvent être estimés, par exemple par simulations moléculaires. Dans les petits pores où le gaz est très confiné, les pressions résultantes à la surface des pores peuvent être très importantes (quelques centaines de MPa), suivant les conditions thermodynamiques et la taille des pores. Une isotherme d'adsorption peut également être estimée pour une taille de pore donnée par simulations moléculaires. Il est intéressant de remarquer que l'on peut alors effectuer une mise à l'échelle simple en ce qui concerne ces isothermes d'adsorption : en prenant en compte la distribution de taille de pore du matériaux, les isothermes reconstruites par simulations moléculaires sont très cohérentes avec celles mesurées à l'échelle globale macroscopique Knorst-Fouran (2010). Cependant il est difficile d'appliquer la même stratégie concernant la déformation volumique induite par adsorption. Si les quantités adsorbées sont contrôlées essentiellement par la quantité de pores d'une taille donnée, la description des effets mécaniques résultants du confinement du fluide dans les pores nécessite la connaissance de la topologie et de l'organisation spatiale du réseau qui est très difficile à caractériser, en milieu microporeux tout particulièrement. Pour ces raisons, les gonflements induits par adsorption sont souvent reliés aux mesures macroscopiques d'isotherme d'adsorption plutôt qu'aux variations de pression de pore estimées par simulations moléculaires.

Depuis les années 1990, la mécanique des milieux poreux (Coussy, 1991) a permis de proposer un cadre théorique consistant pour l'étude de la réponse mécanique de milieux poreux complètement ou partiellement saturés. Récemment ce cadre théorique a été étendu afin de mieux appréhender les couplages gonflement/adsorption dans les matériaux microporeux (Vermorel and Pijaudier-Cabot, 2014). Parallèlement, le développement de techniques de simulations par dynamique moléculaire a permis d'étudier le couplage de ces phénomènes (Vandamme et al., 2010). Cependant il n'y a pas, à ce jour, dans la littérature de données expérimentales complètes permettant de valider de tels modèles théoriques ou numériques. On propose donc de combler cette lacune en proposant une étude expérimentale permettant de coupler des mesures manométriques d'adsorption avec des techniques de corrélation d'images numériques (Grégoire et al., 2011a; Sutton et al., 1983, 1986; Grégoire et al., 2009) afin d'estimer in-situ la déformation locale induite par l'adsorption et la désorption en milieu microporeux. Par ailleurs, la plupart des études concernant l'adsorption se placent dans le formalisme de Gibbs où les pores sont considérés indéformables, c'est-à-dire que la déformation du squelette poreux n'influe pas sur les quantités adsorbées. Cependant l'augmentation de surface de pores due au gonflement doit jouer un rôle dans l'estimation des quantités adsorbées.

4.1.4 Bilan des actions de recherche réalisées

- Tout d’abord, le modèle présenté par Vermorel and Pijaudier-Cabot (2014) a été étendu afin de tenir compte de la variation de porosité au cours du gonflement (Perrier et al., 2014b). Un nouveau schéma non-linéaire incrémental a été proposé où les propriétés poromécaniques (propriétés élastiques, coefficients de Biot) sont mises à jour à chaque pas de pression pour tenir compte des variations de porosité dues au gonflement. On a examiné également l’influence du gonflement directement sur les quantités adsorbées. Le modèle a été validé en reproduisant quelques essais de la littérature où gonflement et quantités adsorbées ont été mesurées indépendamment et non pas simultanément.

Cette action est détaillée en partie 4.2 et dans (Perrier et al., 2014b, [consulter en ligne](#)).

- Ensuite, un nouveau montage expérimental permettant la mesure simultanée des quantités d’excès adsorbées par manométrie et du gonflement de la matrice poreuse par corrélation d’images numériques a été développé.

Cette action est détaillée en partie 4.3 et dans (Perrier et al., 2014a, [consulter en ligne](#)).

4.2 Modèle poromécanique avec porosité variable pour la prédiction du gonflement induit par adsorption en milieux microporeux

4.2.1 Cadre poromécanique général

Dans cette partie, on rappelle brièvement le cadre poromécanique général proposé par Vermorel and Pijaudier-Cabot (2014).

Pour des milieux microporeux saturés et isotropes, Vermorel and Pijaudier-Cabot (2014) ont proposé une expression de l’incrément de déformation volumique de gonflement fonction d’un incrément de pression ambiante :

$$d\varepsilon = \left(\frac{b}{1 - \chi} - 1 \right) \frac{dP_b}{K} \quad (4.1)$$

où ε est la déformation volumique de gonflement, K est le module apparent d’incompressibilité, $b = 1 - \frac{K}{K_s}$ est le coefficient de Biot, K_s est le module du squelette solide, P_b est la pression ambiante et $\chi = 1 - \frac{\rho_b}{\rho_f}$ est le coefficient de confinement qui caractérise de degré de confinement du fluide interstitiel à la densité ρ_f en comparaison du fluide ambiant à la densité ρ_b .

La pression de pore effective est alors donnée par :

$$dP_f = \frac{dP_b}{1 - \chi} \quad (4.2)$$

Il a été montré que la pression de pore effective et par conséquent les déformations de gonflement peuvent être déduites de mesures expérimentales d’isotherme d’adsorption. Dans le cadre du formalisme de Gibbs, l’isotherme d’adsorption représente la mesure de la quantité de moles adsorbée n_{ex} en excès par rapport à la quantité de moles de fluide présente en condition ambiante dans le pore (voir figure 4.1). Si n_{tot} représente la quantité totale de moles de fluide interstitiel, le coefficient de confinement est donné par :

$$\chi = \frac{n_{ex}}{n_{tot}} \quad (4.3)$$

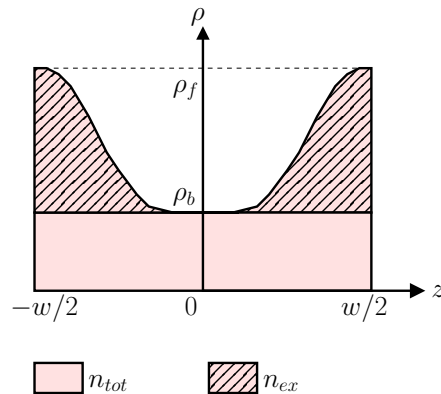


FIGURE 4.1 – Schéma représentant la densité de fluide au sein d'un pore dans le cadre du formalisme de Gibbs. Les parois du pores sont situées en $\pm \frac{w}{2}$.

Si la mesure expérimentale donne accès à n_{ex} , la quantité totale n_{tot} est donnée par :

$$n_{tot} \approx n_{ex} + \frac{\rho_b V_\phi^0}{M} = n_{ex} + \left(\frac{\phi_0}{1 - \phi_0} \right) \frac{m_s \rho_b}{M \rho_s} \quad (4.4)$$

où V_ϕ^0 est le volume initial connecté de pore, M est la masse molaire de la phase adsorbée, m_s est la masse du solide adsorbant et ρ_s est la densité de la matrice solide.

Sur la base de ce cadre poromécanique, Vermorel and Pijaudier-Cabot (2014) ont été capables d'ajuster les paramètres poromécaniques (porosité, module apparent d'incompressibilité, module du squelette solide) afin de reproduire des mesures expérimentales de gonflement présentes dans la littérature. Cependant, puisque ces paramètres poromécaniques étaient ajustés sur la courbe complète déformation/pression ambiante, ils sont supposés constants lors du gonflement de la matrice poreuse. L'évolution de porosité a cependant été estimée à posteriori et on observe une augmentation relative de l'ordre de 45% (de 0.085 à ≈ 0.125), ce qui est loin d'être négligeable. Dans ces conditions, les propriétés poromécaniques doivent varier au fur et à mesure que la matrice poreuse se déforme et le cadre poromécanique proposé doit être étendu pour tenir compte de ces variations.

4.2.2 Extension pour tenir compte des variations de porosité

Dans cette partie, le cadre poromécanique général proposé par Vermorel and Pijaudier-Cabot (2014) est étendu pour prendre en compte la variation de porosité au cours du gonflement de la matrice poreuse. A chaque incrément de pression ambiante, un schéma incrémental non-linéaire est utilisé pour prédire l'incrément de porosité résultant (see Eq. 4.5), les nouvelles propriétés poromécaniques correspondantes (see Eq. 4.6) et l'incrément de déformation volumique de gonflement induit (see Eq. 4.1) dépendant des mesures expérimentales de quantités adsorbées (see Eq. 4.4).

$$d\varepsilon = \left(\frac{b(\phi)}{1-\chi} - 1 \right) \frac{dP_b}{K(\phi)} \quad (4.5)$$

$$d\phi = \left(\frac{K(\phi)}{b(\phi) - (1-\chi)} + b(\phi)N(\phi) \right) \frac{d\varepsilon}{N(\phi)}$$

$$b(\phi) = 1 - \frac{K(\phi)}{K_s} \quad , \quad N(\phi) = \frac{K_s}{b(\phi) - \phi} \quad (4.6)$$

où $N(\phi)$ est le module de Biot, fonction de la porosité comme les autres paramètres poromécaniques $K(\phi)$ et $b(\phi)$.

4.2.3 Choix d'un modèle d'homogénéisation

Un changement de porosité amenant un changement du module apparent K sous l'effet du gonflement de la matrice, il est nécessaire d'adopter un modèle d'homogénéisation pour relier la porosité, le module apparent et le module du squelette solide. Suivant si la porosité est supposée sphérique ou cylindrique, différentes expressions peuvent être obtenues. Dans les deux cas, on considère que la porosité est distribuée aléatoirement dans le matériau de telle sorte que le comportement global est supposé isotopique. Dans la plupart des cas, la porosité naturelle se situe entre la sphère et le cylindre et ces deux expressions peuvent être vues comme des bornes limites.

Cas d'une porosité sphérique

Suivant les expressions proposées par Mori and Tanaka (1973), les propriétés poromécaniques homogénéisées d'un milieu poreux à porosité sphérique sont données par :

$$\begin{aligned} K^{\text{spher}}(\phi) &= \frac{4K_s G_s (1-\phi)}{4G_s + 3K_s \phi} \quad , \quad G_s = \frac{3K_s (1-2\nu_s)}{2(1+\nu_s)} \\ b^{\text{spher}}(\phi) &= 1 - \frac{K^{\text{spher}}(\phi)}{K_s} \quad , \quad N^{\text{spher}}(\phi) = \frac{K_s}{b^{\text{spher}}(\phi) - \phi} \end{aligned} \quad (4.7)$$

où G_s et ν_s sont respectivement le module de cisaillement et le coefficient de Poisson de la phase solide.

Cas d'une porosité cylindrique

Suivant les expressions proposées par Halpin and Kardos (1976), les propriétés poromécaniques homogénéisées d'un milieu poreux à porosité cylindrique sont données par :

$$\begin{aligned} K^{\text{cylind}}(\phi) &= \frac{K_s G_s (1-\phi)}{G_s + K_s \phi} \quad , \quad G_s = \frac{3K_s (1-2\nu_s)}{2(1+\nu_s)} \\ b^{\text{cylind}}(\phi) &= 1 - \frac{K^{\text{cylind}}(\phi)}{K_s} \quad , \quad N^{\text{cylind}}(\phi) = \frac{K_s}{b^{\text{cylind}}(\phi) - \phi} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Processus itératif d'homogénéisation

Barboura (2007) a montré que les schémas d'homogénéisation directs peuvent ne pas être exacte pour des milieux présentant une forte porosité. Ainsi, elle a proposé un schéma itératif d'homogénéisation qui permet d'obtenir des résultats corrects dans le cas de forte porosité. Le schéma itératif, adapté à cette étude, est présenté en détail dans (Perrier et al., 2014b). Il est important de l'utiliser pour déterminer la valeur initiale $K(\phi_0)$. Ensuite comme notre modèle poromécanique est écrit de façon incrémentale, les variations de porosité du fait du gonflement de la matrice sont faibles à chaque incrément et un schéma d'homogénéisation direct peut être employé.

4.2.4 Effet du gonflement sur l'isotherme adsorption et correction du formalisme de Gibbs

Dans le cadre du formalisme de Gibbs, la porosité est supposée constante et l'influence de la déformation de la structure poreuse sur l'isotherme d'adsorption est négligée. Cependant si le gonflement volumique du matériau atteint quelques pourcents comme cela a été observé expérimentalement dans les charbons (Meehan, 1927; Bangham and Fakhoury, 1928; Levine, 1996; Ottiger et al., 2008b; Day et al., 2008), l'augmentation de la surface de pore doit être significative. Lors de mesures expérimentales d'adsorption, la grandeur mesurable est la quantité de moles adsorbées en excès par rapport à la quantité de moles présente dans le pore en condition ambiante (notée n_{ex} in Fig. 4.1). Dans le cadre du formalisme de Gibbs, la quantité totale de moles de fluide interstitiel (notée n_{tot} in Fig. 4.1) est estimée à l'aide de l'équation Eq. 4.4 en ajoutant simplement le nombre de moles de fluide à densité ambiante ($\rho_b V_p^0 / M$). Lors du gonflement de la matrice poreuse, cette expression doit être corrigée pour tenir compte de la variation de volume de pore :

$$n_{tot}(\phi) = n_{ex} + \frac{\rho_b V_\phi}{M} = n_{ex} + \left(\frac{\phi}{1-\phi} \right) \frac{m_s \rho_b}{M \rho_s} \quad (4.9)$$

où V_ϕ est le volume actualisé de pore connectés et ϕ est la porosité actualisée à l'aide de l'équation Eq 4.5.

Dans ces conditions, le coefficient de confinement (Eq. 4.10) dépend maintenant explicitement de la porosité et est donc estimé également de façon incrémentale :

$$\chi(\phi) = \frac{n_{ex}}{n_{tot}(\phi)} \quad (4.10)$$

4.2.5 Formulation finale

La formulation poromécanique finale utilisée s'écrit :

$$\begin{aligned} d\varepsilon &= \left(\frac{b(\phi)}{1-\chi(\phi)} - 1 \right) \frac{dP_b}{K(\phi)} \\ d\phi &= \left(\frac{K(\phi)}{b(\phi) - (1-\chi(\phi))} + b(\phi)N(\phi) \right) \frac{d\varepsilon}{N(\phi)} \\ \chi(\phi) &= \frac{n_{ex}}{n_{tot}(\phi)} \\ n_{tot}(\phi) &= n_{ex} + \left(\frac{\phi}{1-\phi} \right) \frac{m_s \rho_b}{M \rho_s} \end{aligned} \quad (4.11)$$

où K et b sont donnés par les équations Eqs. 4.7 et 4.8 selon la forme de la porosité considérée.

4.2.6 Résultats et comparaisons expérimentales

4.2.6.1 Mesures expérimentales sur charbons bitumineux réalisées par Ottiger et al. (2008b)

Ottiger et al. (2008b) ont réalisés des mesures d'adsorption et de gonflement, indépendamment, sur des charbons bitumineux secs saturés de pur CH₄ et de pur CO₂ à une température de 45°C. Les échantillons de charbons proviennent de la mine Monte Sinni dans la province italienne de Sulcis. Les mesures d'adsorption ont été réalisées par technique gravimétrique jusqu'à une pression de 191 bar pour le CH₄ et 177 bar pour le CO₂. Les détails sur la mesure gravimétrique sont disponibles dans (Ottiger et al., 2008b). Les mesures de gonflements ont été réalisées de façon non-simultanées et indépendantes sur des échantillons de charbon différents ayant été extraits dans la même mine de charbon mais à un moment et un endroit différent. Les échantillons sont des disques de diamètre 22mm et de hauteur 5mm. Les mesures de gonflement ont été réalisées par visualisation directe de la déformation de l'enveloppe de l'échantillon à l'aide d'une caméra numérique. Les détails sur ces mesures sont disponibles dans (Ottiger et al., 2008b).

Comme décrit par Pini (2009), les charbons du Sulcis possèdent une structure poreuse complexe caractérisée par une distribution de taille de pore large qui s'étant du nanomètre (microporosité) à plusieurs microns (fissures naturelles). La microporosité participe à l'adsorption et au gonflement alors que les fissures naturelles participent au transport de fluide et pilote la perméabilité global du système. Par ailleurs, le réseau naturel de fissure peut induire un comportement global anisotropique et Day et al. (2008) a observé sur un autre charbon des mesures de gonflement différentes dans les directions parallèles ou perpendiculaires aux plans de litage. Dans cette étude, on considère le charbon comme purement microporeux et isotropique.

Les propriétés pomécaniques des échantillons testés sont collectées dans le tableau 4.1 comme rapportées par Pini (2009); Pini et al. (2009). On peut remarquer que le coefficient de Poisson apparent et le module de Young apparent ont été choisis par Pini dans la littérature en accord avec les mesures de caractérisations statiques et dynamiques réalisées par Gentzis et al. (2007) sur des charbons provenant d'une mine différente au Canada. Dans une autre étude, Nikoosokhan (2013) rapporte une estimation du module d'incompressibilité de la matrice charbonneuse K_m . Cette valeur sera utilisée dans cette étude.

TABLE 4.1 – Propriétés pomécaniques apparentes des échantillons de charbon

Property		Value	Unit
Total porosity	ϕ_t	0.051 ⁽¹⁾	—
Microporosity	ϕ	0.032 ⁽¹⁾	—
Apparent Poisson ratio	ν	0.26 ⁽²⁾	—
Apparent Young modulus	E_Y	1119 ⁽²⁾	MPa
Coal matrix bulk modulus	K_m	1040 ⁽³⁾	MPa
Coal matrix shear modulus	G_m	594 ⁽⁴⁾	MPa
Coal density	ρ_s	1356.6 ⁽¹⁾	kg/m ³

més par Pini et al. (2009)

⁽³⁾ assumés par Nikoosokhan (2013) – ⁽⁴⁾ estimés dans cette étude.

⁽¹⁾ mesurés par Pini et al. (2009) – ⁽²⁾ assu-

4.2.6.2 Identification des paramètres du modèle

A partir des propriétés apparentes macroscopiques du charbon collectées dans le tableau 4.1, les propriétés du squelette solide doivent être estimées. Dans ce but, le processus d'homogénéisation itératif a été inversé (Eq 4.12 afin d'estimer les propriétés locales du squelette à partir des propriétés homogénéisées. Les détails sur la procédure sont disponibles dans Perrier et al. (2014b). Les propriétés du squelette solide sont collectées dans le tableau 4.2.

$$\left[\begin{array}{l} K^{(0)} = K_m \quad , \quad G^{(0)} = G_m \quad , \quad \Delta\phi = \frac{\phi}{n} \quad , \quad \phi^{(i)} = \frac{\Delta\phi}{1-\phi+i\Delta\phi} \\ \left\{ \begin{array}{l} K^{(i)} = \mathcal{H}_K(\phi^{(i)}, K^{(i-1)}, G^{(i-1)}) \\ G^{(i)} = \mathcal{H}_G(\phi^{(i)}, K^{(i-1)}, G^{(i-1)}) \end{array} \right. \\ K_s = K^{(n)} \quad , \quad G_s = G^{(n)} \end{array} \right. \quad (4.12)$$

où :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}_K(\phi, K_s, G_s) = K_s + \frac{\phi K_s}{1-(1-\phi) \times A_K} \\ \mathcal{H}_G(\phi, K_s, G_s) = G_s + \frac{\phi G_s}{1-(1-\phi) \times A_G} \end{array} \right. .$$

TABLE 4.2 – Propriétés du squelette solide déduites.

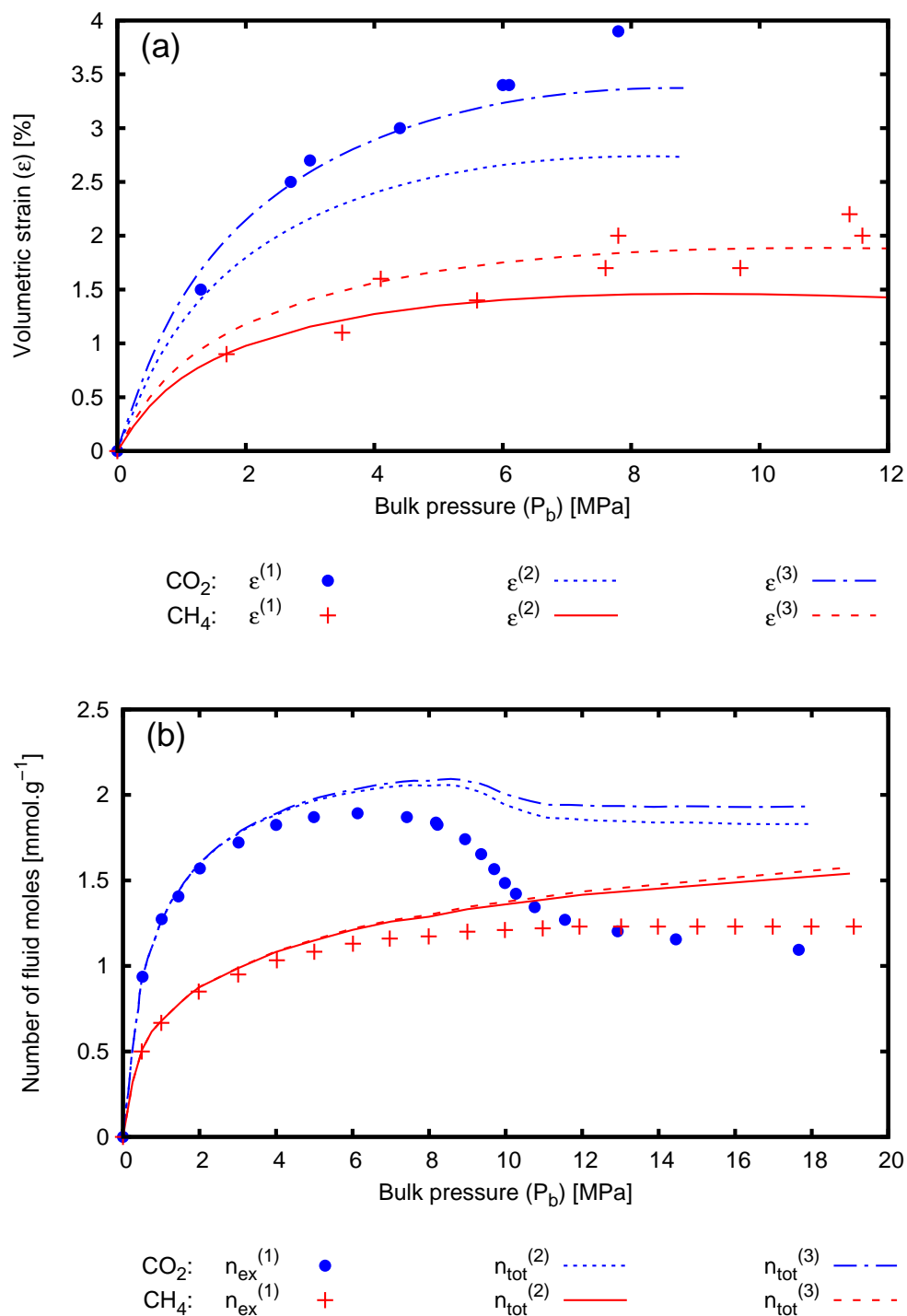
Property	Value	Unit
Spherical porosity Eq. 4.7		
Skeleton matrix modulus	K_s 1121	MPa
Skeleton shear modulus	G_s 633	MPa
Skeleton Poisson ratio	ν_s 0.262	–
Cylindrical porosity Eq. 4.8		
Skeleton matrix modulus	K_s 1137	MPa
Skeleton shear modulus	G_s 658	MPa
Skeleton Poisson ratio	ν_s 0.257	–

4.2.6.3 Résultats

Dans cette partie, les résultats obtenus avec le modèle poromécanique sont comparés aux données expérimentales de Ottiger et al. (2008b) sur des charbons bitumineux saturés avec du pur CH₄ et du pur CO₂ à $T = 45^\circ C$.

Estimation du gonflement et évolution des propriétés poromécaniques

A partir des mesures expérimentales de quantités adsorbées d'excès réalisées par Ottiger et al. (2008b), la déformation de gonflement est estimée à partir de l'équation 4.11 pour les deux types de porosité considérés. La figure 4.2.a présente la comparaison entre les mesures de gonflement et les résultats du modèle. Les résultats obtenus en supposant une porosité cylindrique semble meilleurs au moins pour le CO₂. Pour le CH₄ la dispersion expérimentale ne permet pas de trancher sur le type de porosité. Par la suite seulement les résultats obtenus en considérant une porosité cylindrique seront illustrés.



(¹) Experiment Ottiger et al. (2008b), (²) Spherical porosity (Eq. 4.7), (³) Cylindrical porosity (Eq. 4.8)

FIGURE 4.2 – (a) Comparaison entre le gonflement mesuré par Ottiger et al. (2008b) et prédit par le modèle ; (b) évolution des quantités adsorbées d’excès mesurées et des quantités totales estimées.

4.2. Modèle poromécanique avec porosité variable pour la prédiction du gonflement induit par adsorption en milieux microporeux

Pour une porosité cylindrique, une déformation de gonflement de $\approx 3.5\%$ est obtenue pour le CO_2 à une pression ambiante de 7MPa alors qu'une déformation de gonflement de $\approx 1.7\%$ est obtenue pour le CH_4 à une pression ambiante de 12MPa . Ainsi la déformation induite par l'adsorption de CO_2 est approximativement le double de celle induite par l'adsorption de CH_4 . La figure 4.2.b présente l'évolution des quantités adsorbées d'excès mesurées expérimentalement par Ottiger et al. (2008b) et les quantités totales estimées au travers de l'équation 4.11. On retrouve classiquement que les capacités d'adsorption du CO_2 sont deux fois plus importantes que celles du CH_4 . Ces simples constatations permettent d'illustrer la problématique industrielle. Pour améliorer la production de champs de lits de charbon (coal bed methane) et diminuer la quantité de CO_2 présente dans l'atmosphère, une technique vise à injecter du CO_2 en sous-sol. Comme le CO_2 s'adsorbe préférentiellement au CH_4 , le premier vient chasser le second et la production est censée être améliorée. Cependant, comme le gonflement induit par le CO_2 est plus important que celui induit par le CH_4 , la matrice microporeuse gonfle par rapport à son état d'équilibre géologique précédent et, de ce fait, vient refermer le réseau naturel de microfissures qui assurait le transport et pilotait la perméabilité global du champ. De ce fait, au lieu d'observer une amélioration de la production de méthane, on observe au contraire une chute de production.

La figure 4.3 présente l'évolution du coefficient de confinement en fonction du gonflement de la matrice poreuse. Au départ, le coefficient de confinement est très important ($\approx 99,5\%$). Cela est dû au fait que le charbon est considéré purement microporeux avec une microporosité relativement faible (3.2%). Ainsi $n_{ex} \gg \frac{\rho_b V_\phi}{M}$ dans l'équation 4.11, $n_{tot} \approx n_{ex}$ et donc $\chi \approx 1$. Ainsi le fluide est instantanément fortement confiné dès qu'il s'adsorbe dans la matrice poreuse. Pour un milieu mesoporeux ou macroporeux, on observerait une augmentation progressive de ce coefficient de confinement au départ. Ensuite et au fur et à mesure du gonflement de la matrice poreuse, le coefficient de confinement décroît pour le CO_2 et le CH_4 . Cela est principalement dû au fait que la porosité augmente du fait du gonflement et donc le fluide est déconfiné dans les pores.

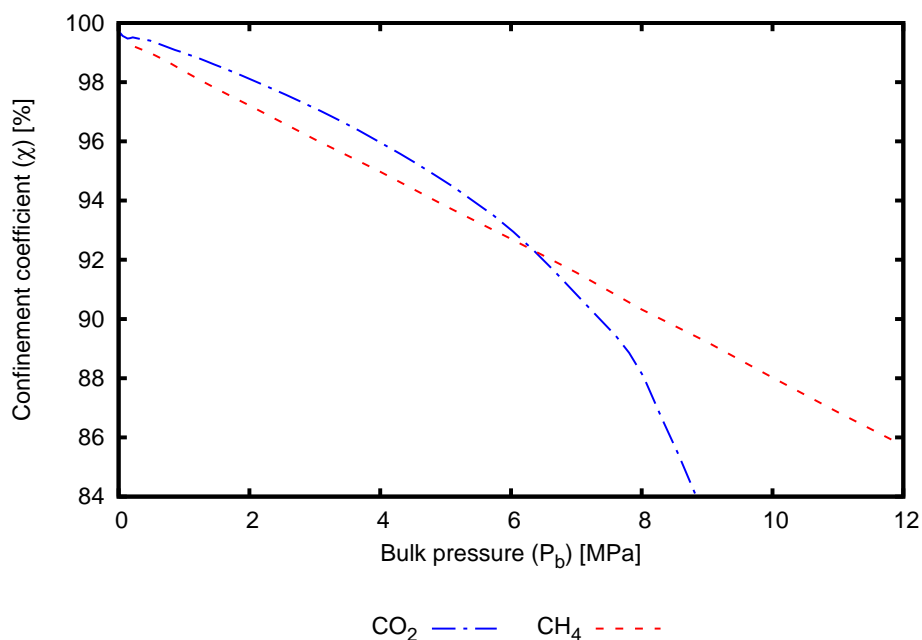


FIGURE 4.3 – Évolution du coefficient de confinement durant le gonflement de la matrice poreuse.

La figure 4.4 présente les évolutions des variations durant le gonflement de la matrice poreuse de la porosité, du module apparent, du module de Biot et du coefficient de Biot.

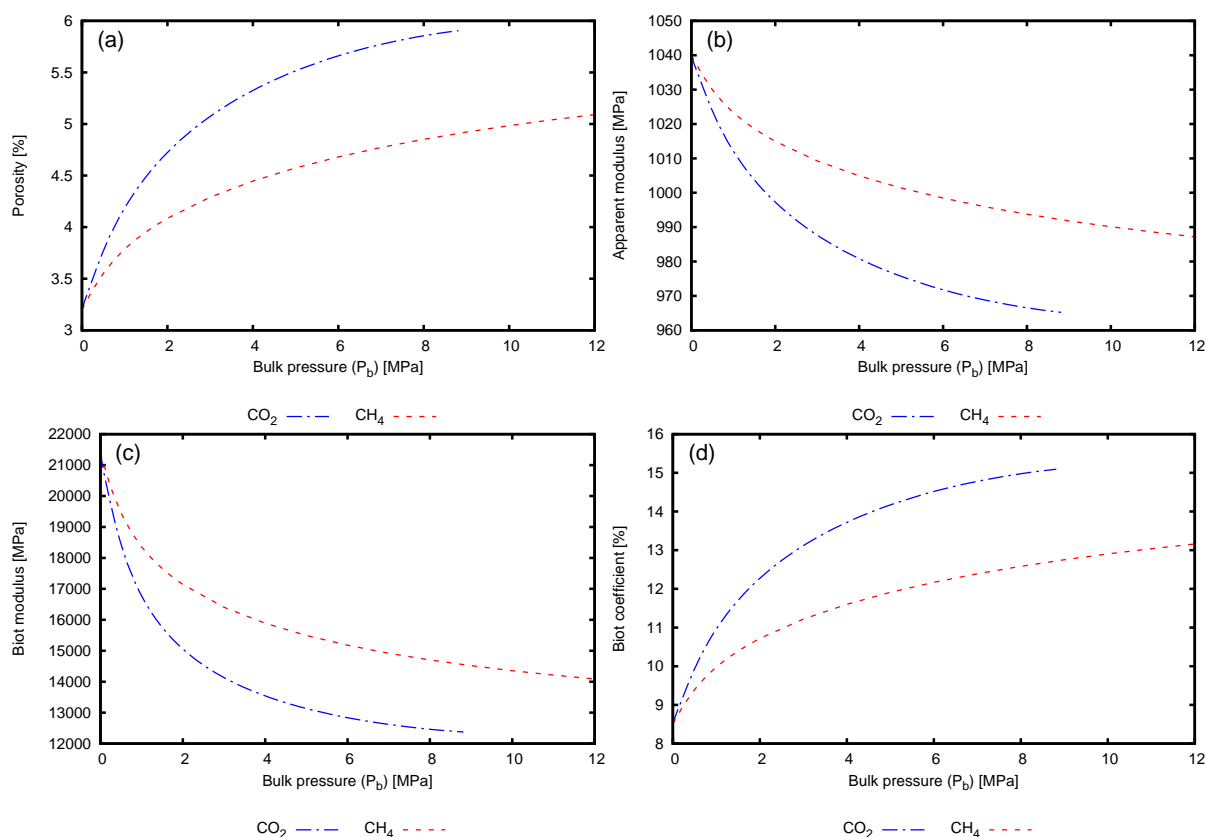


FIGURE 4.4 – Évolution des propriétés poromécaniques durant le gonflement de la matrice poreuse : (a) porosité, (b) module apparent, (c) module de Biot et (d) coefficient de Biot.

Évolution du gonflement en fonction des quantités totales adsorbées

Day et al. (2008) ont reporté différentes évolutions de gonflement en fonction du nombre total de mole de fluide interstitiel. C'est d'un grand intérêt industriel puisque des expériences de gonflements requièrent des échantillons de taille importante avec un appareillage de capteur mécanique alors que les mesures d'adsorption peuvent être réalisées sur de petits échantillons de taille quelconque. Ainsi, il est plus aisé de prédire le gonflement des milieux microporeux à partir de mesure d'adsorption dès lors qu'une loi d'évolution entre les deux est bien définie. Par exemple, Pan and Connell (2007) ont postulé que le gonflement était simplement proportionnel à la quantité total de CO_2 adsorbée dans le charbon. Cependant, les résultats expérimentaux présentés par Day et al. (2008) sont en contradiction avec cette simple relation linéaire.

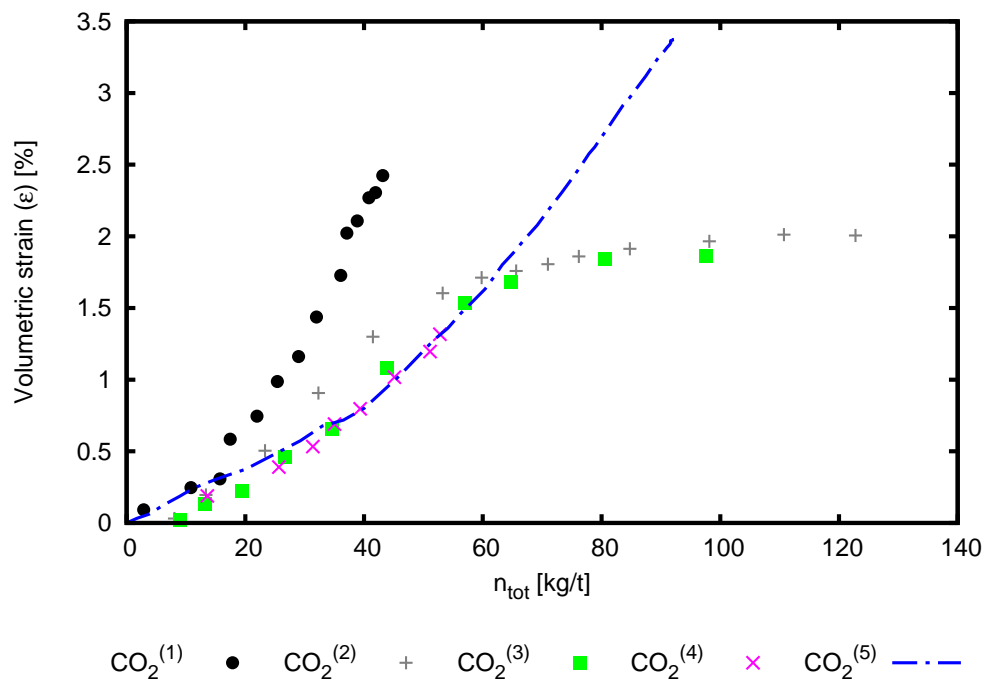
La figure 4.5 présente une comparaison entre les résultats obtenus avec le modèle et divers résultats expérimentaux de la littérature en terme d'évolution de gonflement en fonction de la quantité totale de moles adsorbées. Les résultats de Bustin (2004); Day et al. (2008); Levine (1996) sont présentés. Pour des gonflements faibles, la relation est clairement non linéaire. L'adsorption est importante à faible pression ambiante dans ces milieux microporeux sans pour autant induire un gonflement très important. A

4.2. *Modèle poromécanique avec porosité variable pour la prédiction du gonflement induit par adsorption en milieux microporeux*

plus haute pression ambiante et pour des gonflements plus importants, la relation semble devenir linéaire. A très haute pression ambiante, Day et al. (2008) ont observé un plateau de gonflement. Cela n'a pas été observé dans cette étude ni par Bustin (2004) ou Levine (1996).

On peut faire ici plusieurs remarques :

- Dans les différentes études expérimentales, les quantités mesurables sont les quantités adsorbées d'excès. Aussi les différents auteurs ayant présenté l'évolution du gonflement en fonction des quantités totales interstitielles ont estimé ces valeurs en ce plaçant dans le formalisme de Gibbs sans corriger la variation de porosité induite par gonflement comme nous avons pu le faire dans cette étude.
- Ces courbes gonflement/quantités totales adsorbées ne peuvent être tracées pour les grandeurs mesurées par Ottiger et al. (2008b) car les mesures n'ont pas été effectuées simultanément ni sur le même échantillon.
- Par ailleurs les données expérimentales présentées par Bustin (2004); Day et al. (2008); Levine (1996) ne peuvent être utilisées pour tester la performance de notre modèle car de nombreuses propriétés poromécaniques sont inconnues.
- Ainsi il est nécessaire de mettre en oeuvre une nouvelle campagne expérimentale où les quantités de gaz adsorbées et les gonflements induits sont mesurés simultanément et où le matériel est complètement caractérisé d'un point de vue poromécanique pour permettre la validation de modèle.



(¹) Experiment Bustin (2004) , (²) Experiment (sample #1 in Day et al. (2008)) ,
 (³) Experiment (sample #3 in Day et al. (2008)) , (⁴) Experiment Levine (1996) , (⁵) This study

FIGURE 4.5 – Évolution du gonflement en fonction des quantités totales adsorbées : comparaison entre le modèle et différents résultats de la littérature.

4.3 Un nouveau montage expérimental permettant la mesure in situ simultanée des quantités adsorbées et du gonflement induit par l'adsorption en milieux microporeux

4.3.1 Matériau, échantillon et procédure expérimentale

Des expériences préliminaires de mesures simultanées de quantités adsorbées et de gonflements induits ont été réalisées sur des échantillons cylindriques (diamètre 18mm, hauteur 20mm) de charbons actifs (Chemviron). Les propriétés poreuses de ce charbon ont été caractérisées par porosimétrie à gaz (Micromeritics ASAP 2020). À partir des mesures d'isotherme d'adsorption à l'azote à 77K, la distribution de taille de pore du charbon est estimée à l'aide du modèle proposé par Malheiro et al. (2014) et représentée à la figure 4.6. L'échantillon est fortement microporeux et sa surface spécifique est de $1090\text{m}^2\text{g}^{-1}$. La porosité se répartie de la façon suivante : microporosité ($\phi_\mu = 25\%$), macroporosité ($\phi_M = 45\%$), fraction volumique solide ($\phi_S = 30\%$). L'échantillon est donc très fortement poreux ($\phi_{\text{totale}} = 70\%$) et son utilisation industrielle est dédiée à la dépollution par filtration.

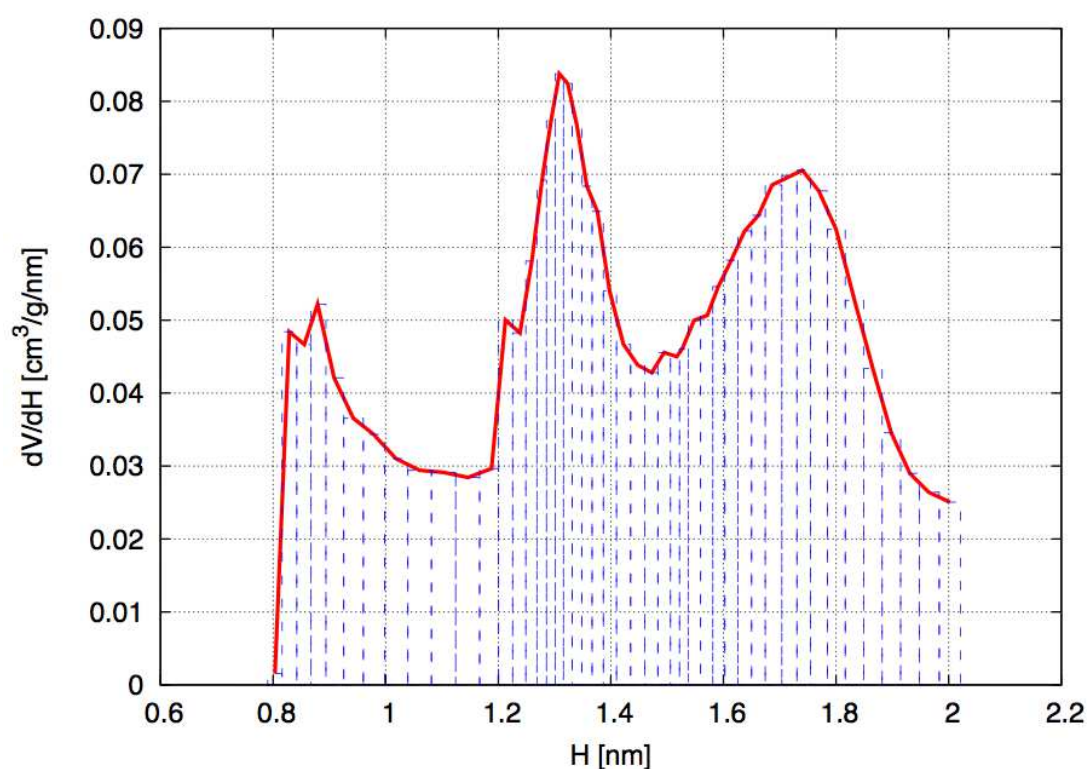


FIGURE 4.6 – Distribution de taille de pore du charbon actif étudié.

La mesure expérimentale simultanée de quantités adsorbées d'excès et des gonflements induits est réalisée en couplant une technique manométrique de mesure de quantités adsorbées et une technique de mesure de déplacement en plein champ par corrélation d'images numériques (Figure 4.7).

4.3. Un nouveau montage expérimental permettant la mesure *in situ* simultanée des quantités adsorbées et du gonflement induit par l'adsorption en milieux microporeux

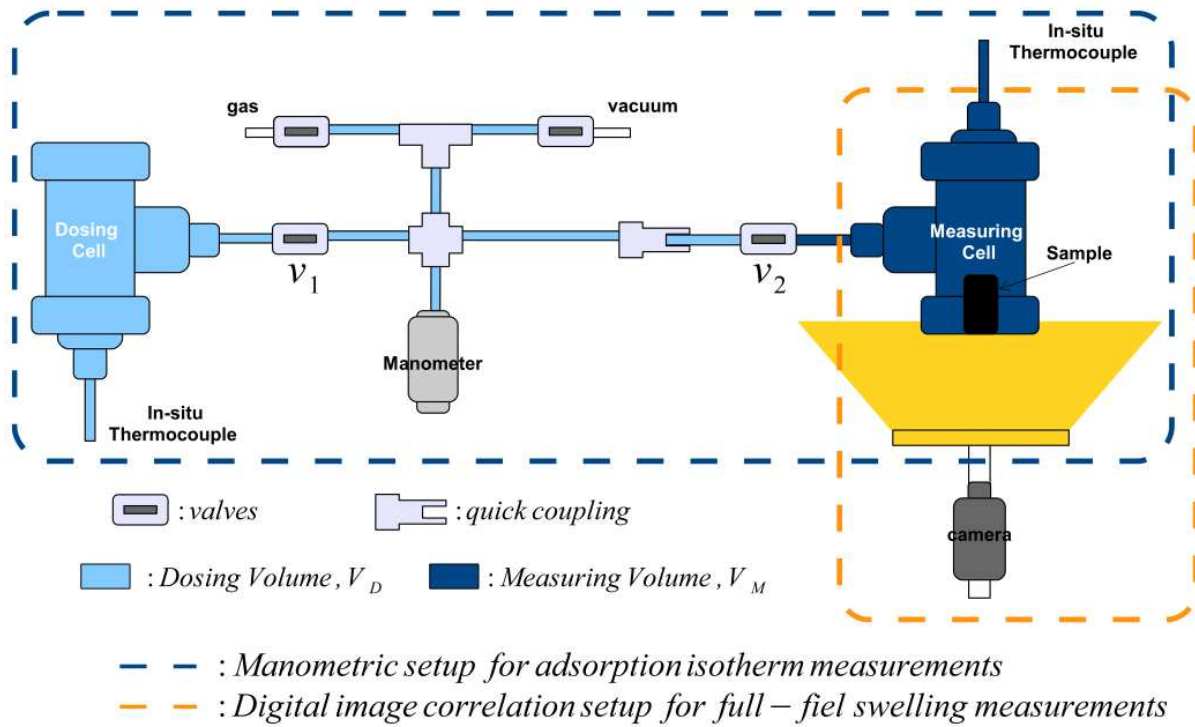


FIGURE 4.7 – Banc d'essai expérimental pour la mesure simultanée de quantités adsorbées et de gonflement induit par adsorption.

4.3.2 Mesure des quantités adsorbées

L'isotherme d'adsorption est construite incrémentalement en estimant les quantités adsorbées d'excès à l'équilibre thermodynamique pour différent pas de pression ambiante. Tous les volumes en présence sont préalablement calibré à l'hélium qui ne s'adsorbe pas sur le substrat de charbon. Au pas de pression i , la quantité adsorbée d'excès est donnée par :

$$n_{ex}^{(i)} = n_{ex}^{(i-1)} + \Delta n_{ex}^{(i)} = n_{ex}^{(i-1)} + \frac{\rho_{eq}^{(i-1)} V_M}{M} + \frac{\rho_D^{(i)} V_D}{M} - \frac{\rho_{eq}^{(i)} (V_D + V_M)}{M} \quad (4.13)$$

où $\rho_D^{(i)}$, qui est la densité de gaz dans la cellule doseuse avant adsorption lorsque la cellule de mesure est isolée (voir figure 4.7), est estimé au travers de l'équation d'état du gaz en connaissant le volume dosant V_D , la pression et la température à l'équilibre. $\rho_{eq}^{(i)}$ est la densité de gaz dans le volume total $V_D + V_M$ ou le volume de mesure V_M , estimé à l'équilibre après adsorption. M est la masse molaire du gaz adsorbé.

4.3.3 Mesure du gonflement induit par adsorption

Le gonflement induit par adsorption est estimé par corrélation d'images numériques (DIC) en utilisant le logiciel Icasoft (Morestin et al., 1996; Mguil-Touchal et al., 1996). Ce logiciel a déjà été utilisé dans divers domaines comme la rupture dynamique (Grégoire et al., 2009) ou l'endommagement de biomatériaux (Grégoire et al., 2011b). La corrélation d'images est utilisée ici pour quantifier le gonflement volumique en mesurant le déplacement plein champ sur la face inférieure de l'échantillon en contact avec une cellule saphir transparente (voir figure 4.7). Pratiquement, différentes images correspondant à une image de référence et différentes images d'états déformés sont acquises par une caméra

numérique 5Mb et représentées par des fonctions discrètes représentant les différents niveaux de gris de chaque pixel. Ensuite les champs de déplacement correspondant à chaque état déformé sont estimés en minimisant un coefficient de corrélation croisé sur un ensemble de pixels de l'image de référence. Les échantillons ne sont pas mouchetés et la texture naturelle du charbon est suffisante pour effectuer la corrélation. Les détails sur cette technique sont présentés dans (Grégoire, 2008; Grégoire et al., 2009, 2011b). Enfin les champs de déformation radiale induits par adsorption sont estimés et moyennés sur la zone d'intérêt. L'échantillon étant cylindrique, le gonflement volumique est estimé comme étant égal à trois fois la moyenne obtenue. Cette opération de moyenne est effectuée pour se rapprocher des résultats déjà présentés dans la littérature mais l'intérêt principal de la méthode est justement de pouvoir obtenir une information de déformation en plein champ sur toute la zone d'intérêt pour ainsi étudier des champs non homogènes de déformation induit par des discontinuités matérielles et/ou géométriques. Dans cette étude préliminaire, seuls des cas présentant des déformations homogènes de gonflement volumique ont été étudiés.

4.3.4 Résultats

Les figures 4.8 et 4.9 présentent des résultats préliminaires en terme de mesures simultanées de quantités adsorbées et de gonflement induit sur un charbon actif saturé de CO₂ pur et de CH₄ pur à $T = 30^{\circ}C$.

La figure 4.8.a présente une image de référence de l'échantillon acquise par la caméra numérique après purification mais avant adsorption.

La figure 4.8.b présente une image de l'état déformé de l'échantillon pour une pression ambiante de CO₂ de 45 bar.

La figure 4.8.c présente la norme du champ de déplacement estimé par corrélation d'images entre l'état déformé à 45 bar de CO₂ et l'état de référence. Les cercles concentriques montrent que l'on observe bien un gonflement homogène de la matrice.

La figure 4.8.d présente le champ de déformation radiale correspondant. On observe bien un champ de déformation radiale quasiment homogène.

La figure 4.9.a présente l'évolution des quantités adsorbées d'excès pour le CO₂ et le CH₄ à $T = 30^{\circ}C$.

La figure 4.9.b présente l'évolution de la déformation volumique de gonflement pour le CO₂ et le CH₄ à $T = 30^{\circ}C$. On peut observer que les isothermes d'adsorption/désorption sont purement réversibles alors que des déformations permanentes sont observées sur la courbe de gonflement. Cela est confirmé par les figures 4.9.c et d, où différents cycles d'adsorption/désorption ont été réalisés au CO₂. Cependant, cela n'a pas encore été observé dans la littérature et d'autres essais doivent encore être réalisés pour le confirmer.

4.3. Un nouveau montage expérimental permettant la mesure in situ simultanée des quantités adsorbées et du gonflement induit par l'adsorption en milieux microporeux

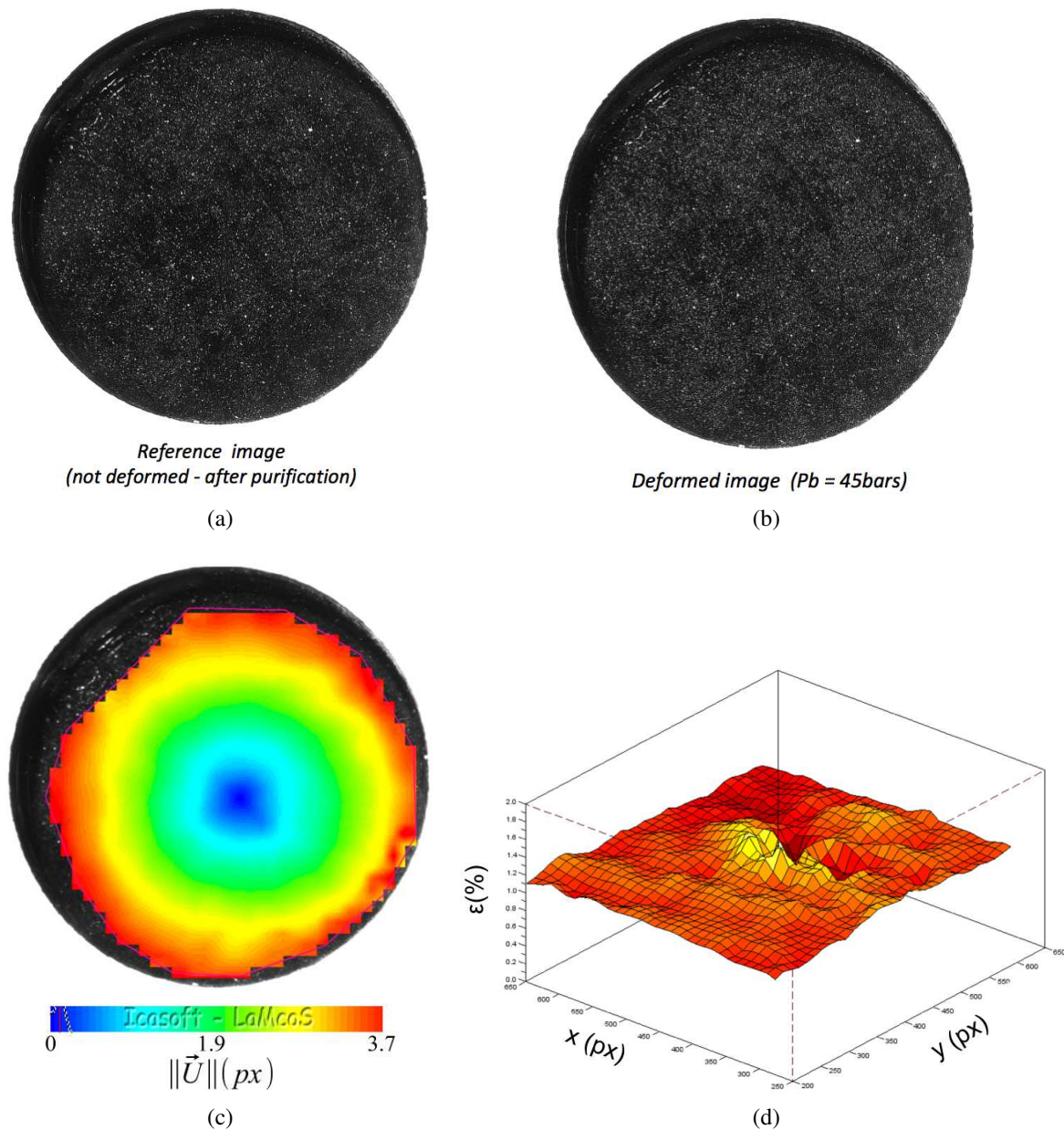


FIGURE 4.8 – Mesures simultanées de gonflement et d'adsorption sur un charbon actif saturé avec du CO₂ pur et du CH₄ pur à $T = 30^{\circ}C$: (a) image de référence, (b) image déformée à 45 bar de CO₂, (c) norme du champ de déplacement à 45bar de CO₂ et (d) champ de déformation radiale à 45bar de CO₂.

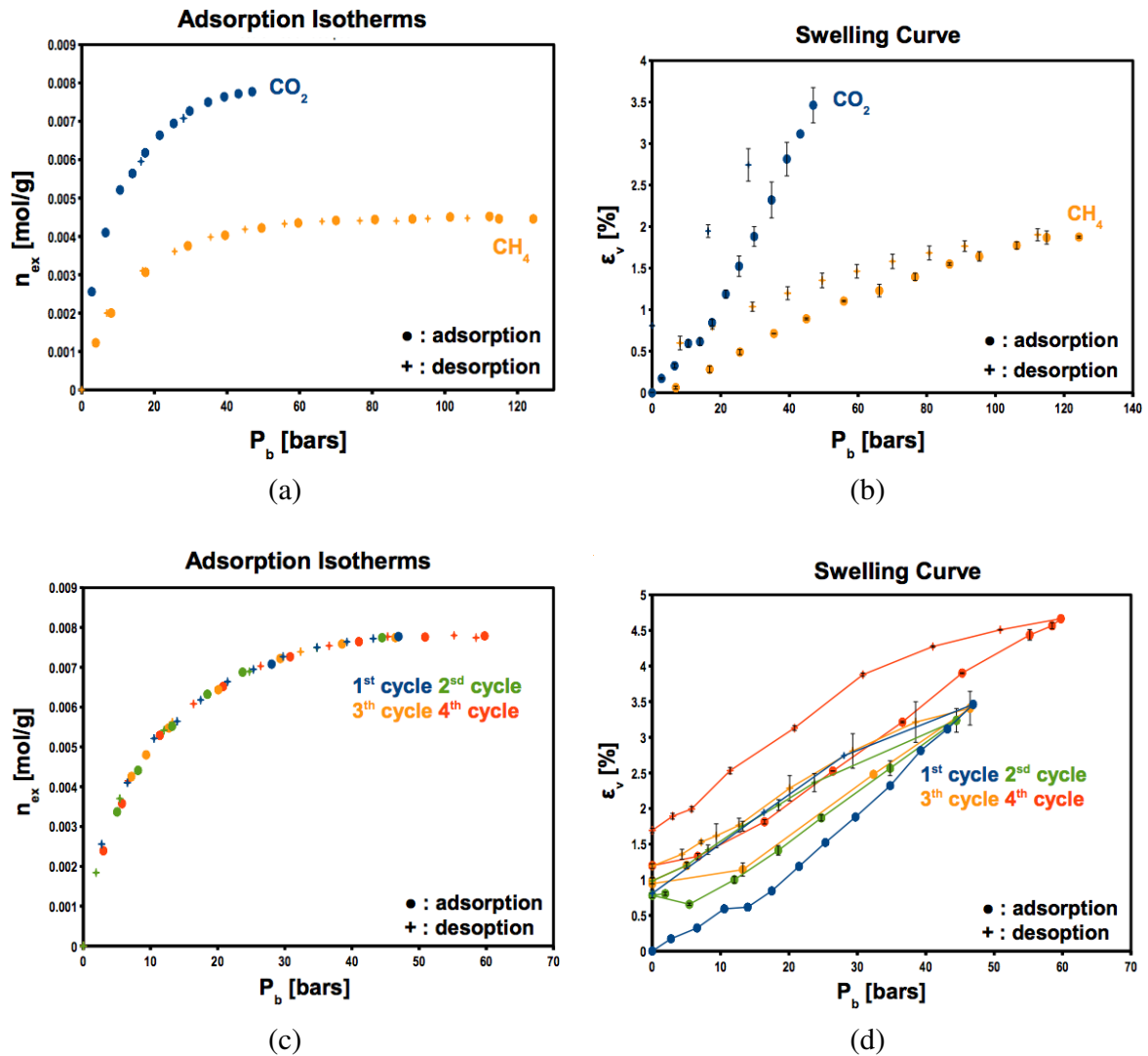


FIGURE 4.9 – Mesures simultanées de gonflement et d’adsorption sur un charbon actif saturé avec du CO_2 pur et du CH_4 pur à $T = 30^\circ C$: (a) évolution des quantités adsorbées d’excès pour le CO_2 et le CH_4 , (b) évolution de la déformation volumique de gonflement pour le CO_2 et le CH_4 , (c) évolution des quantités adsorbées d’excès pour des cycles d’adsorption/désorption au CO_2 et (d) évolution de la déformation volumique de gonflement pour des cycles d’adsorption/désorption au CO_2 .

4.4 Conclusion

Différentes actions ont été entreprises dans le but de préciser les couplages entre adsorption et gonflement dans les milieux microporeux. En poromécanique classique, une augmentation de la pression ambiante devrait amener le squelette poreux à se contracter. Pour des milieux microporeux, le confinement de la phase adsorbée dans les micropores (de l'ordre du nanomètre) a pour conséquence une déformation volumique de gonflement de la phase solide. En pratique, ce gonflement de la phase solide peut avoir de grandes conséquences industrielles. Par exemple, pour améliorer la production de champs de lits de charbon (coal bed methane) et diminuer la quantité de CO₂ présente dans l'atmosphère, une technique vise à injecter du CO₂ en sous-sol. Comme le CO₂ s'adsorbe préférentiellement au CH₄, le premier vient chasser le second et la production est censée être améliorée. Cependant, comme le gonflement induit par le CO₂ est plus important que celui induit par le CH₄, la matrice microporeuse gonfle par rapport à son état d'équilibre géologique précédent et, de ce fait, vient refermer le réseau naturel de microfissures qui assurait le transport et pilotait la perméabilité global du champ. De ce fait, au lieu d'observer une amélioration de la production de méthane, on observe au contraire une chute de production.

Un nouveau cadre poromécanique a été proposé pour relier l'incrément de gonflement à un incrément de pression ambiante, au confinement du pore et à la porosité. Le confinement est déduit de mesures expérimentales d'isotherme d'adsorption. A chaque pas de chargement, les propriétés poromécaniques sont mises à jour pour tenir compte des variations de porosité dues au gonflement de la matrice solide. Les gonflements prédits ont été comparés à des résultats expérimentaux de la littérature et un bon accord est trouvé. Cependant il manque encore des données expérimentales dans la littérature pour réellement tester les performances et valider la représentativité de ce type de modèle.

Un nouveau banc d'essai a donc été mis au point permettant la mesure simultanée et in-situ des quantités adsorbées par technique manométrique et du champ de déplacement induit par corrélation d'images numériques. Des expériences préliminaires sur des échantillons de charbon actif, saturés de méthane ou de dioxyde de carbone à trente degré celsius, ont montré la validité du montage expérimental. Le champ de déplacement est obtenu sur toute la surface de l'échantillon et peut permettre de caractériser des gradients de déformation lors du gonflement. Dans le cas de cycles d'adsorption/désorption réalisés sur un échantillon de charbon actif, un gonflement isotrope est obtenu mais des déformations permanentes sont observées alors que les isothermes d'adsorption/désorption sont parfaitement réversibles. D'autres essais doivent être réalisés pour confirmer ces déformations irréversibles, non observées pour l'instant dans la littérature.

4.5 Bibliographie du chapitre

Bangham, D. H., Fakhoury, N., 1928. The expansion of Charcoal accompanying Sorption of Gases and Vapours. *Nature* 122 (3079), 681—682.

Barboura, S. S., 2007. Modélisation micromécanique du comportement de milieux poreux non linéaires : Applications aux argiles compactées. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie.

Brochard, L., Vandamme, M., Pellenq, R. J., 2012. Poromechanics of microporous media. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 60, 606–622.

Bustin, R. M., 2004. Acid Gas Sorption by British Columbia Coals : Implications for Permanent Disposal

-
- of Acid Gas in Deep Coal Seams and Possible Co-Production of Methane. Tech. Rep. May, The University of British Columbia.
- Coussy, O., 1991. *Mécanique des milieux poreux*, editions t Edition.
- Day, S., Fry, R., Sakurovs, R., Mar. 2008. Swelling of Australian coals in supercritical CO₂. *International Journal of Coal Geology* 74 (1), 41–52.
- Durucan, S., Shi, J., Jan. 2009. Improving the CO₂ well injectivity and enhanced coalbed methane production performance in coal seams. *International Journal of Coal Geology* 77 (1-2), 214–221.
- Gentzis, T., Deisman, N., Chalaturnyk, R. J., Feb. 2007. Geomechanical properties and permeability of coals from the Foothills and Mountain regions of western Canada. *International Journal of Coal Geology* 69 (3), 153–164.
- Grégoire, D., 2008. Initiation, Propagation, Arrêt et Redémarrage de Fissures sous Impact. Ph.D. thesis, INSA de Lyon.
- Grégoire, D., Loh, O. Y., Juster, A. L., Espinosa, H. D., Feb. 2011a. In-situ AFM Experiments with Discontinuous DIC Applied to Damage Identification in Biomaterials. *Experimental Mechanics* 51 (4), 591–607.
- Grégoire, D., Maigre, H., Morestin, F., Jun. 2009. New experimental techniques for dynamic crack localization. *Revue européenne de mécanique numérique* 18 (3-4), 255–283.
- Grégoire, D., Rojas-Solano, L., Khaddour, F., Vermorel, R., Pijaudier-Cabot, G., 2011b. Coupling between damage and permeability in porous geomaterials in the context of CO₂ storage and petroleum engineering. In : 48th Annual Technical Conference of Society of Engineering Sciences (SES2011), Evanston, USA. Evanston, USA.
- Grosman, A., Ortega, C., 2009. Influence of Elastic Strains on The Adsorption Process in Porous Materials. An Experimental Approach. *Langmuir* 25 (14), 8083–8093.
- Halpin, J. C., Kardos, J. L., 1976. The Halpin-Tsai Equations : A Review. *Polymer Engineering & Science* 16 (5), 344–352.
- Hol, S., Spiers, C. J., Nov. 2012. Competition between adsorption-induced swelling and elastic compression of coal at CO₂ pressures up to 100MPa. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 60 (11), 1862–1882.
- Knorst-Fouran, A., 2010. Contribution à l'étude de propriétés interfaciales d'alcanes confinés par simulation moléculaire de type Monte Carlo. Ph.D. thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour.
- Larsen, J. W., Jan. 2004. The effects of dissolved CO₂ on coal structure and properties. *International Journal of Coal Geology* 57 (1), 63–70.
- Levine, J. R., Jan. 1996. Model study of the influence of matrix shrinkage on absolute permeability of coal bed reservoirs. *Geological Society, London, Special Publications* 109 (1), 197–212.
- Malheiro, C., Mendiboure, B., Plantier, F., Guatarbes, B., Miqueu, C., 2014. An accurate model for the filling pressure of carbon slit-like micropores : application to the pore size distribution calculation. *submitted*.

-
- Meehan, F. T., Jun. 1927. The Expansion of Charcoal on Sorption of Carbon Dioxide. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 115 (770), 199–207.
- Mguil-Touchal, S., Morestin, F., Brunet, M., 1996. Various experimental applications of digital image correlation method. In : Actes du Colloque National Mécamat'96. pp. 179–182.
- Morestin, F., Touchal, S., Vacher, P., Dumoulin, S., 1996. Icasoft (<http://icasoft.insa-lyon.fr>).
- Mori, T., Tanaka, K., 1973. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta metallurgica* 21 (5), 571–574.
- Nikoosokhan, S., 2013. Stockage géologique du dioxyde de carbone dans les veines de charbon : du matériau au réservoir. Ph.D. thesis, Université Paris-Est.
- Ottiger, S., Pini, R., Storti, G., Mazzotti, M., Mar. 2008a. Competitive adsorption equilibria of CO₂ and CH₄ on a dry coal. *Adsorption* 14 (4-5), 539–556.
- Ottiger, S., Pini, R., Storti, G., Mazzotti, M., 2008b. Competitive adsorption equilibria of CO₂ and CH₄ on a dry coal. *Adsorption* 14 (4), 539–556.
- Pan, Z., Connell, L., Mar. 2007. A theoretical model for gas adsorption-induced coal swelling. *International Journal of Coal Geology* 69 (4), 243–252.
- Perrier, L., Grégoire, D., Plantier, F., Pijaudier-Cabot, G., 2014a. Experimental and Modeling Investigations of Adsorption-induced Swelling and Damage in Microporous Materials. *Procedia Materials Science* 3, 1263 – 1268.
- Perrier, L., Pijaudier-Cabot, G., Grégoire, D., 2014b. Poromechanics of adsorption-induced swelling in microporous materials : a new poromechanical model taking into account strain effects on adsorption. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, May2014.
- Pijaudier-cabot, G., Vermorel, R., Miqueu, C., Mendiboure, B., 2011. Comptes Rendus Mécanique Revisiting poromechanics in the context of microporous materials. *Comptes Rendus Mécanique* 1, 1–9.
- Pini, R., 2009. ENHANCED COAL BED METHANE RECOVERY FINALIZED TO CARBON DIOXIDE STORAGE. Ph.D. thesis, ETH ZURICH.
- Pini, R., Ottiger, S., Burlini, L., Storti, G., Mazzotti, M., 2009. Role of adsorption and swelling on the dynamics of gas injection in coal. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth (1978–2012)* 114 (B4).
- Sutton, M. A., Cheng, M., Peters, W. H., Chao, Y. J., McNeill, S. R., 1986. Application of an optimized digital correlation method to planar deformation analysis. *Image and Vision Computing* 4 (3), 143—150.
- Sutton, M. A., Wolters, W. J., Peters, W. H., Ranson, W. F., McNeill, S. R., 1983. Determination of displacements using an improved digital correlation method. *Image and Vision Computing* 1 (3), 133—139.
- van Bergen, F., Pagnier, H., Krzystalik, P., 2006. Field experiment of enhanced coalbed methane-CO₂ in the upper Silesian basin of Poland. *Environmental Geosciences* 13 (3), 201–224.

-
- Vandamme, M., Brochard, L., Lecampion, B., Coussy, O., Oct. 2010. Adsorption and strain : The CO₂-induced swelling of coal. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 58 (10), 1489–1505.
- Vermorel, R., Pijaudier-Cabot, G., 2014. Enhanced continuum poromechanics to account for adsorption induced swelling of saturated isotropic microporous materials. *European Journal of Mechanics-A/Solids* 44, 148–156.

Chapitre 5

Conclusion générale

À travers ce mémoire d'habilitation à diriger des recherches, nous avons pu étudier quelques unes des caractéristiques particulières des milieux poreux peu perméables et préciser les liens entre endommagement, fissuration, évolution du réseau poreux et propriétés de perméation.

À la rupture, ces milieux poreux peu perméables ont un comportement quasi-fragile et donc, après le domaine élastique, leur réponse mécanique est caractérisée par une partie adoucissante non-linéaire et irréversible. Elle se traduit par une dégradation des propriétés élastiques et une faible déformation permanente. Cette dégradation est due à l'initiation et au développement de microfissures, dès la phase pré-pic, qui coalescent jusqu'à former une macrofissure qui propage, entraînant la ruine de la structure. Le siège de ces microfissures est appelé zone d'élaboration (FPZ). Une fois la macrofissure constituée, la FPZ se localise en pointe de fissure où la dégradation continue à évoluer. La caractérisation (taille, évolution) de la zone d'élaboration est au cœur des problématiques actuelles en mécanique de la rupture et de l'endommagement des matériaux quasi-fragiles.

Dans ces milieux peu perméables, le libre parcours moyen des molécules de fluide est proche de la distance inter-parois du pore et de ce fait, l'écoulement est fortement influencé par les collisions entre les particules de fluide et ces parois. Ainsi l'écoulement ne satisfait plus au régime visqueux de Poiseuille simple mais on observe un glissement sur les parois (effet de Klinkenberg) dû aux chocs particules/parois. Ce glissement se traduit par une dépendance de la perméabilité à la pression du fluide considéré.

Enfin, les interactions entre les particules de fluide et les parois des pores se traduisent également dans les micro et mésopores par le phénomène d'adsorption. L'adsorption est un phénomène qui se produit à toute interface solide-fluide et se traduit par une augmentation de la concentration du fluide au voisinage du solide. Les particules de fluide suffisamment proche du solide se lient à ce dernier : elles s'adsorbent. L'adsorption se traduit par des profils de densité de fluide inhomogènes au sein du pore du fait des interactions fluide-solide sur les parois du pore. A l'interface, la densité est supérieure à la densité bulk observée à l'extérieur du milieu ou au centre du pore. Si le diamètre du pore diminue, les interactions augmentent, des effets de confinement sont observés et la densité au centre du pore n'est plus égale à la densité bulk à l'extérieur du milieu. En poromécanique classique, une augmentation de la pression ambiante devrait amener le squelette poreux à se contracter. Pour des milieux microporeux, le confinement de la phase adsorbée dans les micropores (de l'ordre du nanomètre) a pour conséquence une déformation volumique de gonflement de la phase solide.

Pour préciser ces couplages, différentes actions ont été mises en oeuvre :

- Pour caractériser le comportement à la rupture de la phase solide, des essais de flexions trois points ont été réalisés afin de construire une base de données expérimentales permettant la validation de modèles numériques. Pour étudier à la fois les effets d'échelles et les effets de bords, quatre tailles d'éprouvettes différentes (hauteurs (50, 100, 200, 400) mm) et différentes géométries de pré-entailles (éprouvette entaillée à la moitié, au cinquième ou non-entaillée) ont été testées. Pour caractériser le processus de fissuration de façon globale, des courbes forces/ouverture d'entaille (CMOD) et des courbes forces/déflexion ont été acquises. Les essais ont été pilotés en ouverture d'entaille pour pouvoir étudier la partie adoucissante post-pic. Même si ces résultats peuvent permettre la validation de lois d'effet d'échelle en comparant les valeurs aux pics, c'est réellement cette partie adoucissante post-pic qui est discriminante pour tester la validité de modèles numériques. Pour caractériser le processus de fissuration à l'échelle locale, des capteurs acoustiques ont été utilisés pour localiser les lieux d'endommagement et ainsi caractériser la cinétique d'évolution de la zone d'élaboration, siège de la microfissuration.
- Un modèle numérique mésoscopique a également été développé et utilisé afin d'étudier la cinétique d'évolution de cette zone d'élaboration (FPZ). Pour s'assurer que les résultats fournis par le modèle étaient physiquement fondés, plusieurs comparaisons avec notre base de données expérimentales ont été réalisées. Des comparaisons en terme de courbes force/CMOD ont montré que le modèle mésoscopique était représentatif du processus global de fissuration pour toutes les tailles et toutes les géométries d'entailles testées. Des comparaisons en terme de carte d'énergie dissipée, d'histogramme de distances relatives entre points endommagés et d'analyse du processus de localisation à l'aide de fonctions de Ripley, ont montré que le modèle mésoscopique était également représentatif du processus local de fissuration.
- Dans un objectif de calculs de structures ou de simulations de réservoirs géologiques, l'échelle mésoscopique n'est pas l'échelle de modélisation pertinente. Même si les performances des moyens de calcul croissent de façon exponentielle, il n'est pas raisonnable de vouloir représenter explicitement des hétérogénéités de l'ordre de quelques millimètres ou centimètres pour prédire la réponse globale d'une structure de plusieurs dizaines de mètres jusqu'au kilomètre. Ainsi il est toujours nécessaire d'améliorer la représentativité des modèles macroscopiques pour la prédiction de la rupture des matériaux fragiles. Les modèles non-locaux, permettant de régulariser le problème numérique en s'affranchissant des problèmes de localisation et de dépendances aux maillages, semblent être les meilleurs candidats. Il a été montré que les modèles non-locaux classiques, à longueur interne constante, ont plusieurs limitations et ne sont pas représentatifs des effets d'échelle ou des effets de bords. Afin de préciser la forme et surtout l'évolution au cours de l'endommagement de la fonction poids à introduire dans un modèle non-local pour en améliorer la représentativité, un nouveau modèle non-local intégral a été développé où la fonction poids n'est pas choisie a priori mais reconstruite a posteriori à partir des interactions non-locales qui apparaissent et évoluent au fur et à mesure de la rupture et de l'endommagement de la structure. Des cas tests académiques unidimensionnels ont montré que le nouveau modèle non-local intégral ainsi reconstruit ne souffre pas des mêmes limitations que celles observées pour les modèles non-locaux classiques. Des résultats préliminaires de modélisation des essais de flexion 3 points sont prometteurs.

-
- Afin de prédire les perméabilités, intrinsèque et apparente, du milieu, un nouveau modèle a été développé où le réseau poreux est reconstruit de manière fictive sous la forme d'un assemblage aléatoire mais hiérarchique de capillaires de différents diamètres à partir d'une mesure de distribution de tailles de pore, par exemple par intrusion de mercure. Les lois d'écoulement de Poiseuille et de Knudsen sont ensuite combinées à l'échelle du capillaire puis transférées à l'échelle macroscopique au travers de l'assemblage réalisé. Une comparaison avec la loi macroscopique d'écoulement de Darcy permet d'estimer non seulement la perméabilité intrinsèque du milieu mais également la perméabilité apparente et leurs évolutions dès lors que la distribution de tailles de pore est connue.
 - Des mesures expérimentales de perméabilité radiale sous charge ont permis de valider la représentativité du modèle pour différents niveaux d'endommagement d'éprouvettes en mortier. Différents gaz ont été utilisés (azote, méthane, dioxyde de carbone) et pour chacun des gaz, une bonne concordance avec les résultats fournis par le modèle est observée, la seule donnée d'entrée étant la distribution de taille de pore du milieu poreux considéré.
 - Le modèle et le banc d'essai expérimental ont ensuite été étendus pour étudier l'écoulement de mélange de gaz. Une sélectivité naturelle du milieu poreux due à la contribution de Knudsen à l'écoulement est mise en évidence par le modèle et confirmée expérimentalement.
 - Enfin, un nouveau cadre poromécanique a été proposé pour relier l'incrément de gonflement à un incrément de pression ambiante, au confinement du pore et à la porosité. Le confinement est déduit de mesures expérimentales d'isotherme d'adsorption. A chaque pas de chargement, les propriétés poromécaniques sont mises à jour pour tenir compte des variations de porosité dues au gonflement de la matrice solide. Les gonflements prédits ont été comparés à des résultats expérimentaux de la littérature et un bon accord est trouvé. Cependant il manque encore des données expérimentales dans la littérature pour réellement tester les performances et valider la représentativité de ce type de modèle.
 - Un nouveau banc d'essai a donc été mis au point permettant la mesure simultanée et in-situ des quantités adsorbées par technique manométrique et du champ de déplacement induit par corrélation d'images numériques. Des expériences préliminaires sur des échantillons de charbon actif, saturés de méthane ou de dioxyde de carbone à trente degrés celsius, ont montré la validité du montage expérimental. Le champ de déplacement est obtenu sur toute la surface de l'échantillon et peut permettre de caractériser des gradients de déformation lors du gonflement. Dans le cas de cycles d'adsorption/désorption réalisés sur un échantillon de charbon actif, un gonflement isotrope est obtenu mais des déformations permanentes sont observées alors que les isothermes d'adsorption/désorption sont parfaitement réversibles. D'autres essais doivent être réalisés pour confirmer ces déformations irréversibles, non observées pour l'instant dans la littérature.

Chapitre 6

Projet scientifique : vers un simulateur prédictif et physiquement fondé à l'échelle d'une structure

Sommaire

6.1	Introduction	100
6.1.1	Illustration sur un cas industriel : simulation d'un réservoir non conventionnel à faible perméabilité	100
6.1.2	Objectifs et méthodologie	101
6.2	Représentation physiquement fondée de la propagation de fissure en milieu quasi-fragile	102
6.2.1	Analyse numérique et expérimentale des corrélations induites à l'échelle mésoscopique	102
6.2.2	Transfert d'échelle et simulations à l'échelle macroscopique	102
6.3	Couplages endommagement/perméation au voisinage d'une fissure	103
6.3.1	Couplages hydromécaniques et simulations à l'échelle mésoscopique	103
6.3.2	Prédiction directe à partir des PSD des propriétés de perméation, extension à l'écoulement multiphasique	103
6.3.3	Évolution sous charge de la distribution de tailles de pore	104
6.4	Influence des nanopores sur le comportement macroscopique	104
6.4.1	Couplage adsorption/gonflement en milieu libre et fissuration induite par adsorption	104
6.4.2	Homogénéisation des effets de surface et en milieux microporeux	105
6.5	Bibliographie du chapitre	106

6.1 Introduction

6.1.1 Illustration sur un cas industriel : simulation d'un réservoir non conventionnel à faible perméabilité

Pour illustrer les enjeux et verrous scientifiques, on considère le cas industriel de la stimulation d'un réservoir non conventionnel pour en extraire le gaz naturel (voir figure 6.1).

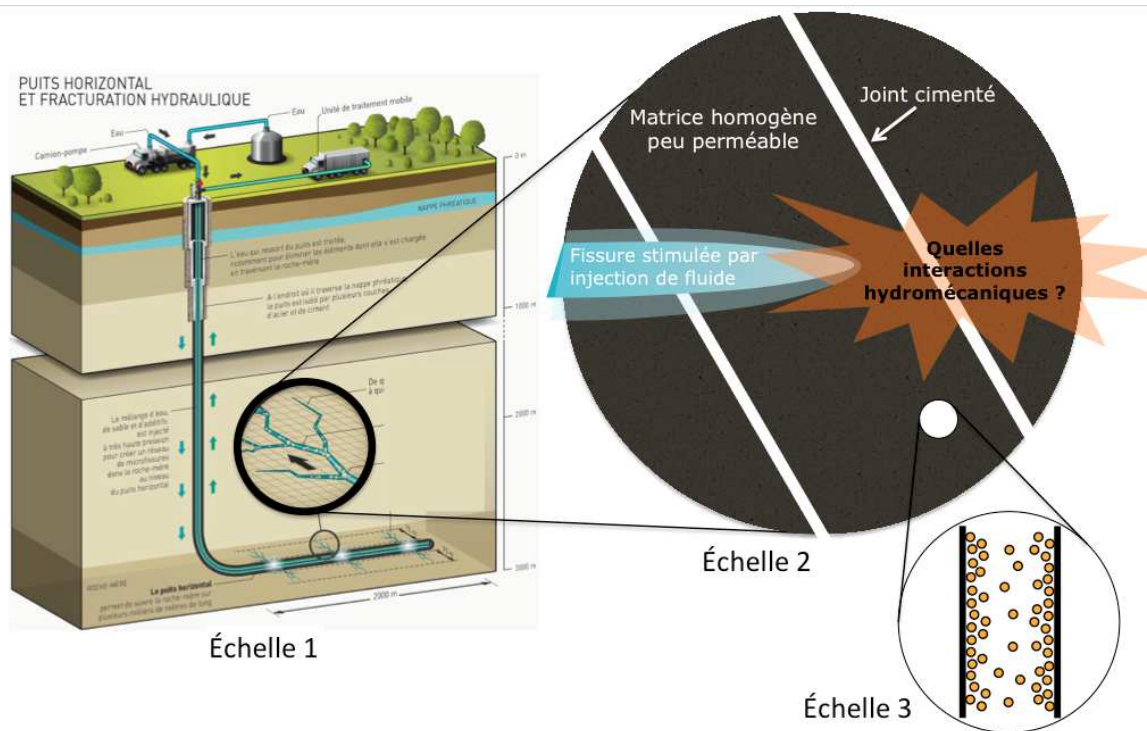


Illustration de gauche issue de total.com

FIGURE 6.1 – Simulation d'un réservoir non conventionnel à faible perméabilité.

Au contraire d'un réservoir conventionnel, la roche combine ici à la fois une faible porosité et une faible perméabilité. De ce fait, le gradient de pression naturel n'est pas suffisant pour extraire le gaz et il faut stimuler la roche par fracturation pour augmenter sa perméabilité. La technique commune est la fracturation hydraulique, qui consiste à générer une ou plusieurs fissures à partir d'un puits rempli d'eau et mis sous pression. Cette technique, interdite en France pour la récupération d'hydrocarbure, est utilisée dans de nombreux pays même si elle est peu efficace (rendement de l'ordre de 6 à 10%) car la fissuration induite reste très localisée dans une matrice très peu perméable. En fait la technique a été déployée sans recherche académique amont importante et de ce fait les couplages complexes mis en jeu sont mal connus. Pour améliorer la technique ou proposer des alternatives, il est nécessaire de préciser ces couplages, notamment la propagation d'une fissure dans un milieu quasi-fragile et son interaction avec le réseau secondaire de fissures ou de joints rocheux (échelle 1 à la figure 6.1). Il faut préciser également les couplages endommagement perméabilité au voisinage de la fissure créée mais aussi l'évolution

du réseau poreux dans la matrice peu perméable où est stocké le fluide (échelle 2 à la figure 6.1). En fait le gaz est piégé sous forme adsorbée dans des pores de très faibles diamètres, de l'ordre de quelques nanomètres. De ce fait, même si la roche est peu poreuse, sa surface spécifique est grande et l'influence de ces nanopores sur le comportement macroscopique global ne peut être négligé (échelle 3 à la figure 6.1).

Ce cas concret de génie pétrolier n'est qu'un exemple parmi d'autres car les mêmes couplages sont présents dans beaucoup d'autres domaines comme la géothermie profonde, la sûreté nucléaire ou le stockage d'énergie ou de déchet. Les milieux peu perméables sont nombreux et variés et assurer le maintien de cette faible perméabilité ou au contraire lutter contre reste un challenge scientifique.

6.1.2 Objectifs et méthodologie

Les objectifs du projet sont de préciser les liens entre fissuration, évolution du réseau poreux et propriétés de perméation. Le but étant d'identifier et de transférer d'une échelle à l'autre les grandeurs d'intérêt pour remonter au final à l'échelle de la structure. La finalité est d'obtenir un simulateur prédictif et physiquement fondé à l'échelle d'une structure géologique.

Ce projet est en fait une suite logique aux travaux présentés précédemment dans ce mémoire. Il est donc également structuré en trois parties :

- La première partie concerne la phase solide uniquement et consiste à améliorer la description des corrélations induites lors de l'endommagement et de la microfissuration.
- La deuxième concerne la phase solide et la phase fluide à l'échelle des mésopores et concerne les couplages entre chargement mécanique et propriétés de perméation.
- La troisième concerne l'influence des pores de tailles nanoscopiques sur le comportement global.

6.2 Représentation physiquement fondée de la propagation de fissure en milieu quasi-fragile

6.2.1 Analyse numérique et expérimentale des corrélations induites à l'échelle mésoscopique

Cette partie représente une perspective à court terme des travaux présentés en partie 2.3.4.2. A partir de l'analyse par fonctions de Ripley, on cherchera à caractériser les évolutions des longueurs de corrélations extraites pour toutes les tailles de poutre et les géométries testées expérimentalement en partie 2.2. Ainsi on pourra caractériser les effets d'échelle et les effets de bords sur le développement de la zone d'élaboration.

6.2.2 Transfert d'échelle et simulations à l'échelle macroscopique

Cette partie représente une perspective à court terme des travaux présentés en partie 2.4. Les premiers résultats préliminaires obtenus en 2D à partir de la nouvelle formulation non-locale macroscopique doivent être développés pour caractériser si la nouvelle fonction poids, reconstruite explicitement à partir des interactions non-locales qui apparaissent et évoluent au fur et à mesure de l'endommagement, est bien représentative du processus de fissuration et capable de capturer les effets d'échelles pour les essais présentés en partie 2.2.

A partir de ces analyses, nous pourrons comparer les résultats avec ceux obtenus à l'échelle mésoscopique (partie 6.2.1) pour proposer de nouvelles fonctions poids analytiques évolutives utilisables dans les modèles non-locaux intégraux.

Dans le cadre de la problématique industrielle développée en partie 6.1.1, une démarche différente est également envisagée. En effet, si les approches employant des lois de comportement continues pour décrire la rupture (endommagement) sont facilement intégrables dans un code de calcul, elles demandent des éléments finis de petite taille afin de bien représenter le phénomène. Par ailleurs, dans le cadre de la simulation du phénomène de fracturation dans un réservoir pétrolier non conventionnel, il est nécessaire de représenter le couplage hydraulique. Typiquement, dans une approche couplée hydraulique-mécanique basée sur une description continue, le principe employé consiste à indexer la perméabilité du milieu sur le taux d'endommagement du matériau. Ainsi, le problème hydraulique reste simple. Par contre, les lois de comportement étant basées sur des relations contrainte-déformation, l'extraction d'une ouverture de fissure n'est pas directe. Elle demande un post-processing et un travail complémentaire sur le comportement asymptotique de ces modèles pour s'assurer qu'ils sont bien équivalents à une discontinuité. Une démarche alternative consiste à utiliser une approche discontinue en représentant explicitement les discontinuités. Afin de s'affranchir des problèmes liés au remaillage, des méthodes type X-FEM peuvent être envisagées (comme utilisé par Grégoire et al., 2007, 2009 en rupture dynamique). L'ouverture des fissures étant explicitement décrite, le lien avec le modèle hydraulique est facilité même si le choix des conditions aux limites du problème hydraulique associée reste un sujet ouvert (voir par exemple Gordeliy and Peirce, 2013a,b). Par contre, ces méthodes restent mal adaptées pour décrire la propagation de fissures en milieux quasi-fragiles à une échelle très macroscopique, notamment du fait de l'absence de zone d'élaboration en pointe de fissure. Pour pallier aux inconvénients de ces deux méthodes, une démarche intermédiaire, basée sur la méthode TLS développée par Moës et al. (2011) est envisagée.

6.3 Couplages endommagement/perméation au voisinage d'une fissure

6.3.1 Couplages hydromécaniques et simulations à l'échelle mésoscopique

Dans le cadre de la problématique industrielle développée en partie 6.1.1, on cherchera à caractériser, à l'aide du modèle mésoscopique, les interactions entre une fissure principale et le réseau secondaire de failles et joints rocheux afin de caractériser le volume stimulé par la fracturation (SRV). Dans ce cadre, il est nécessaire de coupler notre modèle mésoscopique avec un modèle hydraulique afin de simuler en conditions de réservoirs l'initiation et la propagation de fissures développées lors de fracturation hydraulique dans des réservoirs hétérogènes présentant des réseaux de joints. L'avantage du modèle est de posséder de façon intrinsèque un réseau lattice dual pouvant être utilisé dans ce but (Grassl, 2009).

Une fois ce couplage établi, il importe de valider expérimentalement la modélisation. Cette validation comprend deux aspects :

- l'aspect mécanique où il importe d'avoir une bonne représentation du développement du processus de fracturation local qui est traité en partie 6.2.1 ;
- l'aspect hydraulique où le suivi des débits au travers du milieu est fortement influencé par le processus de fissuration.

Nous projetons donc de conduire des essais expérimentaux de validation à partir d'une géométrie simple : un parallélépipède (ou cylindre) contenant un joint plan incliné d'un angle variable. Un trou cylindrique sera pratiqué au centre de l'éprouvette afin d'injecter un fluide pour la mesure de la perméabilité intrinsèque (voir Chen et al., 2012). L'éprouvette sera équipée de dispositifs d'émission acoustique permettant de visualiser le processus de rupture au sein du joint. Les champs de déplacement à la surface de l'éprouvette seront mesurés par corrélation d'image, ce qui permettra de corréler les déformations et discontinuités du joint point-par-point. En particulier les mesures d'ouvertures le long du joint, normales et tangentielles, pourront être estimées à l'aide des méthodes proposées par (Grégoire et al., 2011). L'analyse de la localisation des événements acoustiques au cours du chargement permettra de visualiser le processus de dégradation du joint. Il s'agit donc ici de caractériser le comportement hydro-mécanique de joints cohésifs de façon exhaustive (par rapport aux modèles globaux usuels) en couplant les effets de la dégradation induite par la déformation dans le plan du joint à l'augmentation de perméabilité de celui-ci. En représentant l'échantillon testé par une approche mésoscopique, nous pourrons comparer les processus modélisés numériquement avec les résultats expérimentaux, y compris les résultats d'émission acoustique. Dans notre cas, il s'agira essentiellement de visualiser les événements acoustiques dans le plan du joint.

6.3.2 Prédiction directe à partir des PSD des propriétés de perméation, extension à l'écoulement multiphasique

Cette partie représente une perspective à court terme des travaux présentés en partie 3. On cherchera tout d'abord à confirmer les premiers résultats obtenus quant à la sélectivité naturelle du milieu poreux. Puis on cherchera à étendre le modèle de prédiction de perméabilité à partir de mesure de distribution de tailles de pores au cas d'écoulement multi-phasique. Notamment on étudiera l'influence d'un front de condensation au sein du milieu sur les propriétés globales de perméation.

6.3.3 Évolution sous charge de la distribution de tailles de pore

Si on veut pouvoir prédire l'évolution des propriétés de transport avec l'endommagement, il faut également pouvoir prédire l'évolution des distributions de tailles de pores avec l'endommagement. On caractérisera donc cette évolution sous différents types de chargement statique ou dynamique et les techniques de tomographie RX présentes au laboratoire seront utilisées pour faire le lien entre la microfissuration et l'évolution de connectivité du réseau.

Des expériences de rupture à l'échelle de la mésostructure seront menées afin d'étudier l'évolution des distributions de tailles de pore en fonction du chargement global, de l'endommagement induit et de la microfissuration. Les distributions de tailles de pore seront caractérisées par porosimétrie par intrusion de mercure. Différentes géométries d'éprouvettes seront testées pour étudier différentes configurations de fissuration. Des cylindres pleins seront utilisés pour étudier une microfissuration diffuse issue d'une sollicitation de compression, des cylindres creux seront associés à la mesure des propriétés de perméation et des cylindres troués seront utilisés pour étudier l'effet d'une pré-entaille sur la localisation de la microfissuration. Cette dernière géométrie a été définie et utilisée pour étudier l'initiation, la propagation, l'arrêt et le redémarrage d'une fissure sous impact (Grégoire et al., 2007, 2009; Grégoire, 2008). Le trou permet ici de convertir la sollicitation de compression en une sollicitation de traction au voisinage de la pré-fissure sans frottement. La sollicitation de compression sur la face supérieure des éprouvettes pourra être appliquée en statique sur une machine conventionnelle ou en dynamique au sein d'un montage aux barres de Hopkinson (Kolsky, 1949) traditionnellement utilisé pour la caractérisation du comportement mécanique des matériaux mais adaptable pour l'étude de la propagation dynamique de fissures sous impact (Grégoire et al., 2007, 2009; Grégoire, 2008).

Sous chargement statique, la mécanique de la rupture prédit une croissance des plus gros défauts. Ainsi la microfissuration doit se propager à partir des plus gros pores (Sammis and Ashby, 1986). Cependant suivant comment le réseau de pores et les microfissures se connectent, la microfissuration peut entraîner une re-fermeture du réseau connecté de pores (Yuan and Harrison, 2006), notamment sous chargement triaxial (Souley et al., 2001). Sous chargement dynamique, on peut s'attendre à une croissance privilégiée de certaines tailles de pores suivant le contenu fréquentiel du signal appliqué (Maurel et al., 2010) mais cela reste à confirmer.

6.4 Influence des nanopores sur le comportement macroscopique

6.4.1 Couplage adsorption/gonflement en milieu libre et fissuration induite par adsorption

Cette partie représente une perspective à court et moyen terme des travaux présentés en partie 4. On cherchera notamment à estimer la pression dans des pores de milieux micro et/ou mésoporeux, à étudier l'influence de la distribution de tailles de pore sur cette pression de pore et à préciser les couplages locaux, à l'échelle du pore, entre l'adsorption du fluide et le gonflement de la matrice poreuse, ceci afin d'enrichir les modèles poromécaniques globaux permettant de prédire la déformation à l'échelle d'un échantillon de laboratoire.

En effet, les modèles poromécaniques globaux présentés en partie 4 ne permettent pas d'estimer la pression de pore et la déformation globale est prédite au travers d'une mesure de confinement moyenne estimée à partir des quantités adsorbées d'excès acquises expérimentalement. Ainsi la compréhension

fine des phénomènes et couplages mis en jeu à l'échelle locale du pore est limitée. Par exemple, la distribution de tailles de pore n'est pas prise en compte explicitement et de ce fait son influence est méconnue.

La théorie fonctionnelle de la densité (DFT) permet de décrire les propriétés thermodynamiques de fluides confinés dans des milieux micro et/ou mésoporeux. En particulier, elle permet de déterminer les variations de la densité du fluide au sein des pores et ainsi estimer l'adsorption et les modifications d'équilibre dues au confinement du fluide. La DFT est basée sur l'estimation de l'énergie libre d'Helmholtz du fluide piégé dans le matériau poreux. Dès lors, elle doit permettre de déterminer les pressions dans le pore en fonction du confinement du fluide et de la taille du pore même si cela n'a pas encore été montré dans la littérature du fait que les pressions de pore sont rarement les grandeurs d'intérêt dans les communautés où la DFT est mise en œuvre. Les méthodes de simulations numériques à la petite échelle (Monte-Carlo, dynamique moléculaire) peuvent donner des informations sur les pressions et le confinement observés à l'échelle d'un pore. Cependant, ces méthodes ne peuvent être couplées directement avec un modèle macroscopique global poromécanique du fait des ressources en moyens et en temps de calcul nécessaires à leur mise en œuvre.

Par ailleurs, les déformations dues à l'adsorption et observées expérimentalement atteignant plusieurs pourcents en milieu libre, on s'attend à générer de la microfissuration en contraignant ce gonflement. Il n'existe pas dans la littérature de travaux portant sur ce sujet de microfissuration induite par gonflement, et donc les premières actions de recherche sur ce thème consisteront à montrer la faisabilité de la méthode.

Expérimentalement, on cherchera à mesurer in-situ, par corrélation d'images numériques, la microfissuration induite par gonflement. Différentes géométries seront étudiées sur des charbons actifs et naturels pour induire des sollicitations de traction locales à partir du gonflement induit par adsorption et ainsi amorcer la microfissuration.

Ensuite, le modèle dual hydromécanique mésoscopique développé sera utilisé pour reproduire ces essais expérimentaux et prédire la microfissuration induite par adsorption. La modélisation poromécanique sera couplée au modèle hydromécanique mésoscopique afin d'homogénéiser l'effet de l'adsorption dans les pores nanométriques à l'échelle mésoscopique où les pores ne sont pas représentés explicitement.

6.4.2 Homogénéisation des effets de surface et en milieux microporeux

Les milieux microporeux au sens de la classification l'IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) sont des milieux dont les diamètres de pores sont inférieurs à 2nm. Les matériaux cimentaires (pâte de ciment notamment), roches à faible perméabilité, charbons naturels ou charbons actifs rentrent par exemple dans cette classification. Ces matériaux ont la particularité de présenter des surfaces spécifiques (surface développée du réseau poreux) très importante, de l'ordre de 100 à 1000m² par gramme d'échantillon, pour des porosités qui restent relativement faibles, de l'ordre de la dizaine de pourcents. Pour ces matériaux les effets de surface ne peuvent plus être négligés et les modèles classiques d'homogénéisation ne peuvent expliquer les diminutions très fortes de rigidité observées à l'échelle macroscopique sur le matériau poreux global, comparées à celles du matériau composant le squelette poreux.

De nouvelles stratégies d'homogénéisation doivent être proposées pour tenir compte de ces effets de surface. Dans la littérature, différentes techniques sont proposées pour prendre en compte ces effets de

surface. Des forces de surfaces supplémentaires peuvent être introduites directement à l'échelle du pore (Brisard et al., 2010). Ces forces doivent résulter en des effets d'échelle sur les propriétés macroscopiques du milieu poreux : à porosité constante, une variation du diamètre des pores produit une variation de la rigidité macroscopique homogénéisée.

Les études menées sur ce thème sont encore très préliminaires et deux pistes de recherche sont envisagées concernant des mécanismes sensiblement différents :

- A l'échelle nanométrique, on peut tout d'abord considérer les forces d'interaction solide-solide (Van der Waals) ayant lieu de part et d'autre du pore, entre les murs solides constituant le squelette. Cela revient à dire que le pore possède une rigidité propre qui dépend de la taille de pore. La partie attractive du potentiel d'interaction a tendance à rigidifier l'assemblage de pore tandis que la partie répulsive du potentiel a tendance à l'assouplir. Ainsi seule la partie répulsive est concordante avec les observations expérimentales qui présentent une diminution nette de la rigidité macroscopique. Cependant, des calculs préliminaires montrent que la distance d'action de cette partie répulsive est sub-nanométrique et donc n'aurait une influence que pour des pores de taille inférieure au nanomètre, où la notion même de pores est discutable. On propose ici de préciser ces mécanismes et l'influence de cette partie répulsive pour discréditer totalement ou non son influence.
- La seconde piste est plus proche des modèles présents dans la littérature concernant la modification des propriétés bulk au voisinage de la surface de pore. On propose ici, dans une analogie avec la zone interfaciale de transition (ITZ) présente dans le béton (Li et al., 1999b), de considérer une zone de faiblesse de quelques molécules autour du pore due à la réorganisation des forces d'interactions intermoléculaires à proximité de la surface de pore. En considérant cette zone de faiblesse de taille constante dépendante de la molécule constituant le squelette, son volume relatif augmente à mesure que la taille de pore diminue et donc il doit en être de même de son influence sur les propriétés matérielles macroscopiques (effet d'échelle). Un modèle classique d'homogénéisation à trois phases comme ceux développés pour les bétons (Li et al., 1999a) sera utilisé pour quantifier ces effets d'échelle.

6.5 Bibliographie du chapitre

Brisard, S., Dormieux, L., Kondo, D., May 2010. Hashin–Shtrikman bounds on the bulk modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects. *Computational Materials Science* 48 (3), 589–596.

Chen, W., Maurel, O., Reess, T., De Ferron, A. S., La Borderie, C., Pijaudier-Cabot, G., Rey-Bethbeder, F., Jacques, A., Jun. 2012. Experimental study on an alternative oil stimulation technique for tight gas reservoirs based on dynamic shock waves generated by Pulsed Arc Electrohydraulic Discharges. *Journal of Petroleum Science and Engineering* 88-89, 67–74.

Gordeliy, E., Peirce, A., Jan. 2013a. Coupling schemes for modeling hydraulic fracture propagation using the XFEM. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 253, 305–322.

Gordeliy, E., Peirce, A., Aug. 2013b. Implicit level set schemes for modeling hydraulic fractures using the XFEM. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (July).

-
- Grassl, P., 2009. A lattice approach to model flow in cracked concrete. *Cement and Concrete Composites* 31, 454–460.
- Grégoire, D., 2008. Initiation, Propagation, Arrêt et Redémarrage de Fissures sous Impact. Ph.D. thesis, INSA de Lyon.
- Grégoire, D., Loh, O. Y., Juster, A. L., Espinosa, H. D., Feb. 2011. In-situ AFM Experiments with Discontinuous DIC Applied to Damage Identification in Biomaterials. *Experimental Mechanics* 51 (4), 591–607.
- Grégoire, D., Maigre, H., Combescure, A., Sep. 2009. New experimental and numerical techniques to study the arrest and the restart of a crack under impact in transparent materials. *International Journal of Solids and Structures* 46 (18-19), 3480–3491.
- Grégoire, D., Maigre, H., Réthoré, J., Combescure, A., Oct. 2007. Dynamic crack propagation under mixed-mode loading – Comparison between experiments and X-FEM simulations. *International Journal of Solids and Structures* 44 (20), 6517–6534.
- Kolsky, H., 1949. An investigation of the mechanical properties of material at a very high rate of loading. *Proceedings of the Physical Society B62*, 676–700.
- Li, G., Zhao, Y., Pang, S.-S., Jun. 1999a. Four-phase sphere modeling of effective bulk modulus of concrete. *Cement and Concrete Research* 29 (6), 839–845.
- Li, G., Zhao, Y., Pang, S.-S., Li, Y., Sep. 1999b. Effective Young's modulus estimation of concrete. *Cement and Concrete Research* 29 (9), 1455–1462.
- Maurel, O., Reess, T., Matallah, M., De Ferron, A., Chen, W., La Borderie, C., Pijaudier-Cabot, G., Jacques, A., Rey-Bethbeder, F., Dec. 2010. Electrohydraulic shock wave generation as a means to increase intrinsic permeability of mortar. *Cement and Concrete Research* 40 (12), 1631–1638.
- Moës, N., Stolz, C., Bernard, P., Chevaugeon, N., 2011. A level set based model for damage growth : The thick level set approach. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 86, 358–380.
- Sammis, C., Ashby, M., 1986. THE FAILURE OF BRITTLE POROUS SOLIDS UNDER COMPRESSIVE STRESS STATES. *Acta Metallurgica* 34 (3), 511–526.
- Souley, M., Homand, F., Pepa, S., Hoxha, D., Feb. 2001. Damage-induced permeability changes in granite : a case example at the URL in Canada. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 38 (2), 297–310.
- Yuan, S., Harrison, J., Oct. 2006. A review of the state of the art in modelling progressive mechanical breakdown and associated fluid flow in intact heterogeneous rocks. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 43 (7), 1001–1022.

Bibliographie générale

- Adzumi, H., 1937. Studies on the flow of gaseous mixtures through capillaries. II. The molecular flow of gaseous mixtures. *Bulletin of the Chemical Society of Japan* 12 (6), 285–291.
- Aït-Mokhtar, A., Amiri, O., Dumargue, P., Sammartino, S., 2002. A new model to calculate water permeability of cement materials from MIP results. *Magazine of Concrete Research* 14 (2), 43–49.
- Aït-Mokhtar, A., Amiri, O., Sammartino, S., 1999. Analytic modelling and experimental study of the porosity and permeability of a porous medium—application to cement mortars and granitic rock. *Magazine of Concrete Research* 51 (6), 391–396.
- Amiri, O., Aït-Mokhtar, A., Sarhani, M., 2005. Tri-dimensional modelling of cementitious materials permeability from polymodal pore size distribution obtained by mercury intrusion porosimetry tests. *Advances* 17 (1), 39–45.
- Bangham, D. H., Fakhoury, N., 1928. The expansion of Charcoal accompanying Sorption of Gases and Vapours. *Nature* 122 (3079), 681—682.
- Barboura, S. S., 2007. Modélisation micromécanique du comportement de milieux poreux non linéaires : Applications aux argiles compactées. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie.
- Bartley, J., Ruth, D., 1999. Relative Permeability Analysis of Tube Bundle Models. *Transport in Porous Media* 36 (2), 161–188.
- Bažant, Z. P., Le, J.-l., Hoover, C. G., 2010. Nonlocal boundary layer (NBL) model : overcoming boundary condition problems in strength statistics and fracture analysis of quasibrittle materials. In : *Fracture Mechanics of Concrete and Concrete Structures—Recent Advances in Fracture Mechanics of Concrete (Proc., FraMCoS-7, 7th Int. Conf. held in Jeju, Korea, plenary lecture)*, B.-H. Oh, ed., publ. by Korea Concrete Institute, Seoul. pp. 135–143.
- Bažant, Z., Le, J., Hoover, C., 2010. Nonlocal boundary layer (NBL) model : overcoming boundary condition problems in strength statistics and fracture analysis of quasibrittle materials. In : *Proc., FraMCoS-7, Korea*. pp. 135–143.
- Bazant, Z. P., Kim, J.-K., 1984. Size effect in shear failure of longitudinally reinforced beams. *ACI Journal* 81, 456–468.
- Bazant, Z. P., Planas, J., 1998. *Fracture and size effect in concrete and other quasibrittle materials*. CRC press.
- Bažant, Z. P., Yu, Q., 2009. Universal size effect law and effect of crack depth on quasi-brittle structure strength. *Journal of engineering mechanics* 135 (2), 78–84.
- Brisard, S., Dormieux, L., Kondo, D., May 2010. Hashin–Shtrikman bounds on the bulk modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects. *Computational Materials Science* 48 (3), 589–596.

- Brochard, L., Vandamme, M., Pellenq, R. J., 2012. Poromechanics of microporous media. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 60, 606–622.
- Bustin, R. M., 2004. Acid Gas Sorption by British Columbia Coals : Implications for Permanent Disposal of Acid Gas in Deep Coal Seams and Possible Co-Production of Methane. Tech. Rep. May, The University of British Columbia.
- Carman, P., 1937. Fluid flow through granular beds. *Chemical Engineering Research and Design* 75, S32–S48.
- Carpinteri, A., 1994. Fractal nature of material microstructure and size effects on apparent mechanical properties. *Mechanics of Materials* 18 (2), 89–101.
- Chen, W., 2010. Fracturation électrique des géomatériaux. Etude de l'endommagement et de la perméabilité. Ph.D. thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour.
- Chen, W., Maurel, O., Reess, T., De Ferron, A. S., La Borderie, C., Pijaudier-Cabot, G., Rey-Bethbeder, F., Jacques, A., Jun. 2012. Experimental study on an alternative oil stimulation technique for tight gas reservoirs based on dynamic shock waves generated by Pulsed Arc Electrohydraulic Discharges. *Journal of Petroleum Science and Engineering* 88-89, 67–74.
- Childs, E. C., Collis-George, N., 1950. The Permeability of Porous Materials. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 201 (1066), 392–405.
- Coussy, O., 1991. Mécanique des milieux poreux, editions t Edition.
- Darcy, H., 1856. Les fontaines publiques de la ville de Dijon. Dalmont.
- Day, S., Fry, R., Sakurovs, R., Mar. 2008. Swelling of Australian coals in supercritical CO₂. *International Journal of Coal Geology* 74 (1), 41–52.
- Delaplace, A., Pijaudier-Cabot, G., Roux, S., 1996. Progressive damage in discrete models and consequences on continuum modelling. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 44 (1), 99–136.
- Delaplace, a., Roux, S., Pijaudier-Cabot, G., May 2003. Study of avalanches during the fracture of discrete models. *Engineering Fracture Mechanics* 70 (7-8), 943–955.
- Diggle, P. J., Chetwynd, A. G., 1991. Second-Order Analysis of Spatial Clustering for Inhomogeneous Populations. *Biometrics* 47 (3), 1155–1163.
- Dixon, P. M., 2002. Ripley's K function. In : El-shaarawi, A. H., Piegorisch, W. W. (Eds.), *Encyclopedia of Environmetrics*, volume 3. Vol. 3. John Wiley & Sons, Ltd., Chichester, pp. 1796–1803.
- Dong, M., Dullien, F., Dai, L., Li, D., 2006. Immiscible Displacement in the Interacting Capillary Bundle Model Part II. Applications of Model and Comparison of Interacting and Non-Interacting Capillary Bundle Models. *Transport in Porous Media* 63 (2), 289–304.
- Dufour, F., Legrain, G., Pijaudier-Cabot, G., Huerta, A., 2012. Estimation of crack opening from a two-dimensional continuum-based finite element computation. *Int J Numer Anal Met* 36 (16), 1813–1830.
- Dufour, F., Pijaudier-cabot, G., Choinska, M., Huerta, A., 2008. Extraction of a crack opening from a continuous approach using regularized damage models. *Computers and Concrete* 5 (4), 375–388.

- Duncan, R. P., 1993. Flood Disturbance and the Coexistence of Species in a Lowland Podocarp Forest, South Westland, New Zealand Author(s) : *Journal of Ecology* 81 (3), 403–416.
- Durucan, S., Shi, J., Jan. 2009. Improving the CO₂ well injectivity and enhanced coalbed methane production performance in coal seams. *International Journal of Coal Geology* 77 (1-2), 214–221.
- Fahy, C., Gallipoli, D., Grassl, P., 2011. On the Mesh Dependence of Lattice Models for Analysing Concrete Fracture. In : UK Conference of the Association For Computational Mechanics in Engineering. Edinburgh, p. 4.
- Gentzis, T., Deisman, N., Chalaturnyk, R. J., Feb. 2007. Geomechanical properties and permeability of coals from the Foothills and Mountain regions of western Canada. *International Journal of Coal Geology* 69 (3), 153–164.
- Giry, C., Dufour, F., Mazars, J., Dec. 2011. Stress-based nonlocal damage model. *International Journal of Solids and Structures* 48 (25-26), 3431–3443.
- Gordeliy, E., Peirce, A., Jan. 2013a. Coupling schemes for modeling hydraulic fracture propagation using the XFEM. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 253, 305–322.
- Gordeliy, E., Peirce, A., Aug. 2013b. Implicit level set schemes for modeling hydraulic fractures using the XFEM. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (July).
- Grassl, P., 2009. A lattice approach to model flow in cracked concrete. *Cement and Concrete Composites* 31, 454–460.
- Grassl, P., Grégoire, D., Rojas Solano, L., Pijaudier-Cabot, G., Jun. 2012. Meso-scale modelling of the size effect on the fracture process zone of concrete. *International Journal of Solids and Structures* 49 (13), 1818–1827.
- Grassl, P., Jirásek, M., Apr. 2010. Meso-scale approach to modelling the fracture process zone of concrete subjected to uniaxial tension. *International Journal of Solids and Structures* 47 (7-8), 957–968.
- Grégoire, D., 2008. Initiation, Propagation, Arrêt et Redémarrage de Fissures sous Impact. Ph.D. thesis, INSA de Lyon.
- Grégoire, D., Loh, O. Y., Juster, A. L., Espinosa, H. D., Feb. 2011a. In-situ AFM Experiments with Discontinuous DIC Applied to Damage Identification in Biomaterials. *Experimental Mechanics* 51 (4), 591–607.
- Grégoire, D., Maigre, H., Combescure, A., Sep. 2009a. New experimental and numerical techniques to study the arrest and the restart of a crack under impact in transparent materials. *International Journal of Solids and Structures* 46 (18-19), 3480–3491.
- Grégoire, D., Maigre, H., Morestin, F., Jun. 2009b. New experimental techniques for dynamic crack localization. *Revue européenne de mécanique numérique* 18 (3-4), 255–283.
- Grégoire, D., Maigre, H., Réthoré, J., Combescure, A., Oct. 2007. Dynamic crack propagation under mixed-mode loading – Comparison between experiments and X-FEM simulations. *International Journal of Solids and Structures* 44 (20), 6517–6534.

- Grégoire, D., Rojas-Solano, L., Khaddour, F., Vermorel, R., Pijaudier-Cabot, G., 2011b. Coupling between damage and permeability in porous geomaterials in the context of CO₂ storage and petroleum engineering. In : 48th Annual Technical Conference of Society of Engineering Sciences (SES2011), Evanston, USA. Evanston, USA.
- Grégoire, D., Rojas-Solano, L., Lefort, V., Grassl, P., Pijaudier-Cabot, G., 2014a. Size and Boundary Effects During Failure in Quasi-brittle Materials : Experimental and Numerical Investigations. *Procedia Materials Science* 3, 1269–1278.
- Grégoire, D., Rojas-Solano, L. B., Lefort, V., Grassl, P., Saliba, J., Regoin, J.-p., Loukili, A., Pijaudier-Cabot, G., 2014b. Mesoscale analysis of failure in quasi-brittle materials : comparison between lattice model and acoustic emission data. *International Journal of Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* submitted, 1–29.
- Grégoire, D., Rojas-Solano, L. B., Pijaudier-cabot, G., 2012. Continuum to discontinuum transition during failure in non-local damage models. *International Journal for Multiscale Computational Engineering* 10.1615/In.
- Grégoire, D., Rojas-Solano, L. B., Pijaudier-Cabot, G., 2013. Failure and size effect for notched and unnotched concrete beams. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*.
- Grosman, A., Ortega, C., 2009. Influence of Elastic Strains on The Adsorption Process in Porous Materials. An Experimental Approach. *Langmuir* 25 (14), 8083–8093.
- Halpin, J. C., Kardos, J. L., 1976. The Halpin-Tsai Equations : A Review. *Polymer Engineering & Science* 16 (5), 344–352.
- Hol, S., Spiers, C. J., Nov. 2012. Competition between adsorption-induced swelling and elastic compression of coal at CO₂ pressures up to 100MPa. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 60 (11), 1862–1882.
- Kast, W., Hohenthanner, C.-R., Mar. 2000. Mass transfer within the gas-phase of porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 43 (5), 807–823.
- Katz, A., Thompson, A., 1986. Quantitative prediction of permeability in porous rock. *Physical review* 34 (11), 8179–8181.
- Khaddour, F., 2014. Amélioration de la production de gaz des « Tight Gas Reservoirs ». Ph.D. thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour.
- Khaddour, F., Grégoire, D., Pijaudier-cabot, G., 2013. Upscaling Permeation Properties in Porous Materials from Pore Size Distributions. In : Gilles Pijaudier-Cabot, J.-M. P. E. (Ed.), *Geomechanical Issues in CO₂ Storage Facilities*. John Wiley & Sons, Inc., pp. 43–56.
- Khaddour, F., Grégoire, D., Pijaudier-cabot, G., 2014. Capillary bundle model for the computation of the apparent permeability from pore size distributions. *European journal of environmental and civil engineering* doi :10.1080/19648189.2014.939307.
- Klinkenberg, L., 1941. The permeability of porous media to liquids and gases. In : *Drilling and Production Practice*, American Petroleum Inst. pp. 200–213.

- Knorst-Fouran, A., 2010. Contribution à l'étude de propriétés interfaciales d'alcanes confinés par simulation moléculaire de type Monte Carlo. Ph.D. thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour.
- Kolsky, H., 1949. An investigation of the mechanical properties of material at a very high rate of loading. *Proceedings of the Physical Society B62*, 676–700.
- Kozeny, J., 1927. Über kapillare Leitung des Wassers im Boden. *Wien, Akad. Wiss* 136 (2a), 271.
- Krayani, A., Pijaudier-Cabot, G., Dufour, F., Sep. 2009. Boundary effect on weight function in nonlocal damage model. *Engineering Fracture Mechanics* 76 (14), 2217–2231.
- Landis, E., Baillon, L., 2002. Experiments to Relate Acoustic Emission Energy to Fracture Energy of Concrete. *Journal of Engineering Mechanics* 128 (6), 698–702.
- Larsen, J. W., Jan. 2004. The effects of dissolved CO₂ on coal structure and properties. *International Journal of Coal Geology* 57 (1), 63–70.
- Levine, J. R., Jan. 1996. Model study of the influence of matrix shrinkage on absolute permeability of coal bed reservoirs. *Geological Society, London, Special Publications* 109 (1), 197–212.
- Li, G., Zhao, Y., Pang, S.-S., Jun. 1999a. Four-phase sphere modeling of effective bulk modulus of concrete. *Cement and Concrete Research* 29 (6), 839–845.
- Li, G., Zhao, Y., Pang, S.-S., Li, Y., Sep. 1999b. Effective Young's modulus estimation of concrete. *Cement and Concrete Research* 29 (9), 1455–1462.
- Malheiro, C., Mendiboure, B., Plantier, F., Guatarbes, B., Miqueu, C., 2014. An accurate model for the filling pressure of carbon slit-like micropores : application to the pore size distribution calculation. *submitted*.
- Maurel, O., Reess, T., Matallah, M., De Ferron, A., Chen, W., La Borderie, C., Pijaudier-Cabot, G., Jacques, A., Rey-Bethbeder, F., Dec. 2010. Electrohydraulic shock wave generation as a means to increase intrinsic permeability of mortar. *Cement and Concrete Research* 40 (12), 1631–1638.
- Mazars, J., 1986. A description of micro-and macroscale damage of concrete structures. *Eng Fract Mech* 25 (5-6), 729–737.
- Meehan, F. T., Jun. 1927. The Expansion of Charcoal on Sorption of Carbon Dioxide. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 115 (770), 199–207.
- Mguil-Touchal, S., Morestin, F., Brunet, M., 1996. Various experimental applications of digital image correlation method. In : Actes du Colloque National Mécatat'96. pp. 179 –182.
- Millington, R., Quirk, J. P., 1961. Permeability of porous solids. *Transactions of the Faraday Society* 57, 1200—1207.
- Moës, N., Stolz, C., Bernard, P., Chevaugeon, N., 2011. A level set based model for damage growth : The thick level set approach. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 86, 358–380.
- Morestin, F., Touchal, S., Vacher, P., Dumoulin, S., 1996. Icasoft (<http://icasoft.insa-lyon.fr>).
- Mori, T., Tanaka, K., 1973. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta metallurgica* 21 (5), 571–574.

- Mura, T., 1987. *Micromechanics of defects in solids*. Vol. 3. Springer.
- Nikoosokhan, S., 2013. Stockage géologique du dioxyde de carbone dans les veines de charbon : du matériau au réservoir. Ph.D. thesis, Université Paris-Est.
- Ottiger, S., Pini, R., Storti, G., Mazzotti, M., 2008a. Competitive adsorption equilibria of CO₂ and CH₄ on a dry coal. *Adsorption* 14 (4), 539–556.
- Ottiger, S., Pini, R., Storti, G., Mazzotti, M., Mar. 2008b. Competitive adsorption equilibria of CO₂ and CH₄ on a dry coal. *Adsorption* 14 (4-5), 539–556.
- Pan, Z., Connell, L., Mar. 2007. A theoretical model for gas adsorption-induced coal swelling. *International Journal of Coal Geology* 69 (4), 243–252.
- Pastor, J., Guinea, G., Planas, J., Elices, M., 1995. Nueva expresión del factor de intensidad de tensiones para la probeta de flexión en tres puntos. In : *Anales de Mecánica de la Fractura*. Vol. 12. pp. 85–90.
- Peerlings, R., Nov. 2001. A critical comparison of nonlocal and gradient-enhanced softening continua. *International Journal of Solids and Structures* 38 (44-45), 7723–7746.
- Peerlings, R., De Borst, R., Brekelmans, W., De Vree, J., Spee, I., 1996. Some observations on localization in non-local and gradient damage models. *European Journal of Mechanics - A/Solids* 15 (6), 937–953.
- Perrier, L., Grégoire, D., Plantier, F., Pijaudier-Cabot, G., 2014a. Experimental and Modeling Investigations of Adsorption-induced Swelling and Damage in Microporous Materials. *Procedia Materials Science* 3, 1263 – 1268.
- Perrier, L., Pijaudier-Cabot, G., Grégoire, D., 2014b. Poromechanics of adsorption-induced swelling in microporous materials : a new poromechanical model taking into account strain effects on adsorption. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, May 2014.
- Pijaudier-Cabot, G., Bazant, Z. P., 1987. Nonlocal Damage Theory. *Journal of Engineering Mechanics* 113 (10), 1512–1533.
- Pijaudier-Cabot, G., Rojas-Solano, L. B., Grégoire, D., 2010. Endommagement, effets d'échelle, fissuration et perméabilité des matériaux quasi-fragiles. In : *Matériaux 2010, Nantes*. Vol. 76.
- Pijaudier-cabot, G., Vermorel, R., Miqueu, C., Mendiboure, B., 2011. Comptes Rendus Mécanique Revisiting poromechanics in the context of microporous materials. *Comptes Rendus Mécanique* 1, 1–9.
- Pini, R., 2009. ENHANCED COAL BED METHANE RECOVERY FINALIZED TO CARBON DIOXIDE STORAGE. Ph.D. thesis, ETH ZURICH.
- Pini, R., Ottiger, S., Burlini, L., Storti, G., Mazzotti, M., 2009. Role of adsorption and swelling on the dynamics of gas injection in coal. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth (1978–2012)* 114 (B4).
- Poiseuille, J., 1840. Recherches expérimentales sur le mouvement des liquides dans les tubes de très petits diamètres. *Comptes rendus hebdomadaires des séances de l'Académie des sciences* T11 (1), 1041—1048.

- Ripley, B. . D. ., 1977. Modelling Spatial Patterns. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)* 39 (2), 172–212.
- Rojas-Solano, L. B., 2012. Endommagement non-local, interactions et effets d'échelle. Ph.D. thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour.
- Rojas-Solano, L. B., Grégoire, D., Pijaudier-cabot, G., 2013. Interaction-based non-local damage model for failure in quasi-brittle materials. *Mechanics Research Communications* 54, 56–62.
- Sammis, C., Ashby, M., 1986. THE FAILURE OF BRITTLE POROUS SOLIDS UNDER COMPRESSIVE STRESS STATES. *Acta Metallurgica* 34 (3), 511–526.
- Simone, A., Askes, H., Sluys, L. J., Jan. 2004. Incorrect initiation and propagation of failure in non-local and gradient-enhanced media. *International Journal of Solids and Structures* 41 (2), 351–363.
- Souley, M., Homand, F., Pepa, S., Hoxha, D., Feb. 2001. Damage-induced permeability changes in granite : a case example at the URL in Canada. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 38 (2), 297–310.
- Stamp, N. E., Lucas, J. R., 1990. Spatial Patterns and Dispersal Distances of Explosively Dispersing Plants in Florida Sandhill Vegetation. *Journal of Ecology* 78 (3), 589–600.
- Steckelmacher, W., 1986. Knudsen flow 75 years on : the current state of the art for flow of rarefied gases in tubes and systems. *Reports on Progress in Physics* 49 (10), 1083.
- Sutton, M. A., Cheng, M., Peters, W. H., Chao, Y. J., McNeill, S. R., 1986. Application of an optimized digital correlation method to planar deformation analysis. *Image and Vision Computing* 4 (3), 143—150.
- Sutton, M. A., Wolters, W. J., Peters, W. H., Ranson, W. F., McNeill, S. R., 1983. Determination of displacements using an improved digital correlation method. *Image and Vision Computing* 1 (3), 133—139.
- Tordesillas, A., Pucilowski, S., Sibille, L., Nicot, F., Darve, F., Sep. 2012. Multiscale characterisation of diffuse granular failure. *Philosophical Magazine* (September), 1–41.
- van Bergen, F., Pagnier, H., Krzystalik, P., 2006. Field experiment of enhanced coalbed methane-CO₂ in the upper Silesian basin of Poland. *Environmental Geosciences* 13 (3), 201–224.
- van Vliet, M., Jan. 2000. Experimental investigation of size effect in concrete and sandstone under uniaxial tension. *Engineering Fracture Mechanics* 65 (2-3), 165–188.
- van Vliet, M. R., van Mier, J. G., 2000. Experimental investigation of size effect in concrete and sandstone under uniaxial tension. *Engineering Fracture Mechanics* 65 (2), 165–188.
- Vandamme, M., Brochard, L., Lecampion, B., Coussy, O., Oct. 2010. Adsorption and strain : The CO₂-induced swelling of coal. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 58 (10), 1489–1505.
- Vermorel, R., Pijaudier-Cabot, G., 2014. Enhanced continuum poromechanics to account for adsorption induced swelling of saturated isotropic microporous materials. *European Journal of Mechanics-A/Solids* 44, 148–156.

- Watanabe, K., Flury, M., 2008. Capillary bundle model of hydraulic conductivity for frozen soil. *Water Resources Research* 44 (12), n/a–n/a.
- Wong, H., Zimmerman, R., Buenfeld, N., 2012. Estimating the permeability of cement pastes and mortars using image analysis and effective medium theory. *Cement and Concrete Research* 42 (2), 476 – 483.
- Yuan, S., Harrison, J., Oct. 2006. A review of the state of the art in modelling progressive mechanical breakdown and associated fluid flow in intact heterogeneous rocks. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 43 (7), 1001–1022.

Annexe A

Annexe : synthèse administrative des activités de recherche et d'encadrement

A.1 Parcours et curriculum vitæ

Le thème central à tous mes travaux de recherche est l'intégrité des structures, la rupture et l'endommagement des matériaux dans une démarche qui met en jeu à la fois modélisation, études expérimentales et simulations numériques.

Ce thème central a été décliné sur divers matériaux façonnés et optimisés par l'homme (PMMA, aluminium aéronautique, composites, béton) ou par la nature (nacre naturelle, géomatériaux) dans différents contextes (rupture dynamique sous impact, biomimétisme, interaction fluide-structure sous explosion sous-marine, couplages endommagement/transport et adsorption/gonflement en milieux poreux). Les applications industrielles concernées sont donc aussi variées : aéronautique, blindage balistique, industrie navale, génie civil et génie pétrolier.

En thèse à l'*INSA de Lyon*, je me suis intéressé à l'initiation, à la propagation, à l'arrêt et au redémarrage de fissures sous impact.

Durant mon post-doctorat à *Northwestern University* (Chicago, USA), je me suis intéressé au comportement et à la rupture de nanocomposites bioinspirés des nacres naturelles ainsi qu'aux interactions fluide-structure et à la rupture de structures composites soumises à une explosion sous-marine.

Depuis mon arrivée à l'*Université de Pau et des Pays de l'Adour* (UPPA) en tant que Maître de Conférences avec Chaire CNRS, mes travaux de recherche portent principalement sur la caractérisation et la prédiction des mécanismes de déformation, de rupture et d'endommagement de géomatériaux poreux en lien avec leurs propriétés de transport et principalement leur perméabilité.

Ce mémoire présente principalement les activités de recherche développées à l'UPPA, les travaux antérieurs étant présentés de façon plus concise en annexe¹.

1. Les activités doctorales sont présentées en partie A.2, les activités post-doctorales en partie A.3.



David GRÉGOIRE

(né le 25 avril 1980)

Fonctions actuelles :

Maître de conférences – Chaire CNRS
Habilité à diriger des recherches
LFC-R, UMR5150 & ISABTP
Université de Pau et des Pays de l'Adour
Campus Montauray, 64600 Anglet, France

Contact :

Bureau : 05 59 57 44 79 (Fax 44 37)
Mobile : 06 27 35 15 55
Courriel : david.gregoire@univ-pau.fr
Site internet : ► [lien](#)

Expériences de recherche

- 2010 – 2015 **Accueil en délégation au CNRS en France**, Chaire CNRS/Ens. Sup. (5 ans), LFC-R, Univ Pau & Pays Adour. Couplages endommagement/perméabilité et adsorption/gonflement dans les géomatériaux poreux.
- 2009 – 2010 **Séjour post-doctoral en France** (12 mois), LFC-R, Univ Pau & Pays Adour (contact: [Gilles Pijaudier-Cabot](#)). Modélisation multi-échelles de la rupture dans les géomatériaux
- 2008 – 2009 **Séjour post-doctoral aux États-Unis** (10 mois), Northwestern University (contact: [Horacio D. Espinosa](#)).
Thème 1 Étude du comportement et de la rupture de nanocomposites bioinspirés des nacres naturelles.
Thème 2 Interaction fluide-structure et rupture de structures composites soumises à une explosion sous-marine.
- 2005 – 2008 **Thèse de doctorat de Mécanique en France** (3 ans), LaMCoS, INSA-Lyon (contact: [Alain Combescure](#)).
Initiation, Propagation, Arrêt et Redémarrage de Fissures sous Impact.
- 2004 – 2005 **Stage de recherche de Master 2 en France** (12 mois), LaMCoS, INSA-Lyon (contact: [Hubert Maigre](#)).
Simulation X-FEM de la propagation de fissures en dynamique avec comparaisons expérimentales.
- 2002 – 2003 **Stage de recherche de Master 1 au Chili** (4 mois), Universidad de Concepción, Chili (contact : [Luis Quiroz](#)).
Interactions fluide/structure appliquées à la propagation du son dans les parois des bateaux.

Expériences d'enseignement

- 2010 – actuel **Mécanique des Milieux Continus**, Cours et TD, ISABTP & UPPA (Ingé3, Licence3, Master1)
(MC) **Résistance des Matériaux**, Cours, ISABTP (Ingé2)
- 2009 – 2010 **Mécanique et Résistance des Matériaux**, TP, ISABTP (Ingé1).
(ATER) **Anglais**, Cours et TD, ISABTP (Ingé5).
Informatique appliquée – Bureautique, TP, ISABTP (Ingé1).
- 2005 – 2008 **Mathématiques**, TD, INSA-Lyon (Ingé2).
(Moniteur) **Mécanique du solide**, TP, INSA-Lyon (Ingé3, Ingé4).
- 2004 – 2005 **Conception et fabrication assistées par ordinateur**, TD, UCBL (Licence3).
(Vacataire) **UPPA**: Université de Pau et des Pays de l'Adour; **INSA**: Institut National des Sciences Appliquées; **UCBL**: Université Claude Bernard Lyon1.
ISABTP: Institut Supérieur Aquitain du Bâtiment et des Travaux Publics (École d'ingénieurs en 5 ans).

Prix et distinctions

- 2014 **Second ESIS-Elsevier Young Scientist Award**, ESIS, 2014 (► [lien](#)).
- 2013 **Young Researcher Best Paper Award**, IA-FraMCoS, 2013 (► [lien](#)).
- 2010 **Chaire CNRS – Enseignement supérieur**, Géomécanique.
- 2009 **Prix de la Meilleure Thèse**, Fondation EADS - Catégorie « Sciences de l'Ingénieur » (► [lien](#)).
Prix Paul Germain, Association Française de Mécanique - Sensibilité « Solides & associés » (► [lien](#)).
- 2008 **Bourse post-doctorale**, DGA/D4S, Délégation Générale pour l'Armement.
Bourse LAVOISIER, Ministère des Affaires Étrangères et Européennes.
Prix du comité scientifique MACODEV, Cluster recherche Matériaux et Conception pour un développement durable.
- 2003 **Prix du meilleur poster scientifique**, ENS Cachan, École Normale Supérieure de Cachan, 2003.

Scolarité & diplômes

- 2014 **Habilitation à diriger des recherches**, Mécanique, 22/10/2014, Univ Pau & Pays Adour, France
Jury : J.Carmeliet, A.Combescure, R.De Borst (président), D.Kondo (rapporteur), N.Moës (rapporteur), G.Pijaudier-Cabot, G.Viggiani (rapporteur).
- 2008 **Thèse de doctorat**, Mécanique, 24/10/2008, INSA-Lyon, France.
Jury : A.Combescure, L.Daudeville (rapporteur), J.Fabis, G.Gary, D. Leguillon (président), H.Maigre, D.Rittel (rapporteur), H.Trumel.
- 2005 **Master 2 recherche**, option Génie Mécanique, Mention (B), INSA-Lyon, France.
- 2001 - 2004 **École Normale Supérieure de Cachan** (Licence (TB), Maîtrise (AB), Agrégation (double admissible)).

Vie de laboratoire, charges administratives, autres activités

- 2014 - actuel **Membre du comité Properties of materials**, EMI/ASCE, USA.
- 2013 - actuel **Membre élu du Conseil de l'ISABTP**, UPPA, France.
- 2012 - actuel **Membre du Conseil du Pôle Calcul Scientifique et Traitement des Données**, UPPA, France
- 2011 - actuel **Membre élu du Conseil de la fédération de recherche IPRA**, FR2952, UPPA, France.
- 2010 - actuel **Directeur des études 2ème année**, ISABTP, UPPA, France.
- 2008 - actuel **Reviewer pour journaux internationaux** (EJECE, EJM-A-Solids, ExpMech, JMR, Mech Time-Depend Mat)
- 2013 - actuel **Accompagnateur des élèves ingénieurs de l'ISABTP lors de leur projet humanitaire de fin d'étude**
Conception et construction d'École aux Comores (emanisa.fr – 2013) et à Madagascar (lagunisa.fr – 2014)

Encadrement et formation par la recherche

- 2014 - 2017 **Co-direction de thèse** de L. Ecay avec G. Pijaudier-Cabot (soutenance prévue 09/2017), Évolution des propriétés de transfert et maîtrise du confinement d'une enceinte en accident.
- 2012 - 2015 **Co-direction de thèse** de L. Perrier avec G. Pijaudier-Cabot (soutenance prévue 09/2015), Couplage gonflement / adsorption dans les matériaux microporeux.
- 2012 - 2015 **Co-direction de thèse** de V. Lefort avec G. Pijaudier-Cabot (soutenance prévue 09/2015), Fracturation et Perméabilité des Milieux Hétérogènes Quasi-Fragiles.
- 2010 - 2014 **Co-direction de thèse** de F. Khaddour avec G. Pijaudier-Cabot (thèse soutenue le 11/04/2014), Amélioration de la production de gaz des « Tight Gas Reservoirs ».
Devenir du docteur : Maître de Conférences, Université Al-Baath, Homs, Syrie.
- 2010 - 2012 **Co-direction de thèse** de L. Rojas-Solano avec Gilles Pijaudier-Cabot (thèse soutenue le 07/12/2012), Endommagement non-local, interactions et effets d'échelle. 4ème prix Jeunes Chercheurs René Houpert de l'AUGC.
Devenir du docteur : ATER UMR7359 GéoRessources (Université de Lorraine).

Publications

Audience 20 articles, 2 chapitres de livre, 67 communications dont 5 conférences invités (► [détails](#))
Profil scholar 312 citations, h-index 9, i10-index 9 (► [détails](#))

Publications des trois dernières années :

- 2014 G. Pijaudier-Cabot, **D. Grégoire**, Netw Heterog Media.
L. Perrier, G. Pijaudier-Cabot, **D. Grégoire**, Cont Mech Thermo (► [lien](#)).
F. Khaddour, **D. Grégoire**, G. Pijaudier-Cabot, Eur J Environ Civil Eng (► [lien](#)).
L. Perrier, **D. Grégoire**, F. Plantier, G. Pijaudier-Cabot, Proc Mater Scien, 3, 1263-1268 (► [lien](#)).
D. Grégoire, L. Rojas-Solano, V. Lefort, P. Grassl, G. Pijaudier-Cabot, Proc Mater Scien, 3, 1269-1278 (► [lien](#)).
2013 **D. Grégoire**, L. Rojas-Solano, G. Pijaudier-Cabot, Int J Numer Anal Met, 37 (10), 1434-1452 (► [lien](#)).
L. Rojas-Solano, **D. Grégoire**, G. Pijaudier-Cabot, Mech Res Commun, 54, 56-63 (► [lien](#)).
2012 **D. Grégoire**, L. Rojas-Solano, G. Pijaudier-Cabot, Int J Multiscale Com, 10 (6), 136 (► [lien](#)).
P. Grassl, **D. Grégoire**, L. Rojas-Solano, G. Pijaudier-Cabot, Int J Solids Struct, 49 (13), 1818-1827 (► [lien](#)).
H.D. Espinosa, **D. Grégoire**, F. Latourte, O.Y. Loh, Procedia IUTAM, 4, 27-39 (► [lien](#)).

Participations à des projets de recherche

- 2014 – 2015 **CCL Lacq-Orthez**, porteur principal : **D. Grégoire**.
- 2013 – 2017 **ANR RSNR, MACENA**, rôle : chercheur, porteur principal : F. Dufour (INPG).
- 2013 – 2014 **Total SA**, rôle : chercheur, porteur principal : F. Plantier (UPPA).
- 2013 **ACBA**, Agglomération Côte Basque-Adour, porteur principal : **D. Grégoire**.
- 2012 **Institut Carnot ISIFOR**, rôle : resp. scientifique « gonflement/adsorption », porteur principal : J. Paillol (UPPA).
- 2012 **Bonus Qualité Recherche UPPA**, rôle : co-porteur du projet, porteur principal : C. Perlot (UPPA).
- 2012 – 2015 **Conseil Régional d'Aquitaine**, CEPAGE, porteur principal : **D. Grégoire**.
- 2012 – 2015 **Conseil général CG 64 & Total SA**, rôle : co-porteur du projet, porteur principal : G. Pijaudier-Cabot.
- 2010 – 2015 **Chaire CNRS, Géomécanique - Génie Pétrolier**, porteur principal : **D. Grégoire** (UPPA).
- 2008 – 2013 **ERC Advanced Grant, FAILFLOW**, rôle : chercheur, porteur principal : G. Pijaudier-Cabot (UPPA).
- 2007 – 2009 **GMC Grant** (General Motors Corporation), rôle : chercheur, porteur principal : H.D. Espinosa.
- 2008 – 2012 **ONR Grant** (Office of Naval Research), rôle : chercheur, porteur principal : H.D. Espinosa (Northwestern).
- 2008 – 2009 **DGA/D4S** (Délégation Générale pour l'Armement), porteur principal : **D. Grégoire** (INSA-Lyon).
- 2005 – 2008 **ANR Jeunes Chercheurs, DYNRUPT**, rôle : doctorant, porteur principal : A. Gravouil (INSA-Lyon).

Principaux thèmes de recherche

Etudes expérimentales et numériques pour la caractérisation du processus de fissuration dans les milieux quasi-fragiles

- Modélisation à l'échelle mésoscopique et comparaison expérimentale par émissions acoustiques,
- Analyse des corrélations induites et du processus de localisation par fonctions de Ripley,
- Transfert d'échelle, étude des interactions et modélisation non-locale à l'échelle macroscopique
- Transition continu-discret, effets de bord et effets d'échelle dans les matériaux quasi-fragile entaillés et non entaillés.

Couplage endommagement / perméabilité dans les géomatériaux mésoporeux (2nm < taille de pore < 50nm)

- Estimation directe des propriétés de perméation dans les milieux poreux à partir des distributions de taille de pores,
- Influence de l'intensité et de la forme du chargement sur la distribution de taille de pores,
- Fracturation et propagation de fissures dans les milieux hétérogènes sous l'effet d'une injection de fluide.

Couplage adsorption / gonflement dans les géomatériaux microporeux (taille de pore < 2nm)

- Mesures expérimentales simultanées de l'adsorption par manométrie et du gonflement par corrélation d'images,
- Modèle poromécanique associé pour la prédiction du gonflement à partir de mesures expérimentales d'isotherme d'adsorption,

Etude du comportement et de la rupture de nanocomposites bioinspirés de matériaux naturels

- Essais in situ multi-échelles pour l'identification des mécanismes d'endommagement et de rupture dans la nacre naturelle,
- Couplage AFM / corrélation d'images numériques pour le suivi de discontinuités matérielles et géométriques,
- Optimisation, synthèse et caractérisation de matériaux artificiels bioinspirés de matériaux naturels.

Interaction fluide-structure, endommagement et rupture de composites soumis à une explosion sous-marine

- Réduction en laboratoire d'expériences reproduisant les conditions réelles d'une structure marine soumise à une explosion,
- Optimisation et caractérisation de la résistance de structures composites en terme de déformation et d'endommagement.

Rupture dynamique fragile : initiation, propagation, arrêt et redémarrage de fissures sous impact

- Mise au point de nouveaux outils expérimentaux de suivi de propagation de fissures en dynamique.
- Simulation X-FEM de la propagation de fissures en dynamique avec comparaisons expérimentales.
- Etudes expérimentales et numériques de l'interaction entre deux fissures propageant dynamiquement.

A.2 Activités de recherches doctorales

A.2.1 Résumé de la thèse d'université

- Titre :** Initiation, Propagation, Arrêt et Redémarrage de Fissures sous Impact
- Dates :** 1er octobre 2005 – 30 septembre 2008 (3 ans)
- Soutenance :** 24 octobre 2008
- Manuscrit :** Télécharger le manuscrit
- Jury :**
- | | | |
|---------------------|---|---------------------------|
| ALAIN COMBESURE | Professeur - Directeur | LaMCoS - INSA de Lyon |
| LAURENT DAUDEVILLE | Professeur - Rapporteur | 3S-R - UJF de Grenoble |
| JACKY FABIS | Ingénieur de Recherche | ONERA - Centre de Lille |
| GÉRARD GARY | Directeur de Recherche CNRS | LMS - école Polytechnique |
| DOMINIQUE LEGUILLON | Directeur de recherche CNRS- Président | IILRA - Paris VI |
| HUBERT MAIGRE | Chargé de recherche CNRS - Directeur | LaMCoS - INSA de Lyon |
| DANIEL RITTEL | Professeur - Rapporteur | Technion - IIT Haifa |
| HERVÉ TRUMEL | Chercheur | CEA - Le Ripault |
- Lieu :** Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Structures,
Université de Lyon, CNRS,
INSA-Lyon, LaMCoS UMR5259, 69621 Villeurbanne.
<http://lamcos.insa-lyon.fr>
- Directeurs :** Alain Combescure, Professeur (alain.combescure@insa-lyon.fr)
Hubert Maigre, CR CNRS (hubert.maigre@insa-lyon.fr)
- Collaborateurs :** Julien Réthoré, CR CNRS (julien.Réthoré@insa-lyon.fr)
Fabrice Morestin, MdC (fabrice.morestin@insa-lyon.fr)
- Partenariat :** Laboratoire de Mécanique des Solides, Ecole Polytechnique.
Contact : Gérard Gary (gary@lms.polytechnique.fr)
Département Aéroélasticité et dynamique des structures (DADS), Onera-Lille.
Contact : Eric Deletombe (eric.deletombe@onera.fr)
Laboratoire MATEIS, INSA-LYON.
Contact : Rafael Estevez (rafael.estevez@insa-lyon.fr)
- Bourses :** Allocations pour moniteurs normaliens (AMN).
- Financements :** Ce travail a été financé par l'Agence Nationale pour la Recherche à travers un programme ANR/CNRS Jeunes Chercheur et Jeunes Chercheuses intitulé « Prévission physiquement fondée de la rupture dynamique » (DYNRUPT - JC05_45254).
La thèse est également labellisée par le Cluster MACODEV (Matériaux et Conception pour un Développement Durable) de la Région Rhône-Alpes et a obtenu un soutien de L'INSA de Lyon dans le cadre d'un projet "Bonus-Qualité-Recherche".
Le partenariat établi avec l'Onera-Lille a reçu le soutien de la région Nord-Pas de Calais et un soutien européen FEDER.
- Distinctions :** Prix de la Meilleure Thèse de la Fondation EADS.
Catégorie « Sciences de l'Ingénieur » - Année 2009.
Prix Paul Germain de la Meilleure Thèse de l'Association Française de Mécanique.
Sensibilité « Solides & associés » - Année 2008-2009.
Lauréat du 1er prix poster du conseil scientifique du cluster recherche MACODEV.

Mots-clefs : Rupture dynamique, mode mixte de rupture, arrêt de fissures, propagation de fissures, interaction entre fissures, branchement dynamique, méthode des éléments finis étendue (X-FEM), barres de Hopkinson, PMMA, localisation de fissures, corrélation d'images numériques, caméra ultra-rapide.

Résumé :

Les risques liés à la propagation dynamique de fissures sous impact sont encore très difficiles à estimer. D'une part, bien que de nombreuses expériences aient déjà été réalisées, l'obtention de résultats expérimentaux reste délicate, notamment si on cherche des conditions de chargement et de propagation particulières. D'autre part les outils de simulation numérique de propagation dynamique de fissure sont encore peu nombreux, difficiles d'emploi et intègrent des critères rudimentaires de propagation.

La détermination de critères de rupture dynamique à partir de résultats expérimentaux reste délicate. Il est difficile d'obtenir des propriétés matériaux intrinsèques uniquement à partir d'expériences de rupture dynamique. Ainsi la première étape pour valider des lois de propagation de fissures sous impact passe par le développement d'outils de simulation numérique. Depuis les années 1970, de nombreux codes de calcul mécanique ont été dédiés à l'étude de la propagation de fissures, notamment dans le cas du phénomène de fatigue. La principale difficulté consiste dans la nécessité de suivre la géométrie de la fissure au cours du temps. Ces dernières années, des méthodes alternatives basées sur la partition de l'unité ont permis une description implicite des discontinuités mobiles. C'est le cas de la méthode des éléments finis étendue (X-FEM) qui paraît particulièrement adaptée à la simulation de la propagation dynamique de fissures sous chargement mixte où les trajets de fissures ne sont pas connus a priori.

Si ces outils de calcul permettent maintenant de représenter l'avancée dynamique d'une fissure, les résultats numériques doivent être comparés à des résultats expérimentaux pour s'assurer que les lois introduites sont physiquement fondées. En effet, le couplage fort matériau - structure - chargement transitoire implique un nombre important de paramètres inconnus pour représenter la réalité du phénomène de rupture dynamique. Il est donc nécessaire de réaliser une multitude d'essais numériques. Par ailleurs, plusieurs combinaisons de ces paramètres fournissant une solution numérique plausible, il n'est pas simple de discerner quels sont les résultats physiquement acceptables. Cela peut être suffisant si l'on se contente de comparer des résultats post-mortem comme le nombre ou la forme de fragments dans l'étude de la multifissuration. Par contre si l'on s'intéresse aux phases transitoires qui ont lieu durant la rupture comme l'initiation, la propagation, l'arrêt et le redémarrage de fissures sous impact, une étude expérimentale ou numérique seule ne permet pas d'appréhender les phénomènes dans leur ensemble.

Notre objectif a donc été de développer conjointement des techniques expérimentales fiables et un outil de simulation numérique robuste pour l'étude des phénomènes hautement transitoires qui ont lieu durant la propagation dynamique de fissures sous impact. Durant cette thèse, des expériences (178 essais de rupture) ont donc été menées de front avec leur simulation numérique à l'aide d'un code de calcul dédié.

Plusieurs géométries ont été envisagées afin d'étudier différents cas de propagation dynamique : initiation en mode I pur, initiation en mode mixte, propagation, arrêt, redémarrage, interaction entre deux fissures, influence d'un trou sur le trajet d'une fissure, branchement dynamique de fissures. Ces expériences ont ensuite été reproduites numériquement afin de valider les algorithmes et les critères de rupture choisis. D'un point de vue théorique, l'analyse asymptotique en mécanique de la rupture dynamique fragile a défini les paramètres décrivant la rupture. Des critères simples en contraintes circonférentielles maximales, formulés en quasi-statique et étendus au cas dynamique, ont été adoptés afin de déterminer les phases effectives de propagation (initiation, arrêt ou redémarrage).

D'un point de vue numérique, un outil de simulation basé sur la méthode des éléments finis étendue et dédié à l'étude de la propagation dynamique de fissure a permis de représenter l'avancée dynamique de fissures soumises à un chargement transitoire. D'un point de vue expérimental et afin de discerner les résultats numériques physiquement acceptables, de nouvelles techniques dédiées au suivi continu du front d'une fissure se propageant dynamiquement ont été développées et validées :

- Dans le cas de matériaux opaques, un algorithme local de corrélation d'images numériques a été développé afin de localiser le front de fissure. Cet algorithme a été validé sur un cas particulier de propagation dynamique où les images sont acquises à l'aide d'une caméra ultrarapide (jusqu'à 400000 images par seconde). L'architecture particulière de la caméra ultra-rapide amène des difficultés concernant l'estimation des facteurs d'intensité des contraintes durant l'essai. Cependant un nouvel algorithme a été développé et validé sur un cas plus simple de propagation de fissure par fatigue.
- Dans le cas d'un matériau transparent, l'utilisation, tout d'abord de caméras rapides, puis d'un extensomètre optique, a fourni une histoire très précise de la position du front et permis ainsi l'étude des phases hautement transitoires que sont l'initiation, la propagation, l'arrêt et le redémarrage de fissures, notamment en fonction de la vitesse d'impact. Enfin les faciès de rupture ont été observés au microscope optique. Des formes paraboliques, caractéristiques des faciès de rupture rapide dans le PMMA, ont été relevées. Les origines et intérêts expérimentaux de ses formes ont été discutés.

La robustesse du code de calcul utilisé ainsi que la validité des modèles et lois de propagation adoptés ont été vérifiées sur plusieurs essais de rupture dynamique. Différentes histoires expérimentales de propagation dynamique présentant une ou plusieurs phases d'arrêt ont été reproduites numériquement.

Possédant finalement à la fois des outils expérimentaux fiables permettant d'étudier les phases transitoires subies par une fissure durant un essai de rupture dynamique et un code de simulation numérique robuste permettant de reproduire l'histoire complexe de propagation, il a été possible de s'intéresser à des phénomènes particuliers se produisant durant la propagation dynamique de fissures sous impact.

Quelques unes des particularités dues à l'aspect dynamique de la rupture sous impact vis-à-vis de la rupture quasi-statique ont ainsi été étudiées. Les différences de trajet et d'histoire de propagation obtenues lors d'une étude dynamique et lors d'une étude quasistatique ont été traitées. L'influence d'un trou sur le trajet d'une fissure qui propage soit statiquement (la fissure plonge dans le trou) soit dynamiquement (la fissure évite le trou) a été évoquée. Des résultats expérimentaux ont été comparés à des résultats numériques obtenus en propagation dynamique et en fatigue quasistatique. On a ainsi montré qu'il était nécessaire d'effectuer une étude dynamique dans le cas du dimensionnement des structures, notamment pour le piégeage de fissures.

Une étude expérimentale et numérique de l'influence de l'interaction entre deux fissures a également été présentée. Le cas de deux pré-fissures radiales symétriques et le cas de deux fissures entrant en collision ont été étudiés. Un phénomène intéressant d'évitement a été mis en évidence lorsque deux fissures entrent en collision : les fissures s'initient, propagent, se contournent en se dépassant puis coalescent. L'influence de la taille du rayon d'entaille et du taux de chargement sur les phases de propagation ont également été étudiées et justifiées à l'aide d'une approche microscopique thermodynamique du craquelage prenant en compte les dissipations plastiques dans la zone d'élaboration.

Une étude expérimentale du branchement dynamique a été présentée. Lorsque la vitesse de propagation de la fissure devient suffisante, une fissure principale donne naissance à plusieurs fissures (ou branches) secondaires. Le phénomène a été décrit et son origine discutée. Ensuite l'influence de la vitesse de propagation avant branchement sur le nombre de branches créées a été évoquée.

Deux autres séries d'expériences ont été présentées visant à mettre en évidence les effets tridimensionnels et les effets de plasticité durant la propagation dynamique de fissures :

- Tout d'abord, la rupture tridimensionnelle dans le PMMA a été étudiée en usinant des pré-entailles inclinées dans l'épaisseur. Un déversement et une segmentation du front ont été observés.
- Ensuite l'étude expérimentale de la rupture dynamique d'un alliage d'aluminium aéronautique a été présentée. La formation et la propagation d'une zone de plasticité non confinée ainsi que la formation d'ailes plastiques ont été observées.

A.2.2 Autres activités

Titre : Le Rhône du Léman à la mer : la pratique d'un fleuve
Dates : 1er février 2006 – 30 septembre 2007 (20 mois)
Contexte : CIES de Lyon - Atelier-projet pluridisciplinaire
Collaborateurs : Olivier Caty, Marylise Cottet, Romain Marion, Florence Richard-Schott, Hervé Tronchère.
Partenariat : La Maison du Fleuve Rhône, Givors (www.maisondufleuverhone.org).
Contact : Sophie Vuillemand (sophie.vuillemand@maisondufleuverhone.org)
Zone atelier bassin du Rhône – ZABR (<http://www.graie.org/zabr/>)
Groupe de Recherche d'Archéologie Aquatique Lyonnais
Contact : Alain Lavocat (alain.lavocat@lcl.fr)

Description :

Dans le cadre d'un atelier projet organisé par le CIES de Lyon, six doctorants allocataires-moniteurs issus de différentes disciplines (énergétique, géographie, matériaux, mécanique) se sont réunies afin de mener une réflexion pédagogique et méthodologique sur un axe de vie et de développement majeur en France et en Europe : le fleuve Rhône. Plusieurs thèmes de réflexion ont été abordés suivant les domaines de compétences ou les centres d'intérêt de chacun : hydrologie, géographie, archéologie subaquatique, énergétique... Exemple d'axe de réflexion : Le fleuve Rhône, un réservoir d'énergie renouvelable ? Depuis l'avènement de l'électricité nucléaire, l'hydro-électricité est passée au second plan de la production énergétique en France. Cependant, dans une optique de développement durable et sous l'impulsion de l'Union Européenne, les instances politiques françaises cherchent des alternatives au nucléaire en privilégiant les énergies propres et renouvelables. Dans cette optique, le fleuve Rhône peut-il être considéré comme un réservoir d'énergie renouvelable ? Un état historique et géographique de l'art de la production hydroélectrique sur le Rhône a été étudié. A également été abordé la difficile conciliation des impacts sociaux et climatiques avec le développement territorial et le respect du bon fonctionnement des milieux naturels. L'avenir d'une telle technologie vis-à-vis des autres énergies renouvelables telles que les solutions solaire, marémotrice et éolienne a été discuté.

A.3 Activités de recherches post-doctorales

A.3.1 Etude du comportement et de la rupture de nanocomposites bioinspirés des nacres naturelles

- Titre :** Etude du comportement et de la rupture de nanocomposites bioinspirés des nacres naturelles
- Dates :** 1er Novembre 2008 – 31 août 2009 (10 mois)
- Lieu :** Micro and Nanomechanics Laboratory
Northwestern University, Chicago, USA.
<http://clifton.mech.northwestern.edu/espinoza>
- Collaborateurs :** Horacio D. Espinosa (Professeur, espinoza@northwestern.edu)
Owen Loh (Doctorant)
- Financements :** Ce travail a été financé par une bourse postdoctorale de la Délégation Générale pour l'Armement (DGA/D4S - N°0860021).
Ce projet a également été subventionné par General Motors à travers un programme de recherche intitulé : « Understanding and Mimicking Nacre Deformation Mechanisms ».
- Distinctions :** Lauréat de la bourse LAVOISIER du ministère des Affaires étrangères et européennes.
Lauréat de la bourse post-doctorale de la Délégation Générale pour l'Armement.
- Mots-clefs :** Nano-composites, Matériaux bio-inspirés, Nacre, Rupture, AFM, Corrélation d'images.
- Description :**

Les matériaux du vivant présentent souvent des propriétés mécaniques remarquables, inégalables en laboratoire en raison de leurs conditions très particulières d'élaboration. Nombre d'entre eux sont des matériaux composites, alliant une phase organique et une phase minérale. Les matériaux biomimétiques sont nés de l'observation du vivant et, plus précisément, de l'observation de certains matériaux que la nature a dotés de propriétés inaccessibles aux matériaux artificiels conventionnels. Les mollusques sont apparus il y a 545 millions d'années et comportent environ 60000 espèces. Les mollusques ont une structure interne très tendre (le manteau) et la plupart ont développé une coque externe afin de se protéger des agressions extérieures. Une grande variété de structures de coquillages a ainsi émergé. Parmi toutes ces structures, la nacre se révèle être la plus résistante.

La nacre a fait l'objet de beaucoup d'études dans les vingt dernières années car ses caractéristiques mécaniques sont exceptionnelles et la placent devant les meilleures céramiques que nous sommes capables de synthétiser aujourd'hui. Il s'agit d'un matériau hybride composé principalement (95%) de tablettes polygonales d'aragonite (CaCO_3 , céramique géologique très fragile) insérées dans une matrice organique (5%). Cet ajout d'une petite quantité de phase organique et une microstructure bien conçue lui concèdent une ténacité qui est 20 à 30 fois celle de l'aragonite pure.

La nature construit ces composites à partir de la base, partant des éléments nanoscopiques pour créer des structures à l'échelle macroscopique. Chacune des échelles, du nano au macro, contribue à la performance globale de la matière : leur structure est hiérarchique. En outre, ces matériaux ont subi des essais mécaniques durant des millions d'années, et leur microstructure s'est adaptée et optimisée pour le type et l'ampleur des sollicitations qu'ils doivent endurer. Par ailleurs, la sélection naturelle fait que seul les spécimens les plus résistants sont observables aujourd'hui.

Une meilleure compréhension de la manière dont la microstructure de ces matériaux est liée à leurs performances mécaniques permettrait de fournir de nouvelles idées pour la conception optimisée de structures et pour le design de nouveau matériaux bioinspirés. Pour cela, des essais de rupture de nacre humide sous chargement quasi-statiques in situ sont proposés. Un montage de flexion trois points, est placé soit sous un microscope optique soit sous un microscope à force atomique afin d'observer in situ et de quantifier à l'aide de techniques de corrélation d'images numériques, les phénomènes mis en jeu à différentes échelles.

A.3.2 Interaction fluide-structure et rupture de structures composites soumises à une explosion sous-marine

Titre : Interaction fluide-structure et rupture de structures composites soumises à une explosion sous-marine.

Dates : 1er Novembre 2008 – 31 août 2009 (10 mois)

Lieu : Dynamic Inelasticity Laboratory
Northwestern University, Chicago, USA.
<http://clifton.mech.northwestern.edu/espinoza/research/failure.htm>

Collaborateurs : Horacio D. Espinosa (Professeur, espinoza@northwestern.edu)
Felix Latourte (Post-doctorant)

Financements : Ce projet a été subventionné par the Office of Naval Research (ONR) à travers un programme de recherche intitulé : « Marine composites and sandwich structures ».

Mots-clefs : Interactions Fluide-Structure, Matériaux Composites, Sandwichs, Rupture, Explosions sous-marine.

Description :

La résistance à l'impact des structures coques marines est un problème d'ingénierie critique qui est largement étudié afin de concevoir les prochaines générations de navires. La protection à l'impact joue un rôle de plus en plus important dans la conception des moyens de transports marins, civils ou militaires. Deux architectures différentes sont généralement employées pour la conception de structures coques composites : soit on utilise uniquement des panneaux composites pleins, soit on utilise des structures sandwichs où un noyau de mousse facilement écrasables est entouré de panneaux composites. Le choix des matériaux et le design de ces structures sont des sujets encore largement discutés. Des expériences de rupture et d'endommagement de structures composites marines sont mises à l'échelle afin de pouvoir être reproduite en laboratoire. Ces expériences d'interaction fluide-structure sous impacts explosifs sont ensuite reproduites numériquement afin de valider les modèles de rupture et d'endommagement choisis. Différents géométries de panneaux et de sandwichs composites sont testées afin d'étudier l'influence des épaisseurs des différentes couches. Finalement une géométrie optimisée en terme de résistance à l'impact est conçue à l'aide d'algorithmes numériques d'optimisation et ces résultats sont confrontés à des tests expérimentaux réels.

A.4 Insertion dans l'unité de recherche d'appartenance

A.4.1 Place de ma recherche dans celle de mon unité

A.4.1.1 Laboratoire d'accueil

Le Laboratoire des Fluides Complexes et leurs Réservoirs (LFC-R, UMR5150) est une unité mixte de recherche de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour, du CNRS et de TOTAL SA dirigée par Gilles Pijaudier-Cabot. Depuis 2011, le laboratoire est structuré en cinq groupes de recherches fortement multidisciplinaires : Colloïdes et interfaces, Propriétés de Transport, Comportement de Phase, Géomécanique - Milieux Poreux, Réservoirs Géologiques (voir figure A.2). Il positionne son activité scientifique sur des thématiques liées principalement au génie pétrolier dans la combinaison fluides/réservoirs difficiles. Reconnu par les sections 9, 10 et 18 du CNRS, le laboratoire est rattaché principalement à l'INSIS et de façon secondaire à l'INSU. Le LFC-R fait partie de l'Institut Pluridisciplinaire de Recherche Appliquée dans le domaine du génie pétrolier (IPRA FR2952). Créée en 2005, l'IPRA allie des compétences relevant de trois disciplines scientifiques différentes : les mathématiques, les géosciences et les sciences de l'ingénieur. Son originalité réside dans cette association qui lui offre l'avantage de disposer de savoir-faire complémentaires permettant d'aborder à la fois les études expérimentales et théoriques. Elle regroupe trois laboratoires de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour (LFC-R UMR5150, LMAP UMR5142 et SIAME EA4581). En plus de son réseau local au travers de l'IPRA, le laboratoire fait partie de réseaux régionaux comme l'Institut Carnot ISIFoR qui regroupe un ensemble de compétences dans le domaine de l'ingénierie durable des ressources fossiles, couvrant les géosciences, les mathématiques, la chimie et les sciences de l'ingénieur. La laboratoire fait également partie du groupe national de recherche « Mécanique et Géosciences » (GdR MeGe), du réseau international « ALERT Geomaterials » et du groupe de recherche international GDR-I « Multi-scale Materials Under the Nanoscope ». Le LFC-R assure ainsi un environnement multidisciplinaire parfait pour mener à bien mes actions de recherches en terme de moyens complémentaires (expérimentaux ou numériques), de compléments d'expertises et d'activités scientifiques.

A.4.1.2 Équipe d'accueil *Géomécanique – Milieux Poreux*

Le groupe « Géomécanique – Milieux Poreux » piloté par Gilles Pijaudier-Cabot, s'intéresse au couplage entre endommagement par microfissuration et fissuration, et la perméation dans les géomatériaux. La poromécanique des milieux poreux et micro-poreux sert de lien entre le comportement mécanique et les propriétés de transport. Le groupe développe à cette fin des méthodes expérimentales de caractérisation de l'adsorption et du transport en milieu poreux et aussi des modèles théoriques et numériques basés sur la simulation moléculaire, Monte Carlo et dynamique moléculaire. Les aspects liés à la non saturation des milieux poreux sont abordés dans le contexte de l'acoustique physique. Ces approches ont des applications dans le cadre des Tight Gas Reservoirs, des Gas Shales et des Coal Bed Methane, ainsi que dans le stockage géologique. Le groupe est composé de 9 permanents, 2 Professeurs, 6 Maîtres de Conférences (dont je fais partie) et 1 Ingénieur de recherche CNRS (voir figure A.2). Intégré à cette équipe depuis septembre 2010 en tant que Maître de Conférences porteur d'une Chaire CNRS – Enseignement supérieur, j'ai déjà noué des liens solides humainement et scientifiquement avec les autres membres de l'équipe qui se traduisent par des activités de recherche communes. Ces collaborations sont développées au tableau A.5.

A.4. Insertion dans l'unité de recherche d'appartenance

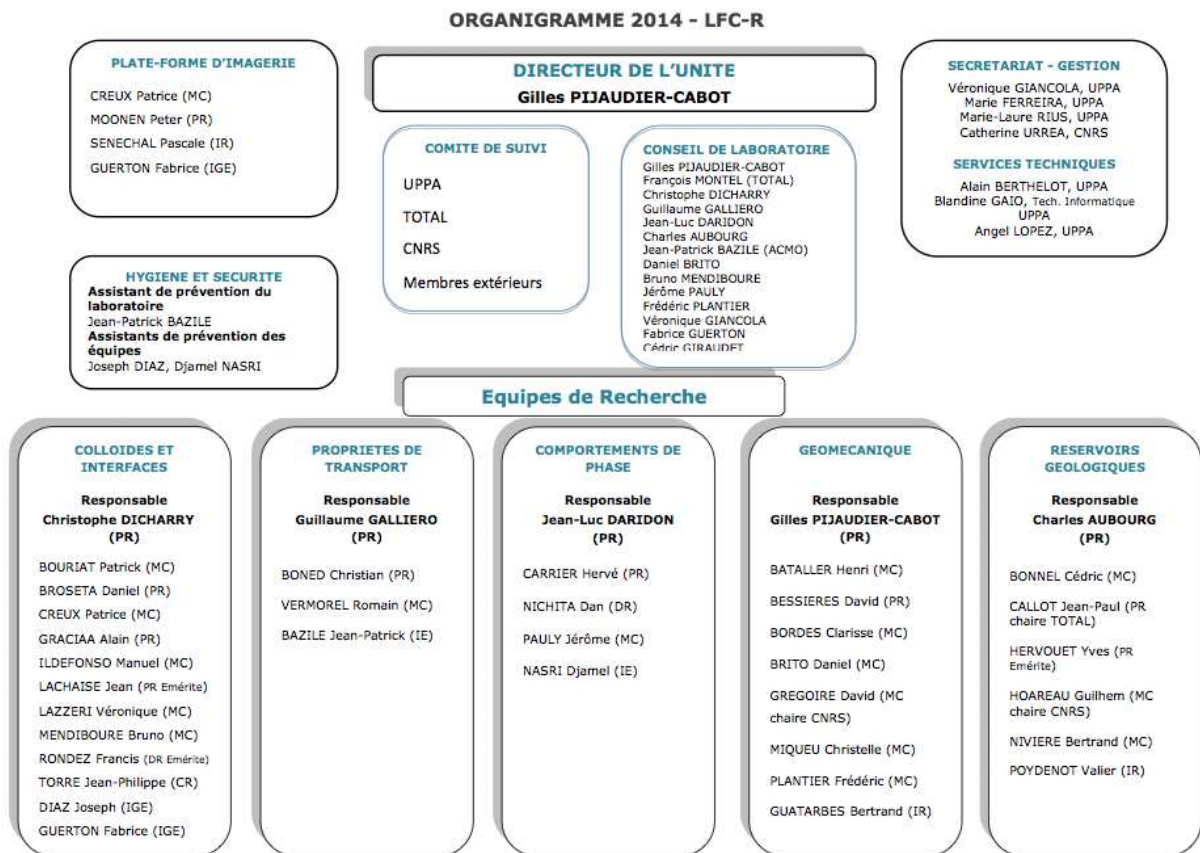


FIGURE A.1 – Organigramme LFC-R au 1er janvier 2014.



FIGURE A.2 – Trombinoscope de l'équipe au 1er janvier 2014.

Personnels	Statut	Thématique personnelle
Collaborations au sein de l'équipe		
Gilles Pijaudier-Cabot	PR	Rupture et durabilité des structures
Frédéric Plantier	MC	Adsorption, thermo-porosimétrie
Christelle Miqueu	MC	Interface fluide/solide, adsorption
Henri Bataller	MC	Thermodiffusion
Collaborations au sein du laboratoire		
Guillaume Galliero	PR	Simulation par dynamique moléculaire
Romain Vermorel	MC	Milieus microporeux

TABLE A.5 – Collaborations au sein du LFC-R.

A.5 Animation de la recherche

A.5.1 Participations à des travaux d'expertise

Reviewer pour diverses journaux internationaux (EJECE, EJM-A-Solids, ExpMech, JMR)

A.5.2 Obtention et gestion des contrats de recherche

Dans cette partie, on présente les projets auxquels l'auteur a pris part en tant que chercheur et ceux qu'il porte ou a porté personnellement. Les projets sont classés par ordre chronologique. Les projets obtenus et portés personnellement par l'auteur sont les projets 2, 6, 7, 8 (co-porteur), 10, 11 (co-porteur), 14.

Projet 1 – Prévision physiquement fondée de la rupture dynamique

Acronyme : DYNRUPT

Financeur : ANR Jeunes Chercheurs

Montant : 100k€

Rôle : doctorant

Porteur principal : A. Gravouil (Insa-Lyon)

Durée : 2005-2008

Description : Ce projet a tourné autour de l'analyse de la propagation de fissure sous chargement fortement transitoire. L'objectif était de comprendre pourquoi et comment se propageaient les fissures dans des structures soumises à des impacts. Cela a nécessité à la fois des développements expérimentaux et numériques. Concernant les expériences, de nombreux essais ont été réalisés afin d'étudier différents cas de chargements en intensité et en direction. Cela a été l'occasion de développer de nouvelles techniques de mesure en temps réel de la position d'une pointe de fissure pour les matériaux transparents ainsi que de nouvelles techniques de mesure de champ par corrélation d'images intégrant des discontinuités pour les matériaux opaques. Concernant les simulations, l'outil existant X-FEM a été utilisé et amélioré afin de prendre en compte la mixité du chargement au cours de la propagation ainsi que la possibilité d'avoir différents critères pour rendre compte du démarrage, de l'arrêt et du redémarrage des fissures. L'algorithme de résolution a aussi été modifié afin de pouvoir traiter des simulations tridimensionnelles afin d'étudier des propagations de fissures qui se tordent ou qui déversent.

Projet 2 – Étude du comportement et de la rupture de nanocomposites bioinspirés des nacres naturelles

Financeur : Délégation Générale pour l'Armement (DGA/D4S)

Montant : 41k€

Rôle : Porteur principal

Durée : 2008-2009

Description : Ce projet vise à étudier le comportement et la rupture de nouveaux matériaux biomimétiques tels que les structures coques nanocomposites bioinspirées des nacres naturelles.

Projet 3 – Marine composites and sandwich structures

Financeur : Office of Naval Research (ONR Grant)

Rôle : chercheur

Porteur principal : H.D. Espinosa (Northwestern University, USA)

Durée : 2008-2012

Description : La résistance à l'impact des structures coques marines est un problème d'ingénierie critique qui est largement étudié afin de concevoir les prochaines générations de navires. La protection à l'impact joue un rôle de plus en plus important dans la conception des moyens de transports marins, civils ou militaires. Deux architectures différentes sont généralement employées pour la conception de structures coques composites : soit on utilise uniquement des panneaux composites pleins, soit on utilise des structures sandwichs où un noyau de mousse facilement écrasables est entouré de panneaux composites. Le choix des matériaux et le design de ces structures sont des sujets encore largement discutés. Des expériences de rupture et d'endommagement de structures composites marines sont mises à l'échelle afin de pouvoir être reproduite en laboratoire. Ces expériences d'interaction fluide-structure sous impacts explosifs sont ensuite reproduites numériquement afin de valider les modèles de rupture et d'endommagement choisis. Différents géométries de panneaux et de sandwichs composites sont testées afin d'étudier l'influence des épaisseurs des différentes couches. Finalement une géométrie optimisée en terme de résistance à l'impact est conçue à l'aide d'algorithmes numériques d'optimisation et ces résultats sont confrontés à des tests expérimentaux réels.

Projet 4 – Understanding and Mimicking Nacre Deformation Mechanisms

Financeur : GMC (General Motors)

Rôle : chercheur

Porteur principal : H.D. Espinosa (Northwestern University, USA)

Durée : 2007-2009

Description : Nacre from seashells is a perfect example of a biological material mostly made of weak components (a fragile bioceramic), but which exhibits surprisingly high levels of strength and toughness. For this reason nacre is attracting more and more attention from the engineering and materials science communities, as a source of inspiration for novel composite designs.

Projet 5 – Failure and Fluid Flow in Porous Quasibrittle Materials

Acronyme : FAILFLOW

Financeur : European Research Council (ERC Advanced Grant :)

Montant : 1.49M€

Rôle : chercheur

Porteur principal : G. Pijaudier-Cabot (Université Pau & Pays Adour)

Durée : 2008-2013

Description : This project focuses on fluid flow in porous materials with evolving microstructure in the context of civil engineering applications and geomechanics. When the distribution of cracks and the distribution of pore size evolve in concrete and rocks, the influence on the permeability in the case of a single or a multiphase fluid flow needs some in depth investigation. A recent review of state of the art in modelling progressive mechanical breakdown and associated fluid flow in heterogeneous rock shows that little is known on the coupled effects between micro cracking and the intrinsic permeability of a solid phase. The present project intends to tackle this relationship between mechanical breakdown and associated fluid flow in the context of poromechanics extended to non local modelling. In particular, we will investigate how the internal length which plays a pivotal role at the inception and propagation of material failure may interact with the permeability, what enhanced Darcy-like relationship might be derived in order to apprehend such effects and how to model fluid flow in tight porous materials. The models will be extended to complex and multicomponent systems reproducing as closely as possible the behaviour of real fluids in order to understand and to describe the thermodynamical behaviour due to confinement such as modification of phase transitions and capillary condensation. The principal investigator of this project is a specialist in the field of continuum damage mechanics, failure due to strain and damage localisation. He has been the founder and among the major promoters of non local damage modelling, which is today a state of the art model in computational structural failure analyses. After a decade of research on durability problems for which he was elected at Institut Universitaire de France, his research interests recently turned toward petroleum engineering, the focus of the research team he joined two years ago at Université de Pau.

Projet 6 – Chaire CNRS Enseignement supérieur

Financeur : CNRS - UPPA

Montant : 50K€

Rôle : Porteur principal

Durée : 2010-2015

Description : La chaire vise à préciser les couplages entre endommagement et perméabilité d'une part et entre gonflement et adsorption d'autre part dans les roches naturelles ou matériaux cimentaires analogues.

Projet 7 – Couplage Endommagement Perméabilité dans les Géomatériaux

Acronyme : CEPAGE

Financeur : Conseil Régional d'Aquitaine

Montant : 155K€

Rôle : Porteur principal

Durée : 2012-2015

Description : De nombreux domaines d'activités liés à la géomécanique (industrie pétrolière, stockage de CO₂, stockage et suivi de déchets industriels et nucléaires, traitement des eaux) nécessitent une meilleure appréhension du lien entre chargement mécanique, endommagement, distribution de taille de pores, perméabilité et gonflement. Le projet CEPAGE vise à mieux comprendre les couplages entre endommagement, fissuration, écoulements et gonflement au sein de géomatériaux poreux en vue : 1) d'optimiser la production et le taux de récupération des énergies fossiles ; 2) d'optimiser les capacités de stockages de CO₂ en milieu poreux. Pour ce faire, la démarche scientifique met en jeu à la fois modélisation, études expérimentales et simulations numériques. Lors de la rupture de géomatériaux poreux, la répartition de l'endommagement et la distribution de taille de pores évoluent. Dans la phase diffuse, la perméabilité est fonction puissance de l'endommagement et dans la phase localisée, la perméabilité est fonction puissance de l'ouverture de fissure (écoulement de Poiseuille). Entre ces deux comportements, le problème reste ouvert et de nouvelles expériences doivent être mise en œuvre à l'échelle de la microstructure pour mettre en évidence les paramètres déterminants afin d'améliorer les modèles existants. Dans ce contexte, un objectif principal sera d'extraire et de reconstituer après endommagement le réseau poreux connecté par micro-tomographie au rayon X afin d'étudier l'évolution des propriétés de perméabilité et de porosité du matériau en fonction du chargement global, de l'endommagement et de la présence d'un écoulement fluide. On cherche notamment à faire le lien entre la zone d'élaboration, caractéristique de l'endommagement, la distribution de taille de pores, caractéristique de la perméabilité, et les grandeurs internes caractéristiques de l'écoulement fluide. Des expériences de rupture à l'échelle de la microstructure seront donc menées afin d'étudier l'évolution de cette microstructure et des propriétés de perméabilité en fonction du chargement global, de l'endommagement et de la présence d'un écoulement fluide mono ou multiphasique.

Projet 8 – Bonus Qualité Recherche UPPA

Financeur : Université Pau & Pays Adour (UPPA)

Montant : 20K€

Rôle : co-porteur du projet

Porteur principal : C. Perlot (Université Pau & Pays Adour)

Durée : 2012

Description : Dans le contexte du stockage de CO₂ ou dans le contexte de l'exploitation de réservoirs non conventionnels de gaz, il est nécessaire de mieux appréhender les interactions entre le CO₂ injecté et la matrice poreuse solide. Par exemple dans le cadre de l'exploitation des réservoirs de gaz naturels non conventionnels tels que les lits de charbon (Coal Bed Methane), le procédé industriel utilisé pour l'extraction consiste à venir chasser le méthane adsorbé dans le lit de charbon en y injectant du CO₂ sous pression. Le CO₂ s'adsorbant de manière préférentielle

dans le charbon, cette technique peut également constituer une méthode de stockage géologique du CO₂. Dans ces roches réservoirs, on distingue deux types de porosité : les microfissures, de taille micrométrique, qui assurent la perméabilité de la roche et les micropores, de taille nanométrique, dans lesquels le confinement des molécules de gaz peut entraîner un gonflement de la roche. Ainsi, l'adsorption préférentielle du CO₂ dans le charbon se traduit par un gonflement de la matrice nanoporeuse et, consécutivement, par une fermeture du réseau de microfissures. Ce phénomène résulte donc en une diminution importante de la perméabilité de la roche, ce qui explique le faible rendement des techniques d'extraction classiques pour ce type de réservoir. Une étude théorique analytique préliminaire a montré le lien entre adsorption et déformation dans les solides nanoporeux. Le modèle développé vise à permettre d'estimer directement le gonflement d'un solide nanoporeux à partir de mesures d'isothermes d'adsorption (technique manométrique et gravimétrique). Pour valider ce modèle, un nouveau système expérimental doit être mis au point : une cellule manométrique d'adsorption sera équipée de fenêtres de visualisation dans le but de mesurer simultanément les quantités de gaz adsorbé et les déformations induites par méthodes optiques (corrélation d'images numériques et capteurs lasers). Cette procédure expérimentale, menée conjointement avec des mesures gravimétriques d'adsorption déjà maîtrisée au sein du laboratoire (balance à suspension magnétique) permettra d'obtenir expérimentalement toutes les variables intervenant dans le modèle théorique. Une fois validées par l'expérience, les prévisions de ce modèle seront utilisées dans des modèles de réservoirs pour évaluer l'évolution de leur perméabilité en fonction de la technique d'extraction et/ou de stockage de gaz.

Projet 9 – Exploitation des ressources non conventionnelles : adsorption et effets induits

Financeur : Institut Carnot ISIFOR

Montant : 40K€

Rôle : responsable scientifique « gonflement/adsorption »

Porteur principal : J. Paillol (Université Pau & Pays Adour)

Durée : 2012

Description : Dans le contexte de l'exploitation des réserves non conventionnelles de gaz, il est nécessaire de mieux appréhender les interactions entre les espèces adsorbées et la matrice poreuse :

- Par exemple, dans le cadre de l'exploitation des lits de charbon, il est observé une chute d'injectivité suite au gonflement de la matrice poreuse lié à l'adsorption préférentielle du CO₂ sur le méthane qui a tendance à refermer les microfissures assurant la perméabilité naturelle de la roche. Une meilleure description du couplage adsorption/gonflement contribuerait à une meilleure optimisation des techniques actuelles d'exploitation de ces réserves ainsi qu'au développement de nouvelles techniques où, par exemple, un gonflement bien maîtrisé induirait une microfissuration et donc augmenterait la perméabilité du milieu.
- De même, l'exploitation des gaz de schiste (gas shales) suppose des situations complexes avec co-existence de phases, aqueuses ou salines, et d'hydrocarbures qui peuvent induire des chutes de perméabilité. La description de la distribution des espèces, à l'échelle du pore, est donc une donnée essentielle quant à l'exploitation de ces réserves. Cette distribution étant partiellement conditionnée par les interactions électrostatiques, l'application d'un champ électromagnétique externe est une potentialité originale de modification des propriétés de surface (adsorption).

Projet 10 – Échange en milieux poreux : Propriétés de transport et tortuosité

Financeur : Agglomération Côte Basque-Adour

Montant : 10K€

Rôle : Porteur principal

Durée : 2013

Description : Dans le contexte d'une construction durable, les échanges et transferts au sein des matériaux poreux sont de premières importances. On cherche notamment à minimiser les échanges thermiques pour limiter les pertes tout en gardant des matériaux « respirant » afin d'assurer une bonne qualité de l'air intérieur. Dans le cadre de filtres ou de matériaux de construction, les propriétés de transport, comme la perméabilité (aptitude à se laisser traverser par un fluide), sont caractérisées par la géométrie du squelette poreux, notamment la distribution de taille de pore, leur connectivité et la tortuosité du milieu poreux. La tortuosité est le rapport entre la longueur du trajet réel réalisé par une particule pour traverser le milieu poreux et sa longueur caractéristique, c'est donc un paramètre essentiel lorsque l'on cherche à évaluer les propriétés de transport du milieu. Le problème est qu'il n'existe pas de tortuosimètre et les seules mesures disponibles sont fortement liées aux propriétés de transport que l'on cherche à déterminer. Ainsi on ne peut pas obtenir une mesure indépendante de tortuosité et on ne possède qu'une idée approximative de la tortuosité intrinsèque du matériau, ce qui est très handicapant pour proposer des modèles prédictifs des propriétés de transport en milieu poreux. Ce projet se propose de mesurer la perméabilité et la tortuosité d'un même milieu poreux par deux méthodes expérimentales indépendantes basées sur des phénomènes physiques différents ceci afin d'assurer une mesure intrinsèque de ces grandeurs. La mesure de perméabilité sera effectuée par perméamétrie à l'azote et la mesure de tortuosité par thermo-diffusion. Par ailleurs un modèle prédictif de perméabilité basé sur la description explicite du squelette poreux à l'aide de la distribution de taille de pore et mettant en jeu la tortuosité du milieu permettra de faire le lien entre les deux mesures. La tortuosité ainsi évaluée sera comparée à celle déterminée par les mesures de coefficients de diffusion moléculaire à travers le milieu poreux saturé par un liquide composé au moins de deux constituants chimiques. La méthodologie sera tout d'abord employée sur un matériau modèle de synthèse puis sur des mortiers de construction.

Projet 11 – Fracturation et perméabilité des milieux hétérogènes quasi-fragiles

Financeur : Conseil général CG 64 & Total SA

Montant : 280K€

Rôle : co-porteur du projet

Porteur principal : G. Pijaudier-Cabot (Université Pau & Pays Adour)

Durée : 2012-2015

Description : Le développement de nouvelles techniques de forage (forages horizontaux par exemple) est principalement lié à l'exploitation des ressources non conventionnelles. Il s'accompagne par la mise en œuvre massive de techniques de stimulation de la production d'hydrocarbures. La fracturation hydraulique est le procédé le plus répandu : 1 puits foré sur 2, toutes applications confondues, subit une étape de fracturation hydraulique. Le procédé consiste principalement à fracturer le milieu naturel en injectant de l'eau sous forte pression. Suite à son interdiction en

France dans le contexte de la production d'hydrocarbures, ce procédé est très controversé, du moins son application aux hydrocarbures car la fracturation hydraulique reste autorisée et employée pour la géothermie profonde par exemple. Quelle que soit l'application envisagée (forage d'eau potable, géothermie profonde, forage pétrolier), il importe pourtant de mieux comprendre comment fonctionne ce procédé afin de renforcer sa sûreté environnementale. Les questions posées dans le cadre de ce projet touchent à la compréhension du procédé de fracturation hydraulique. Dans le cas des massifs homogènes, le procédé est assez bien compris car il a fait l'objet de nombreux travaux de recherche. Dans le cas des massifs rocheux présentant des joints de moindre résistance, l'interaction entre une fracturation produite par le procédé et les joints reste à élucider. Vient-on créer de nouvelles fissures ou vient-on réactiver des joints de faibles caractéristiques mécaniques ? Dans quelles conditions les deux phénomènes entrent en compétition ? Nous voulons comprendre comment la fracturation se développe dans ces milieux et quelles sont les conséquences sur la perméabilité du massif. Pour cela, un travail de modélisation, validé par des expériences en laboratoire combinant chargement mécanique, écoulement de fluide et cartographie de la fissuration par analyse acoustique sera mis en œuvre.

Projet 12 – Caractérisation et mesures de l'adsorption en conditions réservoirs des constituants de la roche mère de la Vaca Muerta (Bassin du Neuquen - Argentine)

Financier : Total SA

Montant : 80K€

Rôle : chercheur

Porteur principal : F. Plantier (Université Pau & Pays Adour)

Durée : 2013-2014

Description : Tâche 1 : Caractérisation des différents substrats en termes de surface BET et de distribution en taille de pores (PSD) méso-poreuse. Tâche 2 : Caractérisation des capacités de stockage par mesures d'adsorption (quantités adsorbées et chaleurs d'adsorption) en conditions de réservoirs sur un système simple (kérogène + CH₄).

Projet 13 – Maîtrise du confinement d'une enceinte en accident

Acronyme : MACENA

Financier : ANR RSNR

Montant : 2,8M€

Rôle : chercheur

Porteur principal : F. Dufour (INPG)

Durée : 2013-2017

Description : Le projet sélectionné s'intitule "Maîtrise du confinement d'une enceinte en accident (MACENA)" et vise à caractériser le comportement d'une enceinte de confinement en béton précontraint sous accident grave. L'accident grave est défini par un chargement en pression interne de 5 bars et en température maintenu pendant 2 semaines. L'enceinte de confinement est la troisième et dernière barrière de la centrale permettant d'isoler le réacteur et son circuit primaire, du circuit secondaire et du reste des installations. Dans le cas d'un accident, et après rupture des deux premières barrières d'isolement (gaine de combustible et circuit primaire), l'enceinte

de confinement dernière barrière permettant d'empêcher la dispersion de radionucléide. Durant un accident grave, la pression interne reste inférieure à la pression maximale admissible par le matériau, et donc l'intégrité de la structure est préservée. Cependant, les propriétés de transfert peuvent être fortement modifiées et donc les propriétés de confinement, notamment pour les réacteurs de type N4 – 1300MW où la confinement est uniquement réalisé au travers de l'enceinte en béton précontraint.

Le projet MACENA qui vise à mieux comprendre le comportement mécanique d'une enceinte en accident en lien avec ses propriétés de transport, s'organise autour de 4 axes principaux de recherche : WP1 : Assessment of structural state before an accident WP2 : Instantaneous and delayed mechanical behavior of concrete during an accident WP3 : Transfer properties of concrete during an accident WP4 : Structural analysis during an accident

Projet 14 – Couplage adsorption/gonflement en milieu poreux peu perméable

Financeur : Communauté de communes Lacq-Orthez

Montant : 46k€

Rôle : Porteur principal

Durée : 2014-2015

Description : Dans les matériaux microporeux (pores de taille inférieure à 2 nanomètres), les interactions fluide/solide et le confinement augmentent considérablement l'adsorption du fluide, sa densité et donc la pression au sein des pores. Cette surpression peut générer une déformation de gonflement du milieu, entrainer une éventuelle fissuration de la structure, ou au contraire une refermeture du réseau de microfissures existantes. L'objectif du projet est de mieux décrire les couplages adsorption/gonflement dans les milieux microporeux qui sont également peu perméables. Pour ces milieux, les intérêts sont immédiats, que l'on cherche à garantir une faible perméabilité comme dans les ouvrages de stockage géologique (stockage de CO₂ par exemple), ou au contraire que l'on cherche à l'augmenter comme dans l'exploitation responsable des ressources non-conventionnelles ou en géothermie profonde.

Le projet vise à estimer la pression dans des pores de milieux micro et/ou mésoporeux, à étudier l'influence de la distribution de tailles de pore sur cette pression de pore et à préciser les couplages locaux, à l'échelle du pore, entre l'adsorption du fluide et le gonflement de la matrice poreuse, ceci afin d'enrichir les modèles poromécaniques globaux permettant de prédire la déformation à l'échelle d'un échantillon de laboratoire.

A.5.3 Collaborations internationales et/ou nationales et insertion dans un réseau international et/ou national

A.5.3.1 Collaborations internationales

Période : 2010 – actuel

Collaborateur : Peter Grassl

Affiliation : School of Engineering, University of Glasgow, United Kingdom

Objet de la collaboration :

La collaboration scientifique porte sur l'étude de l'endommagement et de la rupture de matériaux quasi-fragiles (type béton ou roche) en lien avec leurs propriétés de transport à l'aide d'une approche mésoscopique.

A.5.3.2 Collaborations nationales

Période : 2011 – actuel

Collaborateurs : Ahmed Loukili, Jacqueline Saliba, Jean-Pierre REGOIN

Affiliation : GeM, UMR6183, Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique, école Centrale de Nantes, France.

Objet de la collaboration :

La collaboration scientifique porte sur l'étude de l'endommagement et de la rupture de matériaux quasi-fragiles (type béton ou roche) et notamment sur la localisation des lieux d'endommagement par émissions acoustiques.

A.5.3.3 Insertion dans un réseau international et/ou national

◇ *Associations*

Interpore International Society for Porous Media (→ *web*)

SES Society of Engineering Science (→ *web*)

SEM Society for Experimental Mechanics (→ *web*)

AFA Association Française de l'Adsorption (→ *web*)

Dymat European association for the promotion of research into the dynamic behaviour of materials and its applications (→ *web*)

Ia-Framcos International Association of Fracture Mechanics for Concrete and Concrete Structures (→ *web*)

◇ *Réseaux*

GdR MeGe Groupe de Recherche (3176) "Couplage Multi-Physiques et Multi-échelles en Mécanique Géo-environnementale" (→ *web*)

GdR-IM2UN Groupement de Recherche International "Multi-scale Materials Under the Nanoscope" (→ *web*)

Alert Geomaterials The Alliance of Laboratories in Europe for Research and Technology (→ *web*)

Avenia Pôle de compétitivité "Géosciences pour l'énergie et l'environnement" (→ *web*)

PoroNet Poromechanics Internet Resources Network (→ *web*)

A.5.4 Organisation de manifestations scientifiques et diffusion en direction du public

A.5.4.1 Colloques ou congrès

Intitulé : Journées thématiques du Groupe de Recherche (3176) "Couplage Multi-Physiques et Multi-échelles en Mécanique Géo-environnementale"

Thématique : Poromécanique et géomatériaux : changement d'échelle, modélisations et simulations numériques

Responsabilité : Co-organisateur principal au coté de G. Pijaudier-Cabot et J. Yvonnet

Date : 29-30 janvier 2014

Intitulé : RUGC 2015 (Réunions Universitaires de Génie Civile)

Thématique : Le génie civil : entre terre et mer

Responsabilité : Responsable commission "Programme scientifique"

Date : juin 2015

A.5.4.2 Diffusion des résultats de la recherche en direction du public

Vecteur : Interventions dans la presse écrite et audiovisuelle

Intitulé : Pour ou contre la fracturation hydraulique ?

Media : Audiovisuel

Chaîne : Arte

Emission : X :ENIUS

Diffusion : mardi 02 juillet à 8h30, samedi 16 août à 7h05

Durée : 26 min

A.6 Encadrement et co-encadrement d'étudiants

Thèse 1 : Laura Verdon (née Rojas-Solano)

Sujet : Endommagement non-local, interactions et effets d'échelle

Part d'encadrement : 50%

Distinction : 4ème prix Jeunes Chercheurs René Houpert de l'AUGC.

Résumé : Cette thèse porte sur la description du processus de fissuration du béton soumis à des sollicitations mécaniques. L'objectif principal est d'améliorer la description macroscopique à l'aide d'un modèle continu. Un modèle décrivant de façon cohérente le comportement à la rupture du béton devrait au moins représenter : (i) la transition continu/discret et l'effet d'écran induit par une macrofissure, (ii) la discontinuité du déplacement, (iii) l'interaction entre le processus de fissuration et un bord libre (iv) il doit aussi être capable de reproduire la réponse mécanique obtenue expérimentalement. Dans un premier temps, nous avons fait une analyse comparative entre le modèle d'endommagement non-local classique et différents modèles continus améliorés proposés dans la littérature. Des outils de comparaison ont été proposés pour cette analyse : (i) du point de vue numérique, deux exemples considérant la rupture dynamique d'une barre (barre en traction et test d'écaillage) et (ii) du point de vue expérimental, une base de données issue d'une série d'essais sur des poutres homothétiques entaillées et non-entaillées en flexion trois points. Nous avons conclu que seule une combinaison entre différentes formulations peut rendre compte de tous les mécanismes mis en jeu lors du processus de fissuration. Elle inclue à la fois la façon dont l'information non-locale est transmise, la croissance de défauts et la description des effets de bord. Nous avons mis en évidence que son implémentation 2D ou 3D reste complexe et donc la comparaison avec des données expérimentales s'avère impossible. Dans un deuxième temps, nous avons choisi de changer l'échelle d'analyse pour connaître en détail les mécanismes ayant lieu au sein de la mésostructure du béton (pâte, granulat, interface) à l'aide d'un modèle mésoscopique basé sur des éléments lattice. Cette analyse a permis de conclure que la prise en compte des interactions entre les composants de la mésostructure du béton fournit des résultats numériques plus proches de la réalité que ceux obtenus avec le modèle non-local macroscopique classique. Le mésomodèle est capable de représenter aussi bien la charge maximale (effet d'échelle) que la phase adoucissante pour toutes les tailles de poutre et pour toutes les géométries d'entaille. Nous avons transposé la prise en compte des interactions de l'échelle mésoscopique à l'échelle macroscopique au travers de la fonction poids d'un nouveau modèle non-local. Elle est estimée en décrivant le matériau comme étant un ensemble d'inclusions qui interagissent entre elles lors du chargement. Ces inclusions sont dilatées élastiquement et successivement afin de caractériser le transfert d'information au sein du matériau et de reconstruire la fonction poids du modèle proposé. Ce nouveau modèle est capable de décrire la transition continu/discret et l'effet d'écran, la discontinuité du déplacement et de retrouver un effet de bord cohérent avec les résultats de la micromécanique. Son implémentation en 2D est présentée et les premiers résultats de calculs illustrent la démarche. Finalement, nous revenons sur la modélisation mésoscopique du comportement du béton. Sa richesse en information peut conduire à une compréhension plus fine du processus de fissuration et de la création puis l'évolution de la zone d'élaboration.

Devenir du docteur : Soutenance le 07/12/2012. Actuellement ATER dans l'UMR7359 Géoresources de l'Université de Lorraine.

Thèse 2 : Fadi Khaddour

Sujet : Amélioration de la production de gaz des réservoirs de type TGR

Part d'encadrement : 50%

Résumé :

La valorisation des réservoirs gaziers compacts, dits tight gas reservoirs (TGR), dont les accumulations sont importantes, permettrait d'augmenter significativement les réserves mondiales d'hydrocarbures. Dans l'objectif d'améliorer la production de ces roches, nous avons mené une étude ayant pour but de parvenir à une meilleure compréhension de la relation entre l'endommagement et les propriétés de transport des géomatériaux. L'évolution de la microstructure des éprouvettes qui ont été soumises à des chargements dynamiques rapides est étudiée et une estimation de leurs perméabilités avec l'endommagement sont tout d'abord présentées à l'aide d'un modèle de pores parallèles couplant un écoulement de Poiseuille avec la diffusion de Knudsen. Nous avons ensuite mené des travaux expérimentaux afin d'estimer l'évolution de la perméabilité avec l'endommagement ainsi que l'évolution de la distribution de tailles de pores. Les mesures de perméabilité sont effectuées sur des cylindres en mortier similaire aux roches tight gas à une compression uniaxiale. La caractérisation des microstructures des mortiers endommagés est réalisée par la porosimétrie au mercure. Afin d'estimer l'évolution de la perméabilité avec l'endommagement, un nouveau modèle hiérarchique aléatoire est présenté et les comparaisons avec les données expérimentales ont montré la capacité de ce modèle d'estimer non seulement les perméabilités apparentes et intrinsèques mais aussi leurs évolutions sous l'effet du chargement. Ce modèle, ainsi que le dispositif expérimental employé, ont été étendus afin d'estimer les perméabilités relatives des mélanges gazeux. Le dernier chapitre présente une étude de l'adsorption de méthane dans des différents milieux fracturés par chocs électriques. Les résultats, utiles pour l'estimation des réserves en place, ont montré que la fracturation permet de favoriser l'extraction du gaz initialement adsorbé.

Devenir du docteur : Maître de Conférences, Université Al-Baath, Homs, Syrie.

Thèse 3 : Laurent Perrier

Sujet : Couplage gonflement / adsorption dans les matériaux microporeux

Part d'encadrement : 50%

Résumé :

De nombreux domaines d'activités liés à la géomécanique (stockage de CO₂, industrie pétrolière, stockage et suivi de déchets industriels et nucléaires, traitement des eaux) nécessitent une meilleure appréhension du lien entre chargement mécanique, endommagement, distribution de taille de pores et perméabilité. La thèse s'intègre dans le projet CEPAGE (Couplages Endommagement - Perméabilité dans les géomatériaux) de la région Aquitaine qui vise à mieux comprendre les couplages entre endommagement, fissuration, déformations et écoulements au sein de géomatériaux poreux en vue : 1) d'optimiser la production et le taux de récupération des énergies fossiles ; 2) d'optimiser les capacités de stockages de CO₂ en milieu poreux. Le projet CEPAGE s'articule autour de deux thèmes majeurs dans une démarche scientifique mettant en jeu à la fois modélisation, études expérimentales et simulations numériques. Dans un milieu poreux, on distingue deux types de porosité : 1) les microfissures et les macropores, de taille allant du micromètre à la centaine de nanomètres et qui assurent la perméabilité de la roche ; 2) les micropores, de taille nanométrique et dans lesquels le confinement des molécules de gaz peut entraîner un gonflement de la roche. Le premier thème dans lequel s'insère la thèse, vise à préciser, dans les milieux macroporeux, les couplages entre endommagement et perméabilité d'une part et entre perméabilité et forme du chargement imposé d'autre part. Le deuxième thème vise à préciser, dans les milieux microporeux, les liens entre gonflement, quantités adsorbées et chaleurs d'adsorption. La thèse s'insère dans ce deuxième thème.

Devenir du docteur : Soutenance prévue septembre 2015.

Thèse 4 : Vincent Lefort

Sujet : Fracturation et Perméabilité des Milieux Hétérogènes Quasi-Fragiles

Part d'encadrement : 50%

Résumé :

La dégradation des matériaux quasi-fragiles se traduit par l'apparition de micro-fissures qui interagissent, évoluent et coalescent à l'intérieur de la zone d'élaboration (FPZ) pour former une macro-fissure. L'interaction de la FPZ avec les bords de la structure est à l'origine des phénomènes typiques d'effets d'échelle, de bord ou d'écran. Or ces phénomènes mettent en défaut les modèles macroscopiques actuels. Il est donc nécessaire de mieux décrire l'évolution de la FPZ pour prédire la rupture des matériaux quasi-fragiles dans une structure réelle. Les modèles mésoscopiques présentent l'avantage de considérer les détails de la mésostructure et permettent donc de décrire le processus de rupture à l'échelle des hétérogénéités. Un modèle mésoscopique de type lattice 2D est ici adopté. La mésostructure du béton y est idéalisée comme un ensemble de granulats dans une matrice de mortier. Seuls les granulats les plus gros sont considérés explicitement. Les autres granulats sont décrits par l'intermédiaire d'un champ aléatoire auto-corrélé. Le modèle mésoscopique est tout d'abord validé en reproduisant des résultats expérimentaux réalisés sur des poutres de béton en flexion trois points de tailles différentes, entaillées et non-entaillées. Il est montré que le modèle permet de prédire la résistance au pic mais aussi de reproduire les phases adoucissantes. Des histogrammes de distances relatives entre points endommagés sont ensuite construits afin d'étudier la corrélation entre évènements successifs. Cette analyse met en évidence des corrélations importantes mais également un fort effet du gradient de déformation en flexion. Pour s'affranchir de cet effet de gradient, le modèle est utilisé en traction simple. Les fonctions de Ripley permettent d'analyser la distribution spatiale des points endommagés au cours de l'essai. Il est montré que cette distribution est initialement pilotée par la structure granulaire, puis qu'elle se propage aléatoirement dans tout l'échantillon avant de se localiser pour former les macro-fissures. Dans le cas d'un fluide simple, il est possible de coupler cette approche mésoscopique mécanique à un modèle hydraulique permettant de déterminer les transferts de masse à l'intérieur du réseau de fissures et de joints. Une voie consiste à construire à partir du champ de microfissuration un champ de perméabilité anisotrope et à l'intégrer dans une approche continue basée sur une loi de Darcy. Cette approche permet de considérer les évolutions de perméabilité dans le matériau rocheux qui est entre les macrofissures et donc d'évaluer l'impact de la fracturation d'une façon plus directe. Le prix à payer est la construction d'un modèle continu dual du modèle mésoscopique et donc de coupler les modèles de calcul (mécaniques et hydrauliques). Une fois ce couplage réalisé, il faudra évaluer l'effet du fluide sur les phases solides (distributions de pressions dans les joints/fissures). Ce couplage sera effectué à l'aide d'un schéma pas à pas « staggered ». A chaque pas de temps, les calculs mécaniques et hydrauliques seront conduits successivement, sans interactions, les interactions étant remises à jour pour le pas suivant.

Devenir du docteur : Soutenance prévue septembre 2015.

A.7 Participation éventuelle à des tâches administratives, à des activités d'enseignement, ou expérience en entreprise

A.7.1 Tâches administratives

2013 – actuel

Membre élu du Conseil de l'ISABTP, UPPA, France.

Accompagnateur d'élèves ingénieurs lors de leur projet solidaire de fin d'étude, ISABTP, UPPA, France.

2012 – actuel

Membre du Conseil du Pôle Calcul Scientifique et Traitement des Données, UPPA, France.

2011 – actuel

Membre élu du Conseil de la fédération de recherche IPRA, FR2952, UPPA, France.

2010 – actuel

Directeur des études 2ème année, ISABTP, UPPA, France.

A.7.2 Activités d'enseignement

Intitulé : Mécanique des Roches

Niveau : Master 1 Génie Pétrolier

Nombre d'heures annuel : 2013-2014 : 18,75 HeqTD (Cours/TD), 2012-2013 : 18,75 HeqTD (Cours/TD)

établissement : Institut Pluridisciplinaire de Recherche Appliquée dans le domaine du génie pétrolier (IPRA, FR2952), Université de Pau et des Pays de l'Adour (UPPA).

Intitulé : Initiation à la Mécanique des Milieux Continus

Niveau : Licence 3 Physique-Chimie

Nombre d'heures annuel : 2013-2014 : 22,5 HeqTD (Cours/TD), 2012-2013 : 22,5 HeqTD (Cours/TD)

établissement : UFR Sciences & Techniques Côte Basque, Université de Pau et des Pays de l'Adour (UPPA).

Intitulé : Mécanique des Milieux Continus

Niveau : ISABTP 3ème année

Nombre d'heures annuel : 2013-2014 : 22,5 HeqTD (Cours), 2012-2013 : 30,75 HeqTD (Cours/TD), 2011-2012 : 37,5 HeqTD (Cours/TD)

établissement : Institut Supérieur Aquitain du Bâtiment et des Travaux Publics (ISABTP), Université de Pau et des Pays de l'Adour (UPPA).

Intitulé : Résistance des Matériaux

Niveau : ISABTP 2ème année

Nombre d'heures annuel : 2013-2014 : 29,25 HeqTD (Cours), 2012-2013 : 30,75 HeqTD (Cours), 2011-2012 : 48,75 HeqTD (Cours/TD),

établissement : Institut Supérieur Aquitain du Bâtiment et des Travaux Publics (ISABTP), Université de Pau et des Pays de l'Adour (UPPA).

Intitulé : Initiation à la recherche

Niveau : ISABTP 3ème année

Nombre d'heures annuel : 2011-2012 : 3 HeqTD (Projet),

établissement : Institut Supérieur Aquitain du Bâtiment et des Travaux Publics (ISABTP), Université de Pau et des Pays de l'Adour (UPPA).

A.8 Liste des publications

A.8.1 Revues internationales à comité de lecture

2014

1. Fadi Khaddour, **David Grégoire**, Gilles Pijaudier-Cabot. Capillary bundle model for the computation of the apparent permeability from pore size distributions. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, 2014 (→ web).
2. Laurent Perrier, **David Grégoire**, Frédéric Plantier, Gilles Pijaudier-Cabot. Experimental and modeling investigations of adsorption-induced swelling and damage in microporous materials. *Procedia materials science*, 2014, 3, pp. 1263-1268 (→ web).
3. **David Grégoire**, Laura Rojas-Solano, Vincent Lefort, Peter Grassl, Gilles Pijaudier-Cabot. Size and boundary effects during failure in quasi-brittle materials : experimental and numerical investigations. *Procedia materials science*, 2014, 3, pp. 1269-1278 (→ web).
4. Laurent Perrier, Gilles Pijaudier-Cabot, **David Grégoire**. Poromechanics of adsorption-induced swelling in microporous materials : a new poromechanical model taking into account strain effects on adsorption. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 2014 (→ web).

2013

5. Laura Rojas-Solano, **David Grégoire**, Gilles Pijaudier-Cabot. Interaction-based non-local damage model for failure in quasi-brittle materials. *Mechanics Research Communications*, 2013 (→ web).
6. **David Grégoire**, Laura Rojas-Solano, Gilles Pijaudier-Cabot. Failure and size effect for notched and unnotched concrete beams. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 2013 (→ web).

2012

7. Horacio D. Espinosa, **David Grégoire**, Felix Latourte, Owen Y. Loh. Identification of deformation mechanism in abalone shells through AFM and digital image correlation. *Procedia IUTAM*, 2012, 4, pp. 27-39 (→ web).

8. Peter Grassl, **David Grégoire**, Laura Rojas-Solano, Gilles Pijaudier-Cabot. Meso-scale modeling of the size effect on the fracture process zone of concrete. *International Journal of Solids and Structures*, 2012, 49 (13), pp. 1818-1827 (\rightarrow *web*).
9. **David Grégoire**, Laura Rojas-Solano, Gilles Pijaudier-Cabot. Continuum to discontinuum transition during failure in non-local damage models. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 2012, 10 (6), pp. 136 (\rightarrow *web*).

2011

10. Felix Latourte, **David Grégoire**, Dan Zenkert, Xiaoding Wei, Horacio D. Espinosa. Failure Mechanisms in Composite Panels Subjected to Underwater Impulsive Loads. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2011, 59 (8), pp. 1623-1646 (\rightarrow *web*).
11. **David Grégoire**, Owen Y. Loh, Allison L. Juster, Horacio D. Espinosa. In-situ AFM Experiments with Discontinuous DIC Applied to Damage Identification in Biomaterials. *Experimental Mechanics*, 2011, 51 (4), pp. 591-607 (\rightarrow *web*).
12. Horacio D. Espinosa, Allison L. Juster, Felix Latourte, Owen Y. Loh, **David Grégoire**, Pablo D. Zavattieri. Tablet-level origin of toughening in abalone shells and translation to synthetic composite materials. *Nature Communications*, 2011, 2 (173), pp. 173 (\rightarrow *web*).
13. D. Haboussa, **David Grégoire**, Thomas Elguedj, Hubert Maigre, Alain Combescure. X-FEM analysis of the effects of holes or other cracks on dynamic crack propagations. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 2011, 86, pp. 618-636 (\rightarrow *web*).

2009

14. **David Grégoire**, Hubert Maigre, Fabrice Morestin. New experimental techniques for dynamic crack localization. *European Journal of Computational Mechanics*, 2009, 18 (3-4), pp. 255-283 (\rightarrow *web*).
15. **David Grégoire**, Hubert Maigre, Alain Combescure. New experimental and numerical techniques to study the arrest and the restart of a crack under impact in transparent materials. *International Journal of Solids and Structures*, 2009, 46 (181), p. 3480-3491 (\rightarrow *web*).

2008

16. Alain Combescure, Anthony Gravouil, **David Grégoire**, Julien Réthoré. X-FEM a good candidate for energy conservation in simulation of brittle dynamic crack propagation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2008, pp. 309-318 (\rightarrow *web*).
17. **David Grégoire**, Hubert Maigre, Alain Combescure. On the growth, the arrest and the restart of a crack during a dynamic brittle fracture experiment. *Key Engineering Materials*, 2008, pp. 245-248 (\rightarrow *web*).

2007

18. **David Grégoire**, Hubert Maigre, Julien Réthoré, Alain Combescure. Dynamic crack propagation under mixed-mode loading – Comparison between experiments and X-FEM simulations. *International Journal of Solids and Structures*, 2007, pp. 6517-6534 (\rightarrow *web*).
19. Alain Combescure, Anthony Gravouil, Hubert Maigre, Julien Réthoré, **David Grégoire**. 2D X-FEM simulation of dynamic brittle crack propagation. *IUTAM Bookseries - Symposium on Discretization Methods for Evolving Discontinuities*, 2007, pp. 185-198 (\rightarrow *web*).

A.8.2 Chapitres d'ouvrages scientifiques

2013

1. Fadi Khaddour, **David Grégoire**, Gilles Pijaudier-Cabot. Upscaling permeation properties in porous materials from pore size distributions. Gilles Pijaudier-Cabot, Jean-Michel Pereira. Geomechanical Issues in CO2 Storage Facilities, Wiley-ISTE, pp. 43-56, Feb. 2013, 978-1-84821-416-3 (\rightarrow *web*).

2012

2. **David Grégoire**, Peter Grassl, Laura Rojas-Solano, Gilles Pijaudier-Cabot. Macro and meso scales models to predict concrete failure and size effects. Gilles Pijaudier-Cabot, Frédéric Dufour. Damage Mechanics of Cementitious Materials and Structures, Wiley-ISTE, pp. 121-153, Jan. 2012, 978-1-84821-340-1

A.9 Liste des communications

A.9.1 Conférences invitées

*Orateur

2012

1. Gilles Pijaudier-Cabot*, **David Grégoire**, Fadi Khaddour, Romain Vermorel. Damage and permeability in porous quasi-brittle materials. CECAM_GdR-i Meeting : Aging of Engineering Materials : a Computational Approach to Durability and Sustainability, Feb 2012, Zurich, Switzerland.

2011

2. **David Grégoire***, Laura Rojas-Solano, Fadi Khaddour, Gilles Pijaudier-Cabot. Coupling between damage and permeability in porous geomaterials in the context of CO2 storage and petroleum engineering. 48th Annual Technical Conference of Society of Engineering Sciences (SES2011), invited to the Symposium "Mechanics of Materials across Multiple Length Scales" in honor of Pr. Horacio Espinosa's research group, Oct 2011, Evanston, United States.
3. Gilles Pijaudier-Cabot*, Laura Rojas-Solano, **David Grégoire**. Continuum to discrete transition in non local damage models. International Conference on Computational Plasticity Fundamentals and Applications (COMPLAS 2011), Sep 2011, Barcelona, Spain.

2010

4. Gilles Pijaudier-Cabot*, Laura Rojas-Solano, **David Grégoire**. Endommagement, effets d'échelle, fissuration et perméabilité des matériaux quasi-fragiles. Matériaux 2010, Oct 2010, Nantes, France.
5. Gilles Pijaudier-Cabot*, **David Grégoire**, Laura Rojas-Solano. Evolving boundary effects in non local damage models : continuum to discrete transition. IV European Conference on Computational Mechanics, May 2010, Paris, France.

A.9.2 Communications avec actes et sélection sur résumé

*Orateur

2014

6. Gilles Pijaudier-Cabot*, Laurent Perrier, **David Grégoire**. Enhanced poromechanics for the modeling of swelling in microporous materials : Coupled effects, size effects and upscaling issues. 11th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XI), Jul 2014, Barcelona, Spain.
7. **David Grégoire***, Vincent Lefort, Gilles Pijaudier-Cabot. Fracture process zone evolution in the course of failure in quasi-brittle materials : Numerical investigations and experimental validations at the mesoscale. 11th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XI), Jul 2014, Barcelona, Spain.
8. Laurent Perrier*, **David Grégoire**, Frédéric Plantier, Gilles Pijaudier-Cabot. Experimental and modeling investigations of adsorption-induced swelling and damage in microporous materials. The 20th European Conference on Fracture, Jun 2014, Trondheim, Norway.
9. **David Grégoire***, Laura Rojas-Solano, Vincent Lefort, Peter Grassl, Gilles Pijaudier-Cabot. Size and boundary effects during failure in quasi-brittle materials : experimental and numerical investigations. The 20th European Conference on Fracture, Jun 2014, Trondheim, Norway.
10. Vincent Lefort*, **David Grégoire**, Peter Grassl, Gilles Pijaudier-Cabot. Experimental and numerical analyses of characteristic lengths in the failure of quasi-brittle materials. 48th US Rock Mechanics Geomechanics Symposium, Jun 2014, Minneapolis, United States.
11. Laurent Perrier*, **David Grégoire**, Frédéric Plantier, Gilles Pijaudier-Cabot. Coupling between adsorption and swelling in microporous materials : in-situ full-field measurements and poromechanical modeling. The 6th International Conference on Porous Media and Annual Meeting of the International Society of Porous Media, May 2014, Milwaukee, United States.
12. Laurent Perrier, **David Grégoire***, Frédéric Plantier, Gilles Pijaudier-Cabot. Swelling of coals due to CO₂/ CH₄ adsorption : experimental and modeling investigations. 10th Euroconference on Rock Physics and Rock Mechanics, May 2014, Aussois, France.
13. Fadi Khaddour, **David Grégoire***, Gilles Pijaudier-Cabot. A new model to predict intrinsic and apparent permeabilities from pore size distribution in porous materials. 10th Euroconference on Rock Physics and Rock Mechanics, May 2014, Aussois, France.
14. Fadi Khaddour*, **David Grégoire**, Gilles Pijaudier-Cabot. Computing permeation properties of mortar from pore size distributions. Nenad Bicanic, Herbert Mang, Gunther Meschke, René de Borst. EURO-C conference 2014, Mar 2014, St. Anton am Alberg, Austria. CRC Press, Computational Modelling of Concrete Structures, pp. 1120
15. Vincent Lefort, Gilles Pijaudier-Cabot*, **David Grégoire**, Peter Grassl. Correlations in the mesoscale modelling of fracture of quasi-brittle materials—extracting internal lengths. Nenad Bicanic, Herbert Mang, Gunther Meschke, René de Borst. EURO-C conference 2014, Mar 2014, St. Anton am Alberg, Austria. CRC Press, Computational Modelling of Concrete Structures, pp. 1120
16. Laurent Perrier*, **David Grégoire**, Frédéric Plantier, Gilles Pijaudier-Cabot. Couplage adsorption/gonflement en milieu microporeux : nouvelle technique expérimentale et modèle poromécanique associé. 3ème journées de l'Association Française de l'Adsorption, Feb 2014, Paris, France. Recueil de résumés des présentations orales, pp. 11

2013

17. Laura B. Rojas-Solano*, **David Grégoire**, Gilles Pijaudier-Cabot. Endommagement non-local, interactions et effets d'échelle. 21ème Congrès Français de Mécanique (CFM2013), Aug 2013, Bordeaux, France. Actes du XXIème Congrès Français de Mécanique, pp. à venir.
18. Vincent Lefort*, **David Grégoire**, Laura B. Rojas-Solano, Peter Grassl, Gilles Pijaudier-Cabot. Analyse spatiale du processus de localisation à l'aide des fonctions de Ripley. 21ème Congrès Français de Mécanique (CFM2013), Aug 2013, Bordeaux, France. Actes du XXIème Congrès Français de Mécanique, pp. à venir.
19. Fadi Khaddour*, **David Grégoire**, Bertrand Guatarbes, Gilles Pijaudier-Cabot. Upscaling permeation properties in porous materials from pore size distributions. 5th Biot Conference on Poromechanics (Biot 5), Jul 2013, Vienne, Austria. Poromechanics V : Proceedings of the Fifth Biot Conference on Poromechanics, pp. 2316-2324. → *web*).
20. Gilles Pijaudier-Cabot*, **David Grégoire**, Romain Vermorel, Laurent Perrier. Poromechanics of swelling in nanoporous materials : motivations and introduction of strain effects on adsorption. 5th Biot Conference on Poromechanics (Biot 5), Jul 2013, Vienne, Austria. Poromechanics V : Proceedings of the Fifth Biot Conference on Poromechanics, pp. 729-738. → *web*).
21. Laura B. Rojas-Solano*, **David Grégoire**, Gilles Pijaudier-Cabot. Analysis of mesoscopic information to understand the macroscopic mechanical behaviour during failure in quasi-brittle Materials. XVI French-Polish Colloquium of Soil and Rock Mechanics (CFP 2013), Jul 2013, Montpellier, France. Proceedings of the XVI French-Polish Colloquium of Soil and Rock Mechanics, pp. cdrom.
22. Laura B. Rojas-Solano, **David Grégoire***, Gilles Pijaudier-Cabot. A new macroscopic model based on non-local interactions to predict damage and failure in quasibrittle materials. 13th International Conference on Fracture (ICF13), Jun 2013, Beijing, China. Proceedings of the 13th International Conference on Fracture, pp. cdrom.
23. Laura B. Rojas-Solano, Peter Grassl, **David Grégoire***, Gilles Pijaudier-Cabot. Towards a better understanding of the FPZ evolution during fracture and damage in quasi-brittle materials using mesomodels. 13th International Conference on Fracture (ICF13), Jun 2013, Beijing, China. Proceedings of the 13th International Conference on Fracture, pp. cdrom.
24. **David Grégoire***, Laura B. Rojas-Solano, Gilles Pijaudier-Cabot. Upscaling non-local interactions during damage and failure in quasi-brittle materials. The Third International Conference on Computational Modeling of Fracture and Failure of Materials and Structures (CFRAC 2013), Jun 2013, Prague, Czech Republic. Proceedings of the Third International Conference on Computational Modeling of Fracture and Failure of Materials and Structures, pp. 211.
25. Vincent Lefort, Laura B. Rojas-Solano, **David Grégoire***, Peter Grassl, Gilles Pijaudier-Cabot. Correlations Involved in the Failure of Quasi-Brittle Materials : Analysis with a Meso-Scale Model. The Third International Conference on Computational Modeling of Fracture and Failure of Materials and Structures (CFRAC 2013), Jun 2013, Prague, Czech Republic. Proceedings of the Third International Conference on Computational Modeling of Fracture and Failure of Materials and Structures, pp. 69.
26. Laura B. Rojas-Solano, **David Grégoire***, Gilles Pijaudier-Cabot. Un nouveau modèle macroscopique basé sur les interactions non-locales à l'échelle mésoscopique pour prédire l'endommagement et la rupture des matériaux quasi-fragiles. 11e Colloque National en Calcul des Structures (CSMA 2013), May 2013, Giens, France. Actes CSMA 2013, pp. à venir.

27. **David Grégoire***, Laura B. Rojas-Solano, Gilles Pijaudier-Cabot. A new interaction-based non local model to predict damage and failure in quasi-brittle materials. VIII International Conference on Fracture Mechanics of Concrete and Concrete Structures (FraMCoS-8), Mar 2013, Toledo, Spain. Proceedings of the VIII International Conference on Fracture Mechanics of Concrete and Concrete Structures, pp. cdrom.

2012

28. Fadi Khaddour*, **David Grégoire**, Gilles Pijaudier-Cabot. Perméabilité d'un milieu poreux : Modèle simplifié basé sur la distribution de tailles de pores. Transfert 2012, Mar 2012, Lille, France. Actes Transfert 2012, pp. cdrom.

2011

29. **David Grégoire***, Horacio D. Espinosa, Hubert Maigre, Alain Combescure, Jacky Fabis. Identification de mécanismes de rupture et d'endommagement à l'aide d'un outil basé sur la corrélation d'images numériques. Mesures et Techniques Optiques pour l'Industrie – Congrès CMOI 2011, Nov 2011, Lille, France. Actes CMOI 2011, pp. cdrom.
30. Laura Rojas-Solano*, **David Grégoire**, Gilles Pijaudier-Cabot. New approach to model non-local interactions during failure in quasi-brittle materials. International Conference on Recent Advances in Nonlinear Models (CORAN2011), Nov 2011, Coimbra, Portugal. Proceedings CORAN2011, pp. 441-452.
31. Laura Rojas-Solano*, **David Grégoire**, Peter Grassl, Gilles Pijaudier-Cabot. Macro and Meso scales models to predict concrete failure and size effect. International Conference on Computational Modeling of Fracture and Failure of Materials and Structures (CFRAC2011), Jun 2011, Barcelona, Spain. Proceedings of CFRAC2011, pp. 51.
32. Peter Grassl*, **David Grégoire**, Laura Rojas-Solano, Gilles Pijaudier-Cabot. Mesoscale modeling of the size effect on the fracture process zone of concrete. International Conference on Computational Modeling of Fracture and Failure of Materials and Structures (CFRAC2011), Jun 2011, Barcelona, Spain. Proceedings of CFRAC2011, pp. 292.
33. Laura Rojas-Solano*, Peter Grassl, **David Grégoire**, Gilles Pijaudier-Cabot. Macro and Meso scales models to predict concrete failure and size effect. the 19th UK Conference of the Association for Computational Mechanics in Engineering, Apr 2011, Edinburgh, United Kingdom. Proceedings of the 19th UK Conference of the Association for Computational Mechanics in Engineering, pp. 85-89.
34. Peter Grassl*, **David Grégoire**, Laura B. Rojas-Solano, Gilles Pijaudier-Cabot. Modelling the size effect on the fracture process zone of concrete. the 20th UK Conference of the Association for Computational Mechanics in Engineering, Mar 2012, Manchester, United Kingdom. Proceedings of the 20th UK Conference of the Association for Computational Mechanics in Engineering, pp. 171-174, 2011.
35. Felix Latourte*, **David Grégoire**, Horacio D. Espinosa. Experimental Characterization of Composite Structures Subjected to Underwater Impulsive Loadings. 2010 SEM Annual Conference (SEM2010), Jun 2010, Indianapolis, United States. Dynamic Behavior of Materials, Volume 1 Conference Proceedings of the Society for Experimental Mechanics Series 2011, pp. 239-240, 2011 (→ *web*).
36. **David Grégoire***, Horacio D. Espinosa, Hubert Maigre, Alain Combescure, Jacky Fabis. Identification de mécanismes de rupture et d'endommagement à l'aide d'un outil basé sur la corrélation d'images numériques. Mesures et Techniques Optiques pour l'Industrie – Congrès CMOI 2011, Nov 2011, Lille, France. Actes CMOI 2011, pp. cdrom.

37. **David Grégoire***, Julien Réthoré, Hubert Maigre, Alain Combescure, Jacky Fabis. Corrélation d'images numériques avec une caméra ultrarapide. Mesures et Techniques Optiques pour l'Industrie – Congrès CMOI 2011, Nov 2011, Lille, France. Actes CMOI 2011, pp. cdrom.

2010

38. **David Grégoire***, Laura Rojas-Solano, Gilles Pijaudier-Cabot. Continuum to discrete transition in non local damage models. 9th HSTAM International Congress on Mechanics, Jul 2010, Limassol, Cyprus. Proceedings of the 9th HSTAM International Congress on Mechanics, pp. cdrom.

2009

39. Felix Latourte, **David Grégoire**, Horacio D. Espinosa*. Performance of composite panels subjected to impulsive loading. 17th International Conference on Composite Materials (ICCM17), Jul 2009, Edinburgh, United Kingdom. Proceedings of ICCM17, pp. F10 :3.
40. Thomas Elguedj*, Anthony Gravouil, Hubert Maigre, **David Grégoire**. An Explicit Dynamics eXtended Finite Element Method With Standard Critical Time Step. 2009 ASME International Mechanical Engineering Congress & Exposition, Nov 2009, Lake Buena Vista, United States. Proceedings of the Asme International Mechanical Engineering Congress and Exposition 2009, pp. cdrom.
41. **David Grégoire***, Hubert Maigre, Rafael Estevez, Alain Combescure. Micro-macro analysis of the notch tip radius and loading rate dependences of the dynamic crack initiation toughness during a high transient dynamic crack growth experiment. 12th International Conference on Fracture (ICF12), Jul 2009, Ottawa, Canada. Proceedings of the 12th International Conference on Fracture, pp. cdrom.
42. Alain Combescure*, Julien Réthoré, Hubert Maigre, **David Grégoire**. XFEM a good tool for simulation of Dynamic crack propagation. T P Fries. XFEM 2009, Sep 2009, Aachen, Germany. ECCOMASS, XFEM 2009, pp. cdrom.

2008

43. **David Grégoire***, Hubert Maigre, Alain Combescure. On the growth, the arrest and the restart of a crack during a dynamic brittle fracture experiment. Fracture and Damage Mechanic (FDM7), Sep 2008, Seoul, Korea, Republic Of. Proceedings of Fracture and Damage Mechanic (FDM7), pp. 385-387.
44. Julien Réthoré*, **David Grégoire**, Hubert Maigre, Fabrice Morestin. A space-time correlation algorithm for digital high-speed camera images. Photomechanics 2008, Jul 2008, United Kingdom.
45. **David Grégoire***, Julien Réthoré, Hubert Maigre, Alain Combescure. A numerical experimental study of dynamic propagation of two cracks in a brittle material. WCCM8 Ecomas 2008, Jun 2008, Italy.

2007

46. Alain Combescure*, Anthony Gravouil, Hubert Maigre, Julien Réthoré, **David Grégoire**. 2D X-FEM simulation of dynamic brittle crack propagation. IUTAM Symposium on Discretization Methods for Evolving Discontinuities, Sep 2007, France.
47. **David Grégoire***, Hubert Maigre, Alain Combescure. An X-FEM Simulation Tool for Interpreting Dynamic Crack Propagation Experiments Under Mixed Loading. 9th US Congress on Computational Mechanics (USNCCM9), Jul 2007, United States.
48. **David Grégoire***, Hubert Maigre, Alain Combescure. Analysis of a dynamic crack growth experiment under mixed loading with an X-FEM simulation tool. International Conference on Computational Fracture and Failure of Materials and Structures, CFRAC 2007 (ECCOMAS), Jun 2007, France.

49. **David Grégoire***, Hubert Maigre, Alain Combescure. Simulation de la propagation dynamique de fissure sous chargement mixte et comparaisons expérimentales. 8ème Colloque National en Calcul des Structures, May 2007, France.

2006

50. **David Grégoire***, Hubert Maigre, Alain Combescure. Expériences et simulations de propagation dynamique de fissure sous chargement mixte dans du PMMA. Matériaux 2006, Nov 2006, France.
51. **David Grégoire***, Hubert Maigre, Julien Réthoré. Simulations of dynamic propagation crack experiments under combined mode loading. The 16th European Conference of Fracture, Jul 2006, Greece.

A.9.3 Communications sans actes avec sélection sur résumé

*Orateur

2014

52. **David Grégoire***, Vincent Lefort, Gilles Pijaudier-Cabot. Étude de la formation et de l'évolution d'une zone d'élaboration (FPZ) à la méso-échelle : apport des outils d'écologie spatiale et comparaisons numérique/expérimental.. Réunion bilan annuelle du GdR Mege, Jun 2014, La Rochelle, France.
53. Gilles Pijaudier-Cabot*, Fadi Khaddour, Lionel Ecay, **David Grégoire**. Estimation directe à partir d'une mesure de PSD des perméabilités intrinsèque et apparente en milieu peu perméable : influence de l'endommagement, extension aux mélanges de gaz et étude de la séparation.. Réunion bilan annuelle du GdR Mege, Jun 2014, La Rochelle, France.
54. Laurent Perrier, Gilles Pijaudier-Cabot*, **David Grégoire**. Enhanced poromechanics for the modeling of swelling in microporous materials : Coupled effects, size effects and upscaling issues. GdR Mege Atelier thématique "Poromécanique et géomatériaux : changement d'échelle, modélisations et simulations numériques", Jan 2014, Anglet, France.

2013

55. Vincent Lefort, Gilles Pijaudier-Cabot*, **David Grégoire**, Peter Grassl, Laura B. Rojas-Solano. Correlations in the Failure of Quasi-Brittle Materials Modelled at the Mesoscale. 2013 Conference of the ASCE Engineering Mechanics Institute, Aug 2013, Evanston, United States.

2011

56. Arnaud De Vaucorbeil*, Felix Latourte, **David Grégoire**, Dan Zenkert, Horacio D. Espinosa. Fluid Structure Experiments to Investigate Composite Structural Elements Subjected to Underwater Impulsive Loads. 48th Annual Technical Conference of Society of Engineering Sciences (SES2011), Oct 2011, Evanston, United States.
57. Phuong Tran*, Xiaoding Wei, Ravi Bellur, Felix Latourte, **David Grégoire**, Horacio D. Espinosa. Numerical simulation of composite panels subjected to underwater impulsive loads. 48th Annual Technical Conference of Society of Engineering Sciences (SES2011), Oct 2011, Evanston, United States.
58. Fadi Khaddour*, **David Grégoire**, Gilles Pijaudier-Cabot. Some attempts to upscale mass transfer properties from pore size distributions in porous materials. Alert Geomaterials 2011 meeting, Oct 2011, Aussois, France.

59. Romain Vermorel*, Gilles Pijaudier-Cabot, Christelle Miqueu, Bruno Mendiboure, **David Grégoire**. Poromechanics of microporous solids - thermodynamics based modelling. Alert Geomaterials 2011 meeting, Oct 2011, Aussois, France.
60. Laura Rojas-Solano*, Peter Grassl, **David Grégoire**, Gilles Pijaudier-Cabot. Macro and meso scales models to predict concrete failure and size effect. Alert Geomaterials 2011 meeting, Oct 2011, Aussois, France.

2008

61. **David Grégoire***, Hubert Maigre, Alain Combescure. Validation de critères de rupture dynamique fragile. Liens entre expériences et simulations numériques. Mecadymat08, Apr 2008, Lorient, France.
62. Julien Réthoré*, **David Grégoire**, Hubert Maigre, Alain Combescure. Corrélation d'images numériques avec une caméra ultra-rapide. Mecadymat08, Apr 2008, Lorient, France.

2007

63. O. Caty, Marylise Cottet, **David Grégoire***, R. Marion, F. Richard-Schott, H. Tronchere. Le fleuve Rhône, un réservoir d'énergie renouvelable ? Festival International de Géographie, Oct 2007, France.
64. **David Grégoire***, Hubert Maigre, Alain Combescure. Expériences et simulations de propagation dynamique de fissure sous chargement mixte dans du PMMA. 1er séminaire du cluster recherche MACODEV (Matériaux et Conception pour un développement durable), Feb 2007, France.
65. **David Grégoire***, Hubert Maigre, Fabrice Morestin, Alain Combescure. Estimation précise des facteurs d'intensité des contraintes par corrélation d'images numériques pour la recherche de critères de rupture fragile en dynamique. 4ème Séminaire LaMCoS, Jan 2007, France.

2006

66. **David Grégoire***, Hubert Maigre, Alain Combescure. Simulations of dynamic crack propagation experiments under combined mode loading. IUTAM Symposium on Discretization Methods for Evolving Discontinuities, Sep 2006, France.

2005

67. Julien Réthoré*, **David Grégoire**, Hubert Maigre. Expériences et simulations d'une propagation dynamique de fissure sous chargement mixte dans du PMMA. MECAMAT 2005, Jan 2005, France.

