



Contributions au calcul analytique et numérique des propriétés homogénéisées des composites et des milieux poreux périodiques

Viet Thanh To

► **To cite this version:**

Viet Thanh To. Contributions au calcul analytique et numérique des propriétés homogénéisées des composites et des milieux poreux périodiques. Autre. Université Paris-Est, 2015. Français. <NNT : 2015PESC1069>. <tel-01223863>

HAL Id: tel-01223863

<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01223863>

Submitted on 3 Nov 2015

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

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

Université Paris-Est Marne la Vallée
Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle (UMR CNRS 8208)

THESE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PARIS-EST MARNE-LA-VALLÉE

Discipline : Mécanique

présentée et soutenue publiquement par

Viet Thanh To

Soutenu le 29 mai 2015

Contributions au calcul analytique et numérique des propriétés homogénéisées des composites et des milieux poreux périodiques

JURY

D. KONDO	Professeur, Univ. Pierre et Marie Curie, Paris VI	Rapporteur
C. GEINDREAU	Professeur, Univ. Joseph Fourier	Rapporteur
R. BRENNER	Chargé de recherche, Univ. Pierre et Marie Curie, Paris VI	Examineur
S. FOREST	Directeur de Recherche, École des mines de Paris	Examineur
P. CARTRAUD	Professeur, École Centrales de Nantes	Examineur
G. BONNET	Professeur Émérite, Univ. Paris-Est Marne-la-Vallée	Invité
V. MONCHIET	Maître de conférence, Univ. Paris-Est Marne-la-Vallée	Directeur de thèse
Q-D. TO	Maître de conférence, Univ. Paris-Est Marne-la-Vallée	Co-Directeur de thèse

Mis en page avec la classe thloria.

Remerciements

Je tiens à remercier tous les membres du jury d'avoir accepté de juger ce travail.

Je voudrais maintenant remercier trois personnes pour qui j'ai une très grande estime :

Je remercie Vincent MONCHIET, HDR de l'Université Paris-est, et directeur de cette thèse pour sa confiance et ses encouragements au cours de ces années. Et surtout, j'admire ta grande connaissance scientifique.

Tout d'abord mon Co-Directeur de thèse, Quy Dong TO, HDR de l'Université Paris-est, sans lequel je n'aurais jamais fait ce travail de thèse. Merci pour ta gentillesse durant toutes ces années, ta patience et ta grande pédagogie. Merci pour tes encouragements et les discussions scientifiques.

Je voudrais, ici, associer le Professeur Guy BONNET, de m'avoir accueillie au sein de son équipe et du laboratoire de Modélisation et Simulation Multi Echelle (MSME) de l'Université Paris-est. Merci d'avoir accepté de me diriger au début de cette thèse. Merci pour ton humanité et tout ce que tu m'as appris.

Je voudrais également le programme 322 du Ministère vietnamien de l'éducation et de la formation pour votre financement pendant 45 mois.

Merci à tous les thésards du laboratoire MSME passés et présents pour leur bonne humeur, leur sympathie et les bonnes discussions pas toujours très sérieuses. Merci aussi à tous les étudiant(e)s Vietnamiens à Marne La Vallée pour leur gentillesse et leur aide.

Je ne pourrais pas être digne si j'oubliais de remercier ma grande famille au Viet Nam qui m'a toujours encouragée et soutenue au cours de toutes ces années. Merci aussi à tous mes amis pour vos aides et vos encouragements.

Table des matières

Remerciements	1
---------------	---

Notations

Introduction générale	9
-----------------------	---

Chapitre 1

Approche par homogénéisation des effets non linéaires en milieux poreux

1.1	Propriétés de filtration en milieux poreux : loi de Darcy et modèles non linéaires	11
1.2	Principes de l'approche asymptotique en milieux poreux saturés	12
1.3	Problème de Darcy	15
1.3.1	Solution du problème à l'ordre $o(\epsilon^{-1})$	15
1.3.2	Solution du problème à l'ordre $o(\epsilon^0)$	16
1.3.3	Forme faible du problème de Darcy	16
1.4	Problèmes aux ordres supérieurs	17
1.4.1	Problème à l'ordre $o(\epsilon^1)$	18
1.4.2	Problème à l'ordre $o(\epsilon^2)$	19
1.4.3	Solution générale des problèmes aux ordres $o(\epsilon^n)$ avec $n \geq 1$	20
1.4.4	Forme faible des problèmes d'ordre supérieur	20
1.4.5	Solution à l'ordre $n = +\infty$ et problème non linéaire équivalent	21
1.5	Solution homogénéisée	22
1.5.1	Loi macroscopique de filtration	22
1.5.2	Propriétés des tenseurs de perméabilité	24
1.6	Conclusion	26

Chapitre 2

Etude numérique des effets non linéaires

2.1	Equations intégrales des problèmes aux limites	28
2.1.1	Formes intégrales des problèmes d'homogénéisation	30
2.2	Intégration numérique par transformée de Fourier rapide	33
2.2.1	Résolution par un schéma itératif	33
2.2.2	Discrétisation du problème aux limites	33
2.2.3	Choix du milieu de référence et du critère de convergence	37
2.3	Applications et comparaisons avec la solution complète du problème	40
2.3.1	Présentation des problèmes et perméabilités macroscopiques	40
2.3.2	Propriétés homogénéisées	42
2.3.3	Rayon de convergence de l'approche asymptotique numérique	45
2.4	Discussion des résultats et conclusion	50

Chapitre 3

Expressions analytiques pour les propriétés thermiques de composites à renforts sphériques

3.1	Homogénéisation de composites conducteurs	53
3.1.1	Principes de base de l'homogénéisation	53
3.1.2	Milieux périodiques	55
3.2	Homogénéisation des composites périodiques	56
3.2.1	Formulation des équations intégrales	56
3.2.2	Résolution à l'aide de schémas itératifs	59
3.3	Estimation des propriétés thermiques effectives	61
3.3.1	Approximation de la solution de l'équation intégrale	61
3.3.2	Microstructures avec symétries	62
3.4	Réseaux cubiques de sphères rigides	64
3.4.1	Réseau cubique simple (CS)	64
3.4.2	Réseau cubique centré (CC)	66
3.4.3	Réseau cubique à faces centrés (CFC)	67
3.4.4	Applications numériques	67
3.5	Distribution aléatoire de sphères rigides	68
3.5.1	Distribution radiale et facteur de structure	68
3.5.2	Solutions analytiques	72

3.5.3	Distribution bien mélangée (WS)	73
3.5.4	Applications numériques	75
3.6	Conclusion	76

Chapitre 4

Couplage convection-diffusion dans les milieux poreux

4.1	Approche par homogénéisation asymptotique	79
4.1.1	Couplage convection-diffusion	79
4.1.2	Approche par développement asymptotique	80
4.2	Solution analytique entre plans parallèles	83
4.3	Résolution par FFT	85
4.3.1	Formulation des équations intégrales	85
4.3.2	Formulation du schéma itératif de base	86
4.3.3	Schéma itératif basé sur la polarisation	88
4.4	Applications	88
4.4.1	Milieu poreux composé des pores parallèles	88
4.4.2	Milieu poreux composé d'un réseau de cylindres	92
4.4.3	Applications à des milieux poreux à fibres aléatoirement distribuées	93
4.5	Conclusion	98

Conclusion générale et perspectives	99
--	-----------

Bibliographie	101
----------------------	------------

Notations

• Notations tensorielles

a	scalaire,	\mathbf{a}	vecteur,
\mathbf{A}	tenseur d'ordre deux,	\mathbb{A}	tenseur d'ordre quatre,
\mathbf{I}	tenseur identité d'ordre deux,	\mathbb{I}	tenseur identité d'ordre quatre,
\cdot	produit contracté d'ordre un,	$:$	produit contracté d'ordre deux,
\otimes	produit tensoriel,		
δ_{ij}	symbole de Kronecker,		

$$(\mathbf{A} \underline{\otimes} \mathbf{B})_{ijkl} = \frac{1}{2}(A_{ik}B_{jl} + A_{il}B_{jk})$$

• Notations communes à tous les chapitres

ξ	vecteur d'onde,
$\Gamma^0(\xi)$	opérateur de Green pour les déformations,
$\Delta^0(\xi)$	opérateur de Green pour les contraintes,
σ	tenseur des contraintes microscopiques,

• Notations propres aux chapitres 1 et 2

\mathbb{C}	tenseur de rigidité,
\mathbb{S}	tenseur de souplesse,
\mathbf{v}	champ des vitesses microscopiques,
\mathbf{V}	champ des vitesses macroscopiques,
p	champ de pression microscopique,
\mathbf{G}	gradient de pression macroscopique,
\mathbf{J}	gradient de pression macroscopique adimensionné,
\mathbf{d}	taux de déformation,
\mathbf{K}	tenseur de perméabilité en régime statique,
\mathbf{f}	force de volume,

• **Notations propres aux chapitres 3 et 4**

T	champ de température,
e	gradient de température,
E	gradient de température macroscopique,
q	flux de chaleur,
Q	flux de chaleur macroscopique,
K	tenseur de conductivité,
R	tenseur de résistivité,

Introduction générale

Les méthodes de calcul des propriétés effectives des composites et des milieux poreux ont connus un fort développement avec l'émergence des approches par développements asymptotiques en homogénéisation périodique. Ces approches ont permis de traiter une large gamme de problèmes : les composites élastiques et conducteurs de la chaleur, la piézoélectricité, les écoulements en milieux poreux (perméabilité statique, dynamique, poroélasticité) etc et dont on pourra trouver des synthèses et toutes les références dans les ouvrages de Nemat-Nasser et Horii [69], de Milton [61], de Auriault, Boutin et Geindreau [8, 9].

Conjointement au développement des méthodes d'homogénéisation, se sont développées les techniques visant à estimer les propriétés macroscopiques soit par des formules analytiques, soit par des calculs numériques. Par ailleurs, le calcul des propriétés de milieux hétérogènes incluant des informations précises sur la morphologie des microstructures nécessite des calculs importants et donc le développement d'outils permettant d'optimiser les performances des moyens informatiques à disposition. Ceci est d'autant plus vrai avec les récents développements des techniques d'imagerie (microtomographie à rayon X) qui délivrent des images constituées d'un très grand nombre de pixels (ou voxels en 3d). Pour traiter ce type de microstructures on peut recourir à la méthode des éléments finis (en appliquant des techniques de reconstruction d'images) des estimations des propriétés homogénéisées (par de formules analytiques ou semi-analytiques sur les images reconstruites) ou encore des approches numériques par la transformée de Fourier rapide (ou communément appelées méthodes FFT) que l'on applique directement sur des images voxelisées.

Le travail réalisé dans cette thèse propose des contributions au calcul des propriétés homogénéisées à la fois par des approches analytiques et des approches numériques par FFT.

La première partie du travail est dédiée à l'homogénéisation des écoulements en milieux poreux et plus particulièrement à la prise en compte des non linéarités dans la loi de Darcy et qui apparaissent à fort gradient de pression imposé (ou de manière équivalente sous des conditions de grandes vitesses d'écoulement). La loi de Darcy [30] donne une relation linéaire entre la vitesse d'écoulement du fluide à travers le réseau poreux et le gradient de pression imposé. Toutefois cette relation linéaire reste valable uniquement à faible nombre de Reynolds. A plus fort gradient de pression, des non-linéarités apparaissent et qui sont dues au terme inertiel présent dans l'équation de Navier-Stokes. La loi de Forchheimer [36] est la loi non linéaire la plus connue et la plus utilisée dans l'industrie, pétrolière notamment. Toutefois cette loi est empirique. De nombreux efforts ont été réalisés ces vingt

dernières années afin de trouver une justification de la loi de Forchheimer ou pour formuler de nouvelles lois en s'appuyant sur des approches par homogénéisation périodique [57, 95, 77, 37, 81, 28, 75, 11]. Ainsi, les effets non linéaires sont obtenus en considérant les termes d'ordres supérieurs des développements en série. On obtient alors une loi macroscopique polynomiale, tous les termes de la série étant obtenus en résolvant en cascade des problèmes pour la cellule élémentaire du milieu périodique. Tous ces résultats sont présentés au premier chapitre. Au second chapitre on met en oeuvre des méthodes basées sur la FFT pour résoudre les problèmes en cascade et déterminer les coefficients constitutifs du modèle macroscopique. Les résultats obtenus sont comparés avec des solutions exactes du problème d'écoulement de Navier-Stokes. On analyse alors les résultats de l'approche asymptotique dont on montre les limitations aux travers de différents exemples.

La seconde partie de ce travail de thèse porte sur la détermination des propriétés de conductivité de milieux hétérogènes. Au chapitre trois, on propose de nouvelles estimations analytiques de la conductivité thermique pour des composites périodiques renforcés par des inclusions sphériques. Nous adoptons l'approche développée par Nemat-Nasser, Iwakuma et Hejazi [70] développée pour les composites élastiques [21] et dont nous exploitons l'analogie conduction-élasticité. Selon cette approche, l'estimation des propriétés effectives conduit alors à l'évaluation de séries dans l'espace des vecteurs d'onde. En remarquant, que les éléments de la série décroissent rapidement vers zéro, nous proposons de remplacer la série par la somme des premiers termes de la série et une intégrale pour les termes d'ordres supérieurs [85]. Nous obtenons ainsi des formules analytiques simples pour différents arrangements de sphères : cubique simple, cubique centré, cubique à faces centrées et que l'on compare avec des solutions numériques obtenues par FFT. La méthode est ensuite appliquée pour traiter le cas de distributions aléatoires de sphères et les résultats sont analysés et comparés avec des travaux issus de la littérature [38, 76, 55, 15, 39, 92, 74, 54].

Au chapitre 4, on détermine les propriétés macroscopiques de diffusivité de milieux poreux saturés par un fluide en écoulement et lui même également conducteur de la chaleur. Le problème de conduction se présente alors sous la même forme qu'au chapitre trois mais avec un terme supplémentaire qui prend en compte le transfert de chaleur par convection. On détermine le tenseur de diffusivité thermique en suivant la démarche d'homogénéisation établie par Bloch et Auriault [19], Allaire [3]. Les propriétés effectives sont alors déduites en résolvant successivement deux problèmes pour la cellule élémentaire : (i) un problème d'écoulement de fluide à travers le réseau poreux et qui fait l'objet des chapitres 1 et 2, (ii) un problème de transfert de chaleur avec un terme de convection qui fait explicitement intervenir la vitesse locale d'écoulement. Dans ce travail nous proposons des schémas de résolution utilisant la FFT pour résoudre le problème élémentaire de transfert de chaleur. Les méthodes numériques sont mise en oeuvre pour traiter différentes microstructures de milieux poreux.

Enfin, on présente les conclusions et les différentes perspectives envisagées à ce travail.

Chapitre 1

Approche par homogénéisation des effets non linéaires en milieux poreux

1.1 Propriétés de filtration en milieux poreux : loi de Darcy et modèles non linéaires

L'écoulement d'un fluide Newtonien à travers un solide poreux est classiquement décrit par la loi de Darcy (1856) :

$$V = -\frac{K}{\mu}G, \quad (1.1)$$

Où V est le flux de fluide à travers une surface du milieu poreux, μ est la viscosité dynamique, caractéristique du fluide en écoulement, G est le gradient de pression et K est la perméabilité caractéristique du milieu poreux. La relation ci-dessus est de nature unidimensionnelle et décrit l'écoulement dans une direction fixe de l'espace. Initialement, la loi de Darcy a été obtenue sur des expériences unidimensionnelles dans des colonnes de sable.

La forme tridimensionnelle de l'équation de Darcy est :

$$\mathbf{V} = -\frac{1}{\mu}\mathbf{K}\cdot\mathbf{G}. \quad (1.2)$$

Ici, \mathbf{V} et \mathbf{G} sont maintenant des vecteurs et \mathbf{K} est le tenseur (d'ordre deux) de perméabilité. Ce tenseur est symétrique, il dépend donc de six composantes indépendantes. Il est admis que la loi de Darcy reste valable tant que l'écoulement de fluide est suffisamment lent. On mesure l'importance des forces d'inertie par rapport aux forces de viscosité à l'aide du nombre de Reynolds :

$$Re = \frac{\rho v_c h}{\mu}, \quad (1.3)$$

où v_c est la vitesse caractéristique de l'écoulement et h une dimension caractéristique de la microstructure du milieu poreux (la taille des pores ou la taille de la période pour une

microstructure périodique). En outre, on admet que la loi de Darcy est applicable tant que $R_e \ll 1$. Lorsque le nombre de Reynolds croît, les non linéarités apparaissent dans l'équation de filtration. Ces effets non linéaires sont attribués aux termes d'inertie dans l'équation de Navier-Stokes et que l'on décrit généralement avec l'équation de Forchheimer [36] :

$$V + \alpha V^2 = -\frac{K}{\mu}G, \quad (1.4)$$

où αV^2 est un terme correctif à l'équation de Darcy qui est introduit de manière heuristique. Cette loi introduit un coefficient α qu'il s'agit de caler avec des données expérimentales. Forchheimer a également proposé une forme alternative en introduisant un terme cubique :

$$V + \alpha V^2 + \beta V^3 = -\frac{K}{\mu}G \quad (1.5)$$

On peut généraliser cette expression en considérant un polynôme d'ordre N en V . La loi de Forchheimer (1.4) est largement utilisée dans l'industrie pétrolière et a par ailleurs fait l'objet de validation avec des résultats expérimentaux (voir par exemple [53, 84, 1]). Notons toutefois que d'autres résultats expérimentaux [27, 46] suggèrent que le terme correctif serait plutôt un terme cubique en V . Il n'existe pas de véritable consensus à ce sujet tant sur le plan expérimental que sur les approches théoriques en homogénéisation. Il est par ailleurs probable qu'il n'existe pas de loi simple universelle pour décrire l'écoulement en régime non linéaire.

1.2 Principes de l'approche asymptotique en milieux poreux saturés

Les approches par homogénéisation périodique basées sur les développements asymptotiques (cf. Auriault et Sanchez-Palencia 1977, Sanchez Palencia 1980, Levy 1983) ont permis de donner une justification du modèle linéaire de Darcy et de déterminer le tenseur de perméabilité en lien avec la géométrie de la microstructure poreuse. Notons que ces résultats sont aussi retrouvés dans le cadre des méthodes basées sur l'homogénéisation aléatoire et des principes énergétiques (cf. Whitaker [94], Allaire [4]). Un certain nombre de travaux, toujours dans le cadre des approches par homogénéisation asymptotique (cf. Mei and Auriault [57], Woodie and Levy [95], Giorgi [37], Skjetne and Auriault [81], Chen et al. [28]), ont par la suite été proposés afin de trouver une justification du modèle de Forchheimer ou de construire des modèles de filtration plus pertinents. Cette section a pour objet de faire la synthèse de ces travaux et d'en rappeler les principaux résultats.

Considérons un milieu poreux, périodique, saturé par un fluide visqueux newtonien homogène, de viscosité dynamique μ (cf. figure 1.1). On note par V le volume total de la cellule, par V_f le volume occupé par le fluide et V_s le volume du solide. On note également par S la frontière entre le fluide et le solide. L'écoulement est décrit par les équations de Navier-Stokes en régime stationnaire.

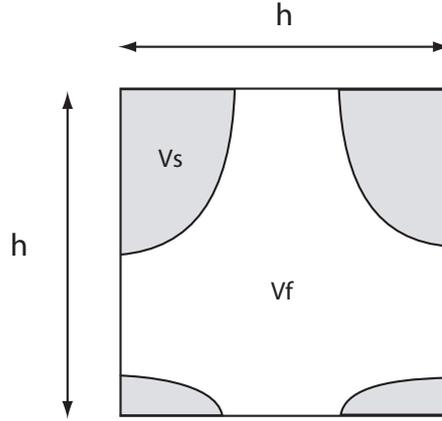


FIGURE 1.1 – Cellule de base périodique du milieu poreux.

La vitesse du fluide \mathbf{v} et la pression p satisfont aux relations :

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial^2 v_i}{\partial X_j \partial X_j} - \frac{\partial p}{\partial X_i} &= \rho v_j \frac{\partial v_i}{\partial X_j} \quad \text{dans } V_f, \\ \frac{\partial v_i}{\partial X_i} &= 0 \quad \text{dans } V_f, \\ v_i &= 0 \quad \text{sur } S, \end{aligned} \tag{1.6}$$

où ρ est la masse volumique du fluide, v_i représente les composantes du champ de vitesse et X_i celles du vecteur position.

Le problème introduit deux échelles :

- l'échelle microscopique définie par la dimension caractéristique h de la taille des pores ou de la taille de la période,
- l'échelle macroscopique définie par la dimension caractéristique L associée à la taille de la structure étudiée ou la longueur sur laquelle varie la pression macroscopique.

On note aussi par ϵ le facteur d'échelle défini par :

$$\epsilon = \frac{h}{L}, \tag{1.7}$$

et qui est supposé suffisamment petit devant 1 pour que la solution soit homogénéisable.

Un des principes de base des approches asymptotiques consiste à peser l'importance ou l'ordre de grandeur de chacun des termes puis de procéder à l'adimensionnement des équations.

Le gradient de pression, qui agit à l'échelle macroscopique, a pour ordre de grandeur p_c/L où p_c est la pression caractéristique (macroscopique). D'autre part, la contribution visqueuse dans l'équation de Navier-Stokes varie en $\mu v_c/h^2$ où v_c est la vitesse caractéristique de l'écoulement.

Le gradient de pression est contrebalancé par les forces visqueuses à l'échelle microscopique, il vient donc :

$$O\left(\mu \frac{\partial^2 v_i}{\partial X_j \partial X_j}\right) = O\left(\frac{\mu v_c}{h^2}\right) = O\left(\frac{\partial p}{\partial X_i}\right) = O\left(\frac{p_c}{L}\right) \tag{1.8}$$

D'autre part, l'ordre de grandeur du terme d'inertie est :

$$O\left(\rho v_j \frac{\partial v_i}{\partial X_j}\right) = O\left(\frac{\rho v_c^2}{h}\right), \quad (1.9)$$

et que l'on compare avec les termes visqueux en introduisant le nombre de Reynolds R_e défini par :

$$R_e = \frac{\rho v_c h}{\mu} \quad (1.10)$$

On recherche la solution du problème correspondant donc à des écoulements lents, c'est à dire à faible nombre de Reynolds, si bien que les non linéarités n'apparaissent pas à l'échelle macroscopique ou tout du moins pas au premier ordre. Sans vouloir précéder la suite de l'exposé, il convient de noter que les effets non linéaires sont introduits en considérant les termes aux ordres supérieurs du développement asymptotique.

En reprenant les hypothèses introduites par Auriault et Sanchez-Palencia [7], Sanchez Palencia [79], Levy [52], on admet donc que le nombre de Reynolds a pour ordre de grandeur :

$$R_e = O(\epsilon) \quad (1.11)$$

Ainsi dans la première équation dans (1.6), le terme d'inertie est négligeable et la solution au premier ordre est donc associée à l'équation de Darcy. Notons par ailleurs que l'on retrouve la relation de Darcy à partir de l'analyse des ordres de grandeurs effectuées ci-dessus. En effet, à partir des relations (1.8) et (1.11), on en déduit qu'il existe une grandeur sans dimension, notée \mathcal{K} , dont l'ordre de grandeur est $O(1)$ et telle que :

$$\frac{\mu v_c}{h^2} = -\mathcal{K} \frac{p_c}{L}, \quad (1.12)$$

qui est l'équation de Darcy écrite sous forme adimensionnée.

L'ordre de grandeur de chacun des termes étant maintenant déterminé, on peut procéder maintenant au changement de variable suivant :

$$v_i = \frac{\mu}{\rho L} v_i^*, \quad p = \frac{\mu^2}{\rho h^2} p^*, \quad X_i = L x_i, \quad (1.13)$$

où \mathbf{v}^* , p^* et \mathbf{x} sont des grandeurs sans dimension. En introduisant ces expressions dans (1.6), il vient alors :

$$\begin{aligned} \epsilon^2 \frac{\partial^2 v_i^*}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial p^*}{\partial x_i} &= \epsilon^2 v_j^* \frac{\partial v_i^*}{\partial x_j} \quad \text{dans } V_f, \\ \frac{\partial v_i^*}{\partial x_i} &= 0 \quad \text{dans } V_f, \\ v_i^* &= 0 \quad \text{sur } S, \end{aligned} \quad (1.14)$$

ce qui permet d'écrire les équations du problème et sa solution indépendamment du choix des coefficients μ et ρ et donc de la nature du fluide saturant le milieu poreux. Le problème étant défini par deux longueurs caractéristiques, on introduit les variables d'espace adimensionnées, x_i et y_i , telles que :

$$x_i = \frac{X_i}{L}, \quad y_i = \frac{Y_i}{h} \quad (1.15)$$

Les champs solutions du problème d'écoulement (v_i^* et p^*) dépendent des deux variables d'espace x_i et y_i . Il vient alors pour toute fonction $f(X_i)$:

$$\frac{\partial f}{\partial X_i}(X_i) = \frac{\partial f}{\partial X_i}(x_i, y_i) = \frac{1}{L} \left[\frac{\partial f}{\partial x_i}(x_i, y_i) + \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial f}{\partial y_i}(x_i, y_i) \right] \quad (1.16)$$

En utilisant la propriété (1.16) dans le système d'équations (1.14), on obtient :

$$\begin{aligned} \epsilon^2 \frac{\partial^2 v_i^*}{\partial x_j \partial x_j} + 2\epsilon \frac{\partial^2 v_i^*}{\partial x_j \partial y_j} + \frac{\partial^2 v_i^*}{\partial y_j \partial y_j} - \frac{\partial p^*}{\partial x_i} - \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial p^*}{\partial y_i} &= \epsilon^2 v_j^* \frac{\partial v_i^*}{\partial x_j} + \epsilon v_j^* \frac{\partial v_i^*}{\partial y_j} \quad \text{dans } V_f, \\ \frac{\partial v_i^*}{\partial x_i} + \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial v_i^*}{\partial y_i} &= 0 \quad \text{dans } V_f, \\ v_i^* &= 0 \quad \text{dans } S \end{aligned} \quad (1.17)$$

La séparation d'échelle est alors introduite en développant la solution sous la forme d'une série en puissance de ϵ :

$$\mathbf{v}^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{v}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \epsilon \mathbf{v}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \epsilon^2 \mathbf{v}^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots, \quad (1.18)$$

$$p^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = p^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \epsilon p^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \epsilon^2 p^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots \quad (1.19)$$

Finalement, en introduisant les expressions (1.18) dans le système d'équations (1.17) puis en collectant tous les termes de même puissance en ϵ , on obtient alors une hiérarchie de problèmes à résoudre pour les champs de vitesse $\mathbf{v}^{(0)}$, $\mathbf{v}^{(1)}$, $\mathbf{v}^{(2)}$, ... et les champs de pression $p^{(0)}$, $p^{(1)}$, $p^{(2)}$, Dans les sections suivantes, on rappelle les équations de ces problèmes élémentaires et leurs solutions.

1.3 Problème de Darcy

1.3.1 Solution du problème à l'ordre $o(\epsilon^{-1})$

Le problème au premier ordre est obtenu en collectant dans la première relation dans (1.17) les terme en ϵ^{-1} :

$$\frac{\partial p^{(0)}}{\partial y_i} = 0 \quad (1.20)$$

Ceci suggère que la pression $p^{(0)}$ dépend uniquement de la coordonnée \mathbf{x} :

$$p^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = P^{(0)}(\mathbf{x}) \quad (1.21)$$

et qui est donc constante à l'échelle macroscopique.

1.3.2 Solution du problème à l'ordre $o(\epsilon^0)$

Le problème à l'ordre ϵ^0 s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 v_i^{(0)}}{\partial y_j \partial y_j} - \frac{\partial p^{(1)}}{\partial y_i} - J_i &= 0 \quad \text{dans } V_f, \\ \frac{\partial v_i^{(0)}}{\partial y_i} &= 0 \quad \text{dans } V_f, \\ v_i^{(0)} &= 0 \quad \text{sur } S, \end{aligned} \quad (1.22)$$

où $v_i^{(0)}$ et $p^{(1)}$ sont périodiques en \mathbf{y} et J_i est défini par :

$$J_i(\mathbf{x}) = \frac{\partial P^{(0)}}{\partial x_i}(\mathbf{x}) \quad (1.23)$$

Ici, $J_i(\mathbf{x})$ est une fonction de la variable d'espace \mathbf{x} et représente le gradient de pression macroscopique sous sa forme adimensionnée.

Le système d'équations aux dérivées partielles (EDP), défini par (1.22), est linéaire pour ses inconnues $v_i^{(0)}$ et $p^{(1)}$. Le paramètre de chargement est le gradient de pression J_i , on en déduit que la solution est de la forme :

$$v_i^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -k_{ij}^0(\mathbf{y}) J_j(\mathbf{x}), \quad p^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = P^{(1)}(\mathbf{x}) + h_i^1(\mathbf{y}) J_i(\mathbf{x}), \quad (1.24)$$

où $k_{ij}^0(\mathbf{y})$ et $h_i^1(\mathbf{y})$ sont les composantes des tenseurs de localisation. La moyenne du champ de vitesse sur la cellule s'écrit :

$$V_i^0(\mathbf{x}) = \langle v_i^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle_V = -\mathcal{K}_{ij}^0 J_j(\mathbf{x}), \quad \mathcal{K}_{ij}^0 = \langle k_{ij}^0(\mathbf{y}) \rangle_V, \quad (1.25)$$

qui est l'équation de Darcy. Dans (1.24), $P^{(1)}(\mathbf{x})$ est la moyenne de $p^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ sur la cellule élémentaire :

$$P^{(1)}(\mathbf{x}) = \langle p^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle_V, \quad (1.26)$$

et donc $h_i(\mathbf{y})$ est choisi tel que :

$$\langle h_i^1(\mathbf{y}) \rangle_V = 0 \quad (1.27)$$

La pression $p^{(1)}$ étant définie à une pression macroscopique de référence près, on pose donc dans la suite $P^{(1)}(\mathbf{x}) = 0$. Il convient de noter que ce choix n'affecte pas les résultats présentés dans la suite de ce chapitre.

1.3.3 Forme faible du problème de Darcy

La formulation variationnelle du problème aux limites (1.22) est obtenue en introduisant W , l'ensemble des champs de vecteurs périodiques, à divergence nulle dans V_f et nuls à l'interface S . On définit aussi la forme bilinéaire $a(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ par :

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{V_f} \frac{\partial u_i}{\partial y_j} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} d\mathbf{y}, \quad (1.28)$$

et qui est commutatif :

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = a(\mathbf{v}, \mathbf{u}) \quad (1.29)$$

En multipliant la première équation dans (1.22) par \mathbf{u} et en intégrant sur le volume de la cellule, V , il vient :

$$\int_{V_f} \frac{\partial^2 v_i^{(0)}}{\partial x_j \partial x_j} u_i d\mathbf{y} - \int_{V_f} \frac{\partial p^{(1)}}{\partial y_i} u_i d\mathbf{y} - \langle \mathbf{u} \rangle_{V_f} \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (1.30)$$

En utilisant une intégration par partie, on a ensuite :

$$\int_{V_f} \frac{\partial^2 v_i^{(0)}}{\partial x_j \partial x_j} u_i d\mathbf{y} = \int_{\partial V_f} \frac{\partial v_i^{(0)}}{\partial x_j} u_i n_j d\mathbf{y} - a(\mathbf{u}, \mathbf{v}), \quad (1.31)$$

où ∂V_f se compose du bord de la cellule élémentaire traversée par le fluide et de l'interface fluide-solide. En utilisant les conditions de périodicité et les conditions de bord nul à l'interface, on en déduit que l'intégrale sur ∂V_f est nulle. Il reste alors :

$$\int_{V_f} \frac{\partial^2 v_i^{(0)}}{\partial x_j \partial x_j} u_i d\mathbf{y} = -a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \quad (1.32)$$

En utilisant une intégration par partie pour la seconde intégrale dans (1.30), il vient :

$$\int_{V_f} \frac{\partial p^{(1)}}{\partial y_i} u_i d\mathbf{y} = \int_{\partial V_f} p^{(1)} u_i n_i d\mathbf{y} + \int_{\partial V_f} p^{(1)} \frac{\partial u_i}{\partial y_i} d\mathbf{y}. \quad (1.33)$$

Le champ \mathbf{u} étant à divergence nulle, la seconde intégrale à droite de l'égalité est nulle. La première intégrale à droite de l'égalité est également nulle en considérant les conditions de périodicité de $p^{(1)}$ et \mathbf{u} . On a donc :

$$\int_{V_f} \frac{\partial p^{(1)}}{\partial y_i} u_i d\mathbf{y} = 0 \quad (1.34)$$

En utilisant les résultats (1.32) et (1.34) dans (1.30), il vient :

$$\forall \mathbf{u} \in W, \quad a(\mathbf{u}, \mathbf{v}^0) = - \langle \mathbf{u} \rangle_{V_f} \cdot \mathbf{J} \quad (1.35)$$

qui est la forme faible du problème aux limites définis par (1.22).

1.4 Problèmes aux ordres supérieurs

On se propose maintenant d'examiner les termes d'ordres supérieurs du développement asymptotique. Deux types de termes, associés à des phénomènes physiques différents, sont à considérer : (i) des termes en puissance de \mathbf{J} qui introduisent explicitement les effets non linéaires d'origine inertiel, (ii) des termes introduisant les dérivées d'ordres supérieurs du gradient de pression. Ces derniers ont une influence sur la loi de filtration macroscopique lorsque la taille de la cellule élémentaire n'est plus véritablement négligeable devant la taille de la structure étudiée. L'effet de ses dérivées d'ordres supérieurs du gradient de pression a déjà été étudiées par Auriault [6] et produisent des effets microstructuraux comparables à ceux étudiés par Boutin [22] pour les composites élastiques. Dans ce travail nous n'abordons pas ces effets pour nous concentrer uniquement sur les termes non linéaires d'origine inertiel.

1.4.1 Problème à l'ordre $o(\epsilon^1)$

En collectant tous les termes en $o(\epsilon^1)$ dans (1.17), on obtient le système d'équation :

$$\begin{aligned} 2 \frac{\partial^2 v_i^{(0)}}{\partial x_j \partial y_j} + \frac{\partial^2 v_i^{(1)}}{\partial y_j \partial y_j} - \frac{\partial p^{(2)}}{\partial y_i} - \frac{\partial p^{(1)}}{\partial x_i} &= v_j^{(0)} \frac{\partial v_i^{(0)}}{\partial y_j} \quad \text{dans } V_f, \\ \frac{\partial v_i^{(0)}}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i^{(1)}}{\partial y_i} &= 0 \quad \text{dans } V_f, \\ v_i^{(1)} &= 0 \quad \text{sur } S \end{aligned} \quad (1.36)$$

dans lequel les inconnues sont les champs $v_i^{(1)}$ et $p^{(2)}$. En remplaçant $v_i^{(0)}$ par (1.24), il vient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 v_i^{(1)}}{\partial y_j \partial y_j} - \frac{\partial p^{(2)}}{\partial y_i} &= 2 \frac{\partial k_{ik}^0}{\partial y_j} J_{jk} + k_{jk}^0 \frac{\partial k_{il}^0}{\partial y_j} J_k J_l \quad \text{dans } V_f, \\ \frac{\partial v_i^{(1)}}{\partial y_i} &= k_{ij}^0 J_{ij} \quad \text{dans } V_f, \\ v_i^{(1)} &= 0 \quad \text{sur } S, \end{aligned} \quad (1.37)$$

avec :

$$J_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{\partial J_i}{\partial x_j}(\mathbf{x}) = \frac{\partial P^{(0)}}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}) \quad (1.38)$$

On note par ailleurs que J_{ij} est invariant par permutation des indices i et j . Le système d'EDP défini dans (1.36) contient deux types de termes source :

- un terme quadratique en J_i ,
- des termes linéaires en J_{ij} .

La solution de ce problème est donc de la forme :

$$v_i^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -k_{ijk}^1(\mathbf{y}) J_j(\mathbf{x}) J_k(\mathbf{x}) - w_{ijk}^1(\mathbf{y}) J_{jk}(\mathbf{x}), \quad (1.39)$$

$$p^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = h_{ij}^2(\mathbf{y}) J_i(\mathbf{x}) J_j(\mathbf{x}) + z_{ij}^1(\mathbf{y}) J_{ij}(\mathbf{x}), \quad (1.40)$$

Le terme linéaire en J_{ij} introduit, dans la solution en vitesse, une dépendance avec le double gradient de pression macroscopique. Cette correction à la solution de Darcy n'est pas associée aux effets non linéaires recherchés. Ce sont des termes qui introduisent des effets microstructuraux plus largement étudiés dans les composites [23] et qui induisent un comportement élastique macroscopique qui dépend du gradient de la déformation. Dans les milieux poreux, les effets de microstructure se traduisent donc par une dépendance de la loi de filtration avec le double gradient de pression. Ces effets apparaissent lorsque le gradient de pression varie de manière importante au sein d'une période. Comme déjà évoqué en préambule de cette section, nous n'aborderons pas les effets de microstructure dans ce travail et nous admettons qu'ils sont négligeables au regard des effets non linéaires étudiés.

En éliminant les termes proportionnels en J_{ij} , il reste alors :

$$v_i^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -k_{ijk}^1(\mathbf{y}) J_j(\mathbf{x}) J_k(\mathbf{x}), \quad (1.41)$$

$$p^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = h_{ij}^2(\mathbf{y}) J_i(\mathbf{x}) J_j(\mathbf{x}), \quad (1.42)$$

avec, comme pour la solution au premier ordre :

$$\langle h_{ij}^2(\mathbf{y}) \rangle_V = 0. \quad (1.43)$$

En débarrassant le système (1.36) des termes à l'origine du double gradient de pression, il reste :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 v_i^{(1)}}{\partial y_j \partial y_j} - \frac{\partial p^{(2)}}{\partial y_i} &= v_j^{(0)} \frac{\partial v_i^{(0)}}{\partial y_j} \quad \text{dans } V_f, \\ \frac{\partial v_i^{(1)}}{\partial y_i} &= 0 \quad \text{dans } V_f, \\ v_i^{(1)} &= 0 \quad \text{sur } S \end{aligned} \quad (1.44)$$

La solution de ce problème est donnée par (1.41) et (1.42). On peut noter qu'il s'agit des équations de Stokes avec un terme source qui dépend du champ de vitesse obtenu à l'ordre précédent.

1.4.2 Problème à l'ordre $o(\epsilon^2)$

En collectant maintenant tous les termes en $o(\epsilon^2)$ dans (1.17), on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 v_i^{(0)}}{\partial x_j \partial x_j} + 2 \frac{\partial^2 v_i^{(1)}}{\partial x_j \partial y_j} + \frac{\partial^2 v_i^{(2)}}{\partial y_j \partial y_j} - \frac{\partial p^{(3)}}{\partial y_i} - \frac{\partial p^{(2)}}{\partial x_i} &= \\ v_j^{(0)} \frac{\partial v_i^{(0)}}{\partial x_j} + v_j^{(0)} \frac{\partial v_i^{(1)}}{\partial y_j} + v_j^{(1)} \frac{\partial v_i^{(0)}}{\partial y_j} &\quad \text{dans } V_f, \\ \frac{\partial v_i^{(1)}}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i^{(2)}}{\partial y_i} &= 0 \quad \text{dans } V_f, \\ v_i^{(2)} &= 0 \quad \text{sur } S, \end{aligned} \quad (1.46)$$

système dans lequel les inconnues sont les champs $\mathbf{v}^{(2)}$ et $p^{(3)}$. Les champs $\mathbf{v}^{(0)}$, $\mathbf{v}^{(1)}$ et $p^{(2)}$, calculés aux ordres précédents, sont donnés par les relations (1.24), (1.41) et (1.42). En éliminant tous les termes qui introduisent les effets du double gradient de pression, il reste :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 v_i^{(2)}}{\partial y_j \partial y_j} - \frac{\partial p^{(3)}}{\partial y_i} &= v_j^{(0)} \frac{\partial v_i^{(1)}}{\partial y_j} + v_j^{(1)} \frac{\partial v_i^{(0)}}{\partial y_j} \quad \text{dans } V_f, \\ \frac{\partial v_i^{(2)}}{\partial y_i} &= 0 \quad \text{dans } V_f, \\ v_i^{(2)} &= 0 \quad \text{sur } S \end{aligned} \quad (1.47)$$

En remplaçant $\mathbf{v}^{(0)}$, $\mathbf{v}^{(1)}$ par les expressions données dans (1.24), (1.41) et (1.42), on obtient pour le second membre dans (1.47) :

$$v_j^{(0)} \frac{\partial v_i^{(1)}}{\partial y_j} + v_j^{(1)} \frac{\partial v_i^{(0)}}{\partial y_j} = \left[k_{jk}^0 \frac{\partial k_{ipq}^1}{\partial y_j} + k_{j pq}^1 \frac{\partial k_{ik}^1}{\partial y_j} \right] J_k J_p J_q, \quad (1.48)$$

qui est un terme cubique en J_i . La solution du problème à l'ordre $o(\epsilon^2)$ s'écrit donc :

$$v_i^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -k_{ijkl}^2(\mathbf{y}) J_i(\mathbf{x}) J_k(\mathbf{x}) J_l(\mathbf{x}) \quad (1.49)$$

$$p^{(3)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = h_{ijk}^3(\mathbf{y}) J_i(\mathbf{x}) J_j(\mathbf{x}) J_k(\mathbf{x}) \quad (1.50)$$

avec :

$$\langle h_{ijk}^3(\mathbf{y}) \rangle_V = 0 \quad (1.51)$$

1.4.3 Solution générale des problèmes aux ordres $o(\epsilon^n)$ avec $n \geq 1$

Les problèmes aux ordres suivants, débarrassés de tous les termes qui induisent une dépendance avec le double, triple, etc, gradient de pression, s'écrivent sous la forme générale suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 v_i^{(n)}}{\partial y_j \partial y_j} - \frac{\partial p^{(n+1)}}{\partial y_i} &= \sum_{k=0}^{n-1} v_j^{(k)} \frac{\partial v_i^{(n-k-1)}}{\partial y_j} \quad \text{dans } V_f, \\ \frac{\partial v_i^{(n)}}{\partial y_i} &= 0 \quad \text{dans } V_f, \\ v_i^{(n)} &= 0 \quad \text{dans } S, \end{aligned} \quad (1.52)$$

qui est obtenu en collectant tous les termes en ϵ^n dans (1.17) puis en éliminant les termes introduisant une dépendance avec le double gradient et les gradients d'ordre supérieur de la pression macroscopique. La solution de ce problème s'écrit :

$$v_i^{(n)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -k_{ijk\dots l}^n(\mathbf{y}) J_j(\mathbf{x}) J_k(\mathbf{x}) \dots J_l(\mathbf{x}) \quad (1.53)$$

$$p^{(n+1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = h_{ij\dots k}^{n+1} J_i(\mathbf{x}) J_j(\mathbf{x}) \dots J_k(\mathbf{x}) \quad (1.54)$$

qui sont des fonctions de degré $n + 1$ avec le gradient de pression J_i .

1.4.4 Forme faible des problèmes d'ordre supérieur

Tous les problèmes d'ordre supérieur peuvent être écrits sous la forme générale donnée par (1.52). Ces problèmes sont décrits par les équations de Stokes avec un second membre qui dépend des solutions obtenues aux ordres précédents. On peut donc suivre une démarche similaire à celle présentée en section 1.3.3 pour obtenir la forme faible de ces problèmes aux limites. Ainsi, en multipliant la première relation dans (1.52) par un champ \mathbf{u} à divergent nul et qui prends la valeur 0 sur le bord S , puis en intégrant sur le domaine V_f du fluide, il vient alors :

$$\forall \mathbf{u} \in W, \quad a(\mathbf{v}^{(n)}, \mathbf{u}) = - \int_{V_f} u_i \sum_{k=0}^{n-1} v_j^{(k)} \frac{\partial v_i^{(n-k-1)}}{\partial y_j} d\mathbf{y} \quad (1.55)$$

On introduit alors la forme trilineaire b définie par :

$$b(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = \int_{V_f} u_i \frac{\partial v_j}{\partial y_i} w_j d\mathbf{y} \quad (1.56)$$

pour tous vecteurs \mathbf{u} , \mathbf{v} et \mathbf{w} appartenant à W et qui permet de réécrire le problème (1.55) sous la forme :

$$\forall \mathbf{u} \in W, \quad a(\mathbf{v}^{(n)}, \mathbf{u})_W = - \sum_{k=0}^{n-1} b(\mathbf{v}^{(k)}, \mathbf{v}^{(n-k-1)}, \mathbf{u}) \quad (1.57)$$

Notons que la forme trilinéaire b possède la propriété suivante :

$$b(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = -b(\mathbf{u}, \mathbf{w}, \mathbf{v}) \quad (1.58)$$

Pour obtenir cette égalité, partons de la relation suivante :

$$u_i \frac{\partial v_j}{\partial y_i} w_j = \frac{\partial u_i v_j w_j}{\partial y_i} - v_j \frac{\partial u_i w_j}{\partial y_i} \quad (1.59)$$

D'autre part, le vecteur \mathbf{u} étant à divergent nul, on a aussi :

$$u_i \frac{\partial v_j}{\partial y_i} w_j = \frac{\partial u_i v_j w_j}{\partial y_i} - u_i v_j \frac{\partial w_j}{\partial y_i} \quad (1.60)$$

En intégrant ensuite sur le volume V_f et en utilisant le théorème de la divergence, il vient :

$$\int_{V_f} u_i \frac{\partial v_j}{\partial y_i} w_j dy = \int_{\partial V_f \cup S} u_i v_j w_j n_i dy - \int_{V_f} u_i v_j \frac{\partial w_j}{\partial y_i} dy \quad (1.61)$$

où ∂V_f est la portion du bord de la cellule qui est traversée par le fluide. La quantité $u_i v_j w_j$ est périodique et n_i prend des valeurs opposées sur le bord de la cellule. On en déduit donc que l'intégrale sur le bord ∂V_f est nulle. D'autre part, la quantité $u_i v_j w_j$ est nulle sur S . Il reste donc :

$$\int_{V_f} u_i \frac{\partial v_j}{\partial y_i} w_j dy = - \int_{V_f} u_i v_j \frac{\partial w_j}{\partial y_i} dy \quad (1.62)$$

ce qui prouve la propriété (1.58).

1.4.5 Solution à l'ordre $n = +\infty$ et problème non linéaire équivalent

La solution totale du problème est obtenue en sommant les solutions obtenues à tous les ordres, ce qui donne :

$$v_i^* = \sum_{n=0}^{n=+\infty} \epsilon^n v_i^{(n)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = - \sum_{n=0}^{n=+\infty} \epsilon^n k_{ij k \dots l}^n(\mathbf{y}) J_j(\mathbf{x}) J_k(\mathbf{x}) \dots J_l(\mathbf{x}), \quad (1.63)$$

$$p^* = \sum_{n=0}^{n=+\infty} \epsilon^n p_i^{(n)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = - \sum_{n=0}^{n=+\infty} \epsilon^n h_{ij k \dots l}^n(\mathbf{y}) J_i(\mathbf{x}) J_k(\mathbf{x}) \dots J_l(\mathbf{x}) \quad (1.64)$$

A quel problème non linéaire le champ v_i^* et le champ de pression p^* , donnés ci-dessus, sont-ils solutions ? v_i^* et p^* ne sont pas solution du problème initial (1.17) puisqu'à chaque étape

de calcul nous avons supprimé tous les termes introduisant les effets de microstructure. Pour obtenir les équation dont v_i^* et p^* sont solutions, il suffit de combiner les équations des problèmes élémentaires (1.22), (1.44), (1.47) et (1.53) pour $n = 3, 4, \dots + \infty$. On obtient ainsi :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 v_i^*}{\partial y_j \partial y_j} - \frac{\partial p^*}{\partial y_i} - J_i &= v_j^* \frac{\partial v_i^*}{\partial y_j} \quad \text{dans } V_f, \\ \frac{\partial v_i^*}{\partial y_i} &= 0 \quad \text{dans } V_f, \\ v_i^* &= 0 \quad \text{dans } S, \end{aligned} \tag{1.65}$$

qui est un problème d'écoulement de Navier-Stokes induit par le gradient de pression J_i . Les solutions pour \mathbf{v}^* et p^* sont donc des fonctions non linéaires de la variable \mathbf{J} . Le problème de Navier-Stokes étant non linéaire, on préfère la résolution numérique des problèmes élémentaires qui sont linéaires. La solution, obtenue en série, et tronquée à un ordre n , pourra ensuite être comparée à la solution complète (en résolvant numériquement le système (1.65)) pour en évaluer la précision.

1.5 Solution homogénéisée

1.5.1 Loi macroscopique de filtration

On se propose maintenant de formuler la loi de filtration macroscopique par homogénéisation de la solution microscopique. Le champ de pression et le champ de vitesse macroscopique (adimensionnés) sont donnés par les relations de moyenne usuelles :

$$P^*(\mathbf{x}) = \langle p^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle_V, \quad V_i^*(\mathbf{x}) = \langle v_i^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle_V \tag{1.66}$$

Considérons d'abord la pression, la solution $p^*(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ est donnée par la série (1.18) dans laquelle les termes $p^{(0)}, p^{(1)}, p^{(2)}$ sont donnés par les relations (1.22), (1.24), (1.41) et (1.63) à l'ordre n quelconque. En rappelant que :

$$\langle h_{ij\dots k}^n(\mathbf{y}) \rangle_V = 0 \tag{1.67}$$

Pour toute valeur de n , on en déduit que :

$$P^*(\mathbf{x}) = P^{(0)}(\mathbf{x}) \tag{1.68}$$

Ainsi $P^{(0)}(\mathbf{x})$ est la pression macroscopique adimensionnée et donc J_i , défini par la relation (1.23), est le gradient de pression macroscopique adimensionné.

On obtient ensuite pour la moyenne du champ de vitesse :

$$V_i^* = - \left[\mathcal{K}_{ij}^0 J_j + \epsilon \mathcal{K}_{ijk}^1 J_j J_k + \epsilon^2 \mathcal{K}_{ijkp}^2 J_j J_k J_p + \epsilon^3 \mathcal{K}_{ijkpq}^3 J_j J_k J_p J_q + \dots \right], \tag{1.69}$$

où l'on a posé :

$$\mathcal{K}_{ij\dots k}^n = \langle k_{ij\dots k}^n(\mathbf{y}) \rangle_V \tag{1.70}$$

Le premier terme dans la relation (1.69) est la loi de Darcy, les termes d'ordres supérieurs apparaissent comme des corrections à l'approximation linéaire.

Dans (1.69), $\mathcal{K}_{ij\dots k}^n$ sont les composantes des tenseurs de perméabilité sans dimension. Nous discuterons plus tard des symétrie indicielles que possèdent ces tenseurs. L'inversion de la loi de filtration est également une série infinie qui s'écrit :

$$J_i = - [\mathcal{H}_{ij}^0 V_j^* + \epsilon \mathcal{H}_{ijk}^1 V_j^* V_k^* + \epsilon^2 \mathcal{H}_{ijkp}^2 V_j^* V_k^* V_p^* + \epsilon^3 \mathcal{H}_{ijkpq}^3 V_j^* V_k^* V_p^* V_q^* + \dots] \quad (1.71)$$

Relation dans laquelle \mathcal{H}_{ij}^0 , \mathcal{H}_{ijk}^1 , \mathcal{H}_{ijkp}^2 , \mathcal{H}_{ijkpq}^3 , sont les composantes des tenseurs de résistivité hydraulique adimensionnés. Ils sont obtenus en remplaçant, dans (1.69), J_i par (1.71) puis en collectant tous les termes ayant la même puissance en V_i . Ceci conduit alors à un ensemble d'équations linéaires pour lesquels \mathcal{H}_{ij}^0 , \mathcal{H}_{ijk}^1 , \mathcal{H}_{ijkp}^2 , ... sont les inconnues :

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{ip}^0 \mathcal{H}_{pj}^0 &= \delta_{ij}, \\ \mathcal{K}_{ip}^0 \mathcal{H}_{pj k}^1 + \mathcal{K}_{ipq}^1 \mathcal{H}_{pj}^0 \mathcal{H}_{qk}^0 &= 0, \\ \dots \end{aligned} \quad (1.72)$$

et qui sont résolus successivement pour obtenir les tenseurs de résistivité hydrauliques. Exprimons maintenant la loi de filtration en redimensionnant les grandeurs. On pose ainsi :

$$V_i = \frac{\mu}{\rho L} V_i^*, \quad G_i = \frac{\mu^2}{\rho h^2 L} J_i \quad (1.73)$$

Il vient alors pour (1.69) :

$$\begin{aligned} V_i = -\frac{h^2}{\mu} \left[\mathcal{K}_{ij}^0 G_j + \frac{\rho h^3}{\mu^2} \mathcal{K}_{ijk}^1 G_j G_k + \left(\frac{\rho h^3}{\mu^2} \right)^2 \mathcal{K}_{ijkp}^2 G_j G_k G_p \right. \\ \left. + \left(\frac{\rho h^3}{\mu^2} \right)^3 \mathcal{K}_{ijkpq}^3 G_j G_k G_p G_q + \dots \right] \end{aligned} \quad (1.74)$$

La relation (1.74) fait intervenir les caractéristiques du fluide (μ et ρ) et la taille de la cellule élémentaire (h). Pour les applications numériques présentées au second chapitre, il est préférable d'utiliser une expression qui est indépendante des caractéristiques des fluide et de la taille de la cellule élémentaire.

La relation (1.69) est indépendante de μ et ρ mais fait toujours intervenir la taille de la cellule élémentaire par le rapport d'échelle ϵ .

On peut éliminer le rapport d'échelle en utilisant un nouveau changement de variable. On pose ainsi dans (1.74) :

$$\bar{V}_i = \frac{\rho h}{\mu} V_i, \quad \bar{G}_i = \frac{\rho h^3}{\mu^2} G_i \quad (1.75)$$

L'équation (1.74) devient alors :

$$\bar{V}_i = - [\mathcal{K}_{ij}^0 \bar{G}_j + \mathcal{K}_{ijk}^1 \bar{G}_j \bar{G}_k + \mathcal{K}_{ijkp}^2 \bar{G}_j \bar{G}_k \bar{G}_p + \mathcal{K}_{ijkpq}^3 \bar{G}_j \bar{G}_k \bar{G}_p \bar{G}_q + \dots] \quad (1.76)$$

Donnons une interprétation physique aux grandeurs introduites.

D'abord, on note :

$$R_e = \frac{\rho v_c h}{\mu}, \quad (1.77)$$

le nombre de Reynolds de pores.

v_c est la vitesse caractéristique que l'on définit par :

$$v_c = \|\langle v \rangle_V\| = \|\langle V \rangle\| \quad (1.78)$$

A partir de (1.75), on observe que :

$$R_e = \|\bar{V}\| \quad (1.79)$$

On observe que la valeur de nombre de Reynolds de pores est du même ordre de grandeur que la vitesse macroscopique adimensionnée \bar{V} .

1.5.2 Propriétés des tenseurs de perméabilité

Notons d'abord que dans les relations (1.53) ou (1.74), on peut intervertir les composantes J_i, J_j, \dots, J_k sans modifier le résultat. Les tenseurs de perméabilité $\mathcal{K}_{ij\dots k}^n$ sont donc invariants par toute permutation des indices $j\dots k$. Ainsi \mathcal{K}_{ijk}^1 est défini par $3 \times 6 = 18$ composantes indépendantes, \mathcal{K}_{ijkl}^2 par $3 \times 10 = 30$ composantes indépendantes dans le cas où le matériau ne présente aucune symétrie. On peut réduire significativement le nombre de composantes en considérant les diverses symétries matérielles (orthotropie, isotropie transverse etc.). En particulier, pour un matériau isotrope, toutes les composantes des tenseurs de perméabilité d'ordre impaire, $\mathcal{K}^1, \mathcal{K}^3$, etc. sont nulles. D'autres relations permettent de réduire le nombre total de coefficients à calculer, ces relations sont obtenues en considérant la propriété (1.58) de la forme trilinéaire b . Ces relations sont exprimées ci-dessous indépendamment du choix des symétries matérielles du milieu poreux.

On note d'abord $\mathbf{v}^0(\mathbf{J})$ la solution du problème au premier ordre obtenue en imposant le gradient de pression \mathbf{J} et telle que :

$$\forall \mathbf{u} \quad a(\mathbf{v}^0(\mathbf{J}), \mathbf{u}) = - \langle \mathbf{u} \rangle_{V_f} \cdot \mathbf{J} \quad (1.80)$$

En particulier, on a :

$$a(\mathbf{v}^0(\mathbf{e}_j), \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_i))_{\mathcal{W}} = \mathcal{K}_{ij}^0 \quad (1.81)$$

On pose ensuite $\mathbf{v}^1(\mathbf{J}, \mathbf{J}')$ la solution du problème :

$$a(\mathbf{v}^1(\mathbf{J}, \mathbf{J}'), \mathbf{u}) = -b(\mathbf{v}^0(\mathbf{J}), \mathbf{v}^0(\mathbf{J}'), \mathbf{u}) \quad (1.82)$$

En posant $\mathbf{J} = \mathbf{e}_k$ et $\mathbf{u} = \mathbf{v}^1(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j)$ dans (1.80), on a :

$$a(\mathbf{v}^0(\mathbf{e}_k), \mathbf{v}^1(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j)) = - \langle \mathbf{v}^1(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) \rangle_{V_f} \cdot \mathbf{e}_k = \mathcal{K}_{kij}^1 \quad (1.83)$$

En posant ensuite $\mathbf{J} = \mathbf{e}_i$, $\mathbf{J}' = \mathbf{e}_j$ et $\mathbf{u} = \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_k)$ dans (1.82), on a :

$$a(\mathbf{v}^1(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j), \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_k)) = -b(\mathbf{v}^0(\mathbf{e}_i), \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_j), \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_k)) \quad (1.84)$$

La forme bilinéaire a étant symétrique, il apparaît donc que :

$$\mathcal{K}_{kij}^1 = -b(\mathbf{v}^0(\mathbf{e}_i), \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_j), \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_k)) \quad (1.85)$$

Enfin, en utilisant la propriété (1.58), il vient :

$$\mathcal{K}_{kij}^1 = -\mathcal{K}_{jik}^1 \quad (1.86)$$

Le tenseur \mathcal{K}_{ijk}^1 étant invariant par toute permutation de j et k , on peut écrire successivement :

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{ijk}^1 &= \mathcal{K}_{ikj}^1, \\ \mathcal{K}_{jik}^1 &= \mathcal{K}_{jki}^1, \\ \mathcal{K}_{kij}^1 &= \mathcal{K}_{kji}^1 \end{aligned} \quad (1.87)$$

On peut également écrire à partir de (1.86) :

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{ijk}^1 &= -\mathcal{K}_{kji}^1, \\ \mathcal{K}_{ikj}^1 &= -\mathcal{K}_{jki}^1, \\ \mathcal{K}_{kij}^1 &= -\mathcal{K}_{jik}^1 \end{aligned} \quad (1.88)$$

A partir de (1.87) et (1.88), on obtient successivement :

$$\mathcal{K}_{ijk}^1 = \mathcal{K}_{ikj}^1 = -\mathcal{K}_{jki}^1 = -\mathcal{K}_{jik}^1 = \mathcal{K}_{kij}^1 = \mathcal{K}_{kji}^1 = -\mathcal{K}_{ijl}^1 \quad (1.89)$$

De l'égalité $\mathcal{K}_{ijk}^1 = -\mathcal{K}_{ijl}^1$ on déduit que $\mathcal{K}_{ijk}^1 = 0$. Notons bien que ce résultat est obtenu indépendamment des propriétés de symétrie du matériau. Ce résultat est donc valable pour les matériaux isotropes et anisotropes. Le terme en ϵ dans l'équation de filtration macroscopique est donc nul.

Examinons maintenant le terme correctif suivant qui est cubique par rapport au gradient de pression \mathbf{J} . On note :

$$\forall \mathbf{u} \in W : a(\mathbf{v}^2(\mathbf{J}, \mathbf{J}', \mathbf{J}''), \mathbf{u}) = -b(\mathbf{v}^0(\mathbf{J}), \mathbf{v}^1(\mathbf{J}', \mathbf{J}''), \mathbf{u}) - b(\mathbf{v}^1(\mathbf{J}', \mathbf{J}''), \mathbf{v}^0(\mathbf{J}), \mathbf{u}) \quad (1.90)$$

En particulier pour $\mathbf{J} = \mathbf{e}_i$, $\mathbf{J}' = \mathbf{e}_j$, $\mathbf{J}'' = \mathbf{e}_k$ et $\mathbf{u} = \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_l)$, on a :

$$a(\mathbf{v}^2(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k), \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_l)) = -b(\mathbf{v}^0(\mathbf{e}_i), \mathbf{v}^1(\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k), \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_l)) - b(\mathbf{v}^1(\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k), \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_i), \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_l)) \quad (1.91)$$

En posant ensuite $\mathbf{J} = \mathbf{e}_l$ et $\mathbf{u} = \mathbf{v}^2(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k)$ dans (1.80) il vient :

$$a(\mathbf{v}^0(\mathbf{e}_l), \mathbf{v}^2(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k)) = \mathcal{K}_{lij}^2 \quad (1.92)$$

La symétrie de la forme bilinéaire a donne :

$$-b(\mathbf{v}^0(\mathbf{e}_i), \mathbf{v}^1(\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k), \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_l)) - b(\mathbf{v}^1(\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k), \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_i), \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_l)) = \mathcal{K}_{lij}^2 \quad (1.93)$$

Le deuxième terme de l'équation du dessus est nul compte tenu de la propriété (1.58). Il résulte donc que :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{K}_{lijk}^2 &= -b(\mathbf{v}^0(\mathbf{e}_i), \mathbf{v}^1(\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k), \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_l)) \\
 &= +b(\mathbf{v}^0(\mathbf{e}_i), \mathbf{v}^0(\mathbf{e}_l), \mathbf{v}^1(\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k)) \\
 &= -a(\mathbf{v}^1(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_l), \mathbf{v}^1(\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k))
 \end{aligned} \tag{1.94}$$

qui est une quantité strictement positive si $\mathbf{v}^1 \neq 0$. Le premier terme correctif à l'équation de Darcy est donc un terme cubique faisant intervenir la perméabilité \mathcal{K}_{ijkl}^2 .

1.6 Conclusion

Dans ce premier chapitre, nous avons présenté les approches par homogénéisation périodique pour la modélisation des écoulements de fluides en milieux microporeux saturés. L'écoulement est décrit par les équations de Navier-Stokes pour un fluide visqueux incompressible en régime stationnaire. Classiquement, aux faibles nombres de Reynolds, les approches asymptotiques permettent de retrouver le modèle linéaire de Darcy. La perméabilité Darcéenne est alors obtenue en résolvant un problème de Stokes sur la cellule irréductible. En considérant les termes d'ordre supérieur du développement asymptotique, la loi de filtration macroscopique est de nature polynomiale et contient en outre le modèle non linéaire de Forchheimer. Les résultats théoriques présentés dans ce chapitre montrent que :

- Les coefficients de la loi de Darcy généralisée sont obtenus en résolvant en cascade des problèmes linéaires de Stokes avec des termes sources qui dépendent des champs de vitesse calculés aux ordres précédents.
- La loi de filtration polynomiale est valable uniquement dans le domaine des petits nombres de Reynolds.
- La solution totale, obtenue en sommant tous les termes du développement asymptotique, peut être obtenue en résolvant les équations de Navier-Stokes sur la cellule irréductible sous des conditions de gradient de pression imposées et les conditions classiques de périodicité sur le bord de la cellule.
- La première correction à la relation linéaire de Darcy est un terme cubique et non quadratique comme proposé dans le modèle de Forchheimer. La perméabilité issue du terme quadratique est toujours nulle, y compris pour un matériau poreux anisotrope.

En quelle mesure la loi polynomiale permet-elle de reproduire véritablement les effets non linéaires d'origine inertiel. C'est à cette question que l'on souhaite répondre dans le prochain chapitre en implémentant numériquement les problèmes de Stokes en cascade et la solution complète de l'équation de Navier-Stokes puis en comparant ces résultats.

Chapitre 2

Etude numérique des effets non linéaires

Dans ce chapitre, on propose de résoudre en cascade les problèmes d'homogénéisation à partir d'un schéma de résolution utilisant la transformée de Fourier rapide (communément appelées méthodes FFT). Ces méthodes de résolution ont été introduites par Moulinec et Suquet, d'abord pour traiter les composites élastiques [67] puis les composites non linéaires [66]. Elles ont été plus récemment adaptées pour résoudre le problème d'écoulement de fluide régi par les équations de Stokes et sous des conditions de gradient de pression imposé [64] (problème d'ordre 0 dans la résolution en cascade du problème non linéaire [72]). Dans ce chapitre, on étend cet algorithme pour résoudre les problèmes d'homogénéisation à tous les ordres. Les solutions aux ordres supérieurs sont analysées dans le cas particulier d'un écoulement autour d'un réseau périodique de cylindres. Les résultats sont comparés avec une solution exacte du problème d'écoulement régi par les équations de Navier-Stokes et qui est obtenue par la méthode des éléments finis.

Dans ce chapitre, les calculs numériques et les équations sont établis en posant :

$$\mu = \rho = h = 1 \tag{2.1}$$

Ce qui conduit notamment, pour les variables adimensionnées du chapitre 1, à $V = \bar{V} = V^*$ et $G = \bar{G} = G^*$.

Dans ce cas, la loi de filtration macroscopique s'écrit :

$$V = - [\mathcal{K}_{ij}^0 G_j + \mathcal{K}_{ijk}^1 G_j G_k + \mathcal{K}_{ijkp}^2 G_j G_k G_p + \mathcal{K}_{ijkpq}^3 G_j G_k G_p G_q + \dots] \tag{2.2}$$

les résultats peuvent alors être supprimés pour un fluide de caractéristiques μ et ρ et un microstructure de dimension h en effectuant le changement suivant :

$$\begin{aligned} V &\longrightarrow \frac{\rho h}{\mu} V, \\ G &\longrightarrow \frac{\rho h^3}{\mu^2} G \end{aligned} \tag{2.3}$$

2.1 Equations intégrales des problèmes aux limites

Rappelons rapidement la forme générale des problèmes aux limites à résoudre sur la cellule élémentaire du milieu périodique :

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{v} - \nabla p - \mathbf{f} &= 0 & \text{dans } V_f, \\ \operatorname{div} \mathbf{v} &= 0 & \text{dans } V_f, \\ \mathbf{v} &= 0 & \text{sur } S, \end{aligned} \quad (2.4)$$

avec les conditions de périodicité pour les champs \mathbf{v} et p sur les faces opposées de la cellule élémentaire. Le terme source \mathbf{f} est donné par $\mathbf{f} = \mathbf{G}$ pour le problème à l'ordre 0 et vaut

$$\mathbf{f} = \sum_{k=0}^{k=n-1} \nabla^* \mathbf{v}^{n-k-1} \cdot \mathbf{v}^k \quad (2.5)$$

pour les problèmes aux ordres supérieurs.

Dans un premier temps, nous allons réécrire le système (2.4) sous une forme plus adaptée pour la mise en oeuvre des techniques de résolution basées sur la FFT. Pour cela, on définit par \mathbb{S} , le pseudo-tenseur de souplesse, qui s'écrit :

$$\mathbb{S} = \frac{1}{2\mu(\mathbf{x})} \mathbb{K} \quad \text{avec : } \mu(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{dans } V_f \\ h & \text{dans } V_s \end{cases} \quad (2.6)$$

où le tenseur \mathbb{K} est le projecteur qui à tout tenseur d'ordre deux $\boldsymbol{\sigma}$ associe $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{K} : \boldsymbol{\sigma}$, la partie déviatorique de $\boldsymbol{\sigma}$. Dans l'expression de $\mu(\mathbf{x})$, on a introduit une viscosité dynamique fictive h dans la partie solide. Le coefficient h est choisi très grand de manière à retrouver la condition $\underline{v} = 0$ dans la partie solide. Classiquement, lorsque l'on résout le problème de Stokes par la méthode des éléments finis, seule la partie fluide est discrétisée et la condition d'adhérence $\underline{v} = 0$ à l'interface fluide-solide apparaît comme une condition aux limites (que l'on écrit à l'aide de multiplicateurs de Lagrange ou avec un terme de pénalisation).

La méthode basée sur la FFT repose sur une discrétisation du problème sur une grille régulière. Les points de la grille appartenant à la phase solide ou fluide, on remplace la partie solide par un fluide de grande viscosité. Le coefficient h apparaît donc dans la méthode comme un terme de pénalisation pour retrouver la condition $\mathbf{v} = 0$ dans V_s .

Avec ces notations, le problème de Stokes (2.4) peut se réécrire sous la forme :

$$\begin{cases} \mathbf{d} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + \nabla^t \mathbf{v}) & \text{dans } V, \\ \mathbf{d} = \mathbb{S} : \boldsymbol{\sigma} & \text{dans } V, \\ \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{f} = 0 & \text{dans } V, \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} & \text{antipériodique,} \\ \mathbf{v} & \text{périodique} \end{cases} \quad (2.7)$$

Dans ces relations, le champ de vitesse \mathbf{v} , le taux de déformation \mathbf{d} et la contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ sont prolongés par continuité dans le volume V_s . La condition $\mathbf{v} = 0$ dans V_s est retrouvée en faisant tendre h vers l'infini dans l'expression de \mathbb{S} . Dans le système d'équations (2.7), le

terme source \mathbf{f} est également prolongé dans V_s . Dans la phase solide, l'expression de \mathbf{f} est déterminée par l'équilibre de la cellule :

$$\int_{\partial V} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} dS + \int_V \mathbf{f} dV = 0 \quad (2.8)$$

Le champ de contrainte étant périodique, et donc $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ antipériodique, la première intégrale est nulle. Il reste alors (en divisant l'équation ci-dessus par le volume de la cellule) :

$$\langle \mathbf{f} \rangle_V = 0 \quad (2.9)$$

Rappelons que pour le problème au premier ordre, \mathbf{f} est égal au gradient de pression macroscopique \mathbf{G} dans la phase fluide. Afin de se conformer à la condition ci-dessus, un terme constant est introduit dans la phase solide qui est défini par :

$$\mathbf{f} = -\frac{c_f}{c_s} \mathbf{G}, \quad (2.10)$$

où c_f et c_s sont les fractions volumiques de la phase fluide et de la phase solide. Le terme \mathbf{f} donné ci-dessus représente physiquement la force de traînée due à l'écoulement autour du solide poreux. Il résulte que \mathbf{f} peut s'écrire

$$\mathbf{f} = \left[I_f(\mathbf{x}) - \frac{c_f}{c_s} I_s(\mathbf{x}) \right] \mathbf{G}, \quad (2.11)$$

où $I_f(\mathbf{x})$ et $I_s(\mathbf{x})$ sont les fonctions caractéristiques des phases telles que :

$$I_f(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \text{dans } V_s \\ 1 & \text{dans } V_f \end{cases} \quad I_s(\mathbf{x}) = 1 - I_f(\mathbf{x}) \quad (2.12)$$

Considérons le problème à l'ordre deux. La condition (2.9) devient :

$$c_s \langle \mathbf{f} \rangle_{V_s} + c_f \langle \nabla \mathbf{v}^0 \cdot \mathbf{v}^0 \rangle_{V_f} = 0 \quad (2.13)$$

En utilisant le théorème de la divergence, la seconde intégrale dans la relation ci-dessus peut être partitionnée en une première intégrale sur les côtés de la cellule et une seconde intégrale sur l'interface fluide-solide :

$$\int_V v_{i,j}^0 v_j^0 dx = \int_{\partial V_f} v_i^0 v_j^0 n_j dx + \int_S v_i^0 v_j^0 n_j dx, \quad (2.14)$$

où l'on rappelle que ∂V_f est la portion du bord de la cellule traversée par le fluide et S est l'interface entre le solide et le fluide. L'intégrale sur ∂V_f est nulle puisque \mathbf{v}^0 est périodique (le terme $v_j^0 n_j$ est alors antipériodique) d'autre part la seconde intégrale est aussi nulle puisque le champ \mathbf{v}^0 prend la valeur 0 sur l'interface S . Il s'ensuit que, pour le problème à l'ordre deux, la condition d'équilibre (2.9) se réduit à $\langle \mathbf{f} \rangle_{V_s} = 0$ ce qui suggère de choisir $\mathbf{f} = 0$ dans la phase solide.

En prenant les termes d'ordre supérieur pour \mathbf{f} , on aboutit à un résultat identique. En conclusion, dans la phase solide, le terme source \mathbf{f} est défini par (2.11) pour le problème à l'ordre 0 (le problème de Darcy) et vaut 0 pour les problèmes d'ordres supérieurs. Les expressions de \mathbf{f} à tous les ordres sont données dans le tableau 2.1.

Ordre	f_i
ϵ^0	$\left[I_f(\mathbf{x}) - \frac{c_f}{c_s} I_s(\mathbf{x}) \right] G_i$
ϵ^1	$k_{il,j}^0 k_{jk}^0 G_k G_l$
ϵ^2	$k_{ik,j}^0 k_{j pq}^1 G_k G_p G_q + k_{jk}^0 k_{ipq,j}^1 G_k G_p G_q$
ϵ^3	$k_{ik,j}^0 k_{j l p q}^2 G_k G_l G_p G_q + k_{jk}^0 k_{il p q,j}^2 G_k G_l G_p G_q + k_{jkl}^1 k_{ipq,j}^1 G_k G_l G_p G_q$
ϵ^4	$k_{ik,j}^0 k_{j l p q h}^3 G_k G_l G_p G_q G_h + k_{jk}^0 k_{il p q h,j}^3 G_k G_l G_p G_q G_h + k_{jklp}^2 k_{iqh,j}^1 G_k G_l G_p G_q G_h$
\dots	
ϵ^n	$\sum_{k=0}^{n-1} \nabla^* \mathbf{v}^{n-k-1} \cdot \mathbf{v}^k$

TABLE 2.1 – Expressions des termes source \mathbf{f} aux différents ordres.

2.1.1 Formes intégrales des problèmes d'homogénéisation

Le système d'équations (2.7) est similaire au problème de composite élastique. Les équations diffèrent uniquement par la nature du chargement : un terme source \mathbf{f} pour le problème de Stokes, une déformation macroscopique pour le problème de composite élastique. Il est donc possible de réécrire les problèmes de Stokes sous la forme d'équations de Lippmann-Schwinger.

Parce que l'on souhaite utiliser l'inverse de \mathbb{S} , on introduit une compressibilité fictive k dans la phase fluide et solide et qui sera par la suite prise égale à $+\infty$. Ainsi on pose :

$$\mathbb{S} = \frac{1}{3k} \mathbb{J} + \frac{1}{2\mu(x)} \mathbb{K}, \quad (2.15)$$

où \mathbb{J} est le second projecteur pour les tenseurs d'ordre quatre isotropes,

$$\mathbb{J} = \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}, \quad (2.16)$$

où \mathbf{I} est l'identité d'ordre deux. L'inverse de \mathbb{S} , noté \mathbb{C} , s'écrit donc

$$\mathbb{C} = (\mathbb{S})^{-1} = 3k\mathbb{J} + 2\mu(x)\mathbb{K} \quad (2.17)$$

Avec ces notations, et en introduisant un milieu fictif, dit milieu de référence, de rigidité constante \mathbb{C}^0 , il vient pour le problème (2.7) :

$$\begin{cases} \mathbf{d} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + \nabla^t \mathbf{v}) & \text{dans } V, \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}^0 : \mathbf{d} + \boldsymbol{\tau} & \text{dans } V, \\ \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{f} = 0 & \text{dans } V, \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} & \text{antipériodique,} \\ \mathbf{v} & \text{périodique,} \end{cases} \quad (2.18)$$

où $\boldsymbol{\tau}$ est le tenseur de polarisation définit par :

$$\boldsymbol{\tau} = (\mathbb{C} - \mathbb{C}^0) : \mathbf{d} = \boldsymbol{\sigma} - \mathbb{C}^0 : \mathbf{d} \quad (2.19)$$

La solution du problème (2.18), pour $\boldsymbol{\tau}$ et \mathbf{f} imposés, s'écrit (cf. [64],[72]) :

$$\mathbf{d} = -\Gamma^0 * (\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\theta}), \quad (2.20)$$

où Γ^0 est l'opérateur de Green dont les composantes, dans l'espace de Fourier, sont :

$$\widehat{\Gamma}^0 = \frac{1}{\lambda_0 + 2\mu_0} \mathbb{E}_2 + \frac{1}{2\mu_0} \mathbb{E}_4, \quad (2.21)$$

où $\lambda_0 = k_0 - \frac{2\mu_0}{3}$ et où k_0 et μ_0 sont respectivement le coefficient de compressibilité et la viscosité dynamique du milieu de référence. Les tenseurs \mathbb{E}_2 et \mathbb{E}_4 sont les tenseurs d'ordre quatre de la base de Walpole [89, 90] dont on rappelle ci-dessous les éléments :

$$\begin{cases} \mathbb{E}_1 = \frac{1}{2} \mathbf{Q} \otimes \mathbf{Q}, & \mathbb{E}_2 = \mathbf{P} \otimes \mathbf{P} \\ \mathbb{E}_3 = \mathbf{Q} \underline{\otimes} \mathbf{Q} - \mathbb{E}_1, & \mathbb{E}_4 = \mathbf{Q} \underline{\otimes} \mathbf{P} + \mathbf{P} \underline{\otimes} \mathbf{Q} \\ \mathbb{E}_5 = \mathbf{P} \otimes \mathbf{Q}, & \mathbb{E}_6 = \mathbf{Q} \otimes \mathbf{P} \end{cases} \quad (2.22)$$

Dans les expressions ci-dessus les tenseurs d'ordre deux \mathbf{P} et \mathbf{Q} sont définis par :

$$\mathbf{P} = \frac{1}{|\boldsymbol{\xi}|^2} \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi}, \quad \mathbf{Q} = \mathbf{I} - \mathbf{P}. \quad (2.23)$$

Dans (2.26), $\boldsymbol{\theta}$ est défini dans l'espace de Fourier par

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}} = \frac{i}{|\boldsymbol{\xi}|} [(\mathbf{f} \cdot \boldsymbol{\xi}) \mathbf{P} - \mathbf{f} \otimes \boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi} \otimes \mathbf{f}], \quad (2.24)$$

et où la transformée de Fourier d'une fonction $F(\mathbf{x})$ est définie par :

$$\widehat{F}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{V} \int_V F(\mathbf{x}) \exp(-i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}) dV \quad (2.25)$$

Enfin, dans (2.20), le symbole "*" désigne le produit de convolution. En remplaçant dans l'équation (2.20) la polarisation $\boldsymbol{\tau}$ par l'expression (2.19), on obtient une équation intégrale pour le taux de déformation :

$$\mathbf{d} = -\Gamma^0 * [(\mathbb{C} - \mathbb{C}^0) : \mathbf{d} + \boldsymbol{\theta}]. \quad (2.26)$$

Cette équation intégrale est similaire à celle obtenue pour les composites élastiques, la différence provient du terme $\boldsymbol{\theta}$. L'équation (2.26) est linéaire pour le taux de déformation toutefois sa résolution est rendu difficile par la présence du produit de convolution. Une approche rapide et efficace consiste alors à développer la solution en série de Neumann et à calculer chacun des termes à partir d'un schéma itératif. C'est une solution qui a été initialement proposée par Brown [25] puis Kroner [48] et qui a véritablement été mise en oeuvre numériquement par Moulinec et Suquet [67].

C'est toutefois la forme duale de l'équation (2.26) que nous allons résoudre. Et c'est un schéma formulé en contrainte que nous allons utiliser pour résoudre les problèmes d'écoulement à tous les ordres. Effectivement, le schéma associé à l'équation (2.26) a une convergence très ralentie lorsque l'on augmente la valeur du coefficient h qui apparaît dans l'expression de $\mu(\mathbf{x})$ (cf. equation (2.6)), valeur qui par ailleurs doit être choisie très grande pour retrouver une vitesse nulle dans la phase solide.

En pratique il est préférable d'utiliser une formulation duale du problème, utilisant la contrainte pour inconnue et le tenseur de Green associé. Ainsi, en notant que

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\tau} + \mathbb{C}^0 : \mathbf{d}, \quad (2.27)$$

et en utilisant le résultat (2.26), il vient alors pour la contrainte

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\tau} - \mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\Gamma}^0 * [\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\theta}] \quad (2.28)$$

En notant ensuite que

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\sigma} - \mathbb{C}^0 : \mathbf{d} = \mathbb{C}^0 : (\mathbb{S}^0 - \mathbb{S}) : \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.29)$$

puis en introduisant le tenseur de Green pour les contraintes, noté $\boldsymbol{\Delta}^0$, et défini par

$$\boldsymbol{\Delta}^0 = \mathbb{C}^0 - \mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\Gamma}^0 : \mathbb{C}^0, \quad (2.30)$$

on obtient alors :

$$\boldsymbol{\sigma} = -\boldsymbol{\Delta}^0 * [(\mathbb{S} - \mathbb{S}^0) : \boldsymbol{\sigma}] - \mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\Gamma}^0 * \boldsymbol{\theta} \quad (2.31)$$

On pose dans la suite :

$$\mathbf{b} = -\mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\Gamma}^0 * \boldsymbol{\theta} \quad (2.32)$$

L'opérateur de Green en contrainte a pour expression, dans l'espace de Fourier,

$$\widehat{\boldsymbol{\Delta}}^0 = \frac{2\mu_0(3\lambda_0 + 2\mu_0)}{\lambda_0 + 2\mu_0} \mathbb{E}_1 + 2\mu_0 \mathbb{E}_3, \quad (2.33)$$

où λ_0 , μ_0 et les tenseurs d'ordre quatre \mathbb{E}_1 et \mathbb{E}_3 ont été introduits au début de cette section. Rappelons qu'une compressibilité fictive a été introduite pour faciliter les calculs. Il convient maintenant de prendre la limite $k_0 \rightarrow +\infty$ qui équivaut aussi à $\lambda_0 \rightarrow +\infty$. L'expression de l'opérateur de Green avec la limite $\lambda_0 \rightarrow +\infty$ est

$$\boldsymbol{\Delta}^0 = 2\mu_0 [\mathbf{Q} \otimes \mathbf{Q} + \mathbf{Q} \overline{\otimes} \mathbf{Q}], \quad (2.34)$$

tandis que le tenseur de souplesse du milieu de référence vaut

$$\mathbb{S}^0 = \frac{1}{2\mu_0} \mathbb{K}. \quad (2.35)$$

Dans l'expression de \mathbf{b} la limite $\lambda_0 \rightarrow +\infty$ donne :

$$\widehat{\mathbf{b}} = - \lim_{\lambda \rightarrow +\infty} \mathbb{C}^0 : \widehat{\boldsymbol{\Gamma}}^0 : \widehat{\boldsymbol{\theta}} = -\boldsymbol{\Omega} \cdot \widehat{\mathbf{f}}, \quad (2.36)$$

où les composantes du tenseur d'ordre trois $\boldsymbol{\Omega}$ sont définies par

$$\Omega_{ijk}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{i}{|\boldsymbol{\xi}|} [\delta_{ij} \bar{\xi}_k + \delta_{ik} \bar{\xi}_j + \delta_{jk} \bar{\xi}_i - 2\bar{\xi}_i \bar{\xi}_j \bar{\xi}_k], \quad \bar{\boldsymbol{\xi}} = \boldsymbol{\xi} / |\boldsymbol{\xi}| \quad (2.37)$$

Enfin, dans l'expression de \mathbb{S} , on prend la limite $k \rightarrow +\infty$ qui redonne l'expression (2.6).

2.2 Intégration numérique par transformée de Fourier rapide

On présente maintenant le schéma de résolution basé sur la FFT pour le calcul aux différents ordres de la solution des problèmes d'homogénéisation. La forme générale du schéma itératif est présentée dans la section 2.2.1. Les détails plus techniques liés à l'implémentation du schéma sont donnés en section 2.2.2. Enfin, en section 2.2.3, on discute du choix du milieu de référence et du critère de convergence.

2.2.1 Résolution par un schéma itératif

L'équation intégrale (2.31) avec (2.32) peut se mettre sous la forme simplifiée suivante :

$$\boldsymbol{\sigma} + \mathbb{Z} \bullet \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{b} \quad (2.38)$$

où $\mathbb{Z} \bullet \boldsymbol{\sigma}$ est l'opération linéaire qui à tout $\boldsymbol{\sigma}$ associe :

$$\mathbb{Z} \bullet \boldsymbol{\sigma} = \Delta^0 * [(\mathbb{S} - \mathbb{S}^0) : \boldsymbol{\sigma}] \quad (2.39)$$

L'inversion du système linéaire (2.38) est difficile à cause du produit de convolution avec l'opérateur de Green. L'idée initialement proposée par [25, 48] est de développer la solution en série :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{b} - \mathbb{Z} \bullet \mathbf{b} + \mathbb{Z} \bullet \mathbb{Z} \bullet \mathbf{b} - \mathbb{Z} \bullet \mathbb{Z} \bullet \mathbb{Z} \bullet \mathbf{b} + \dots \quad (2.40)$$

et qui converge si le rayon spectral de l'opérateur \mathbb{Z} est inférieur à 1. Chaque terme de la série de Neumann peut être obtenu à partir du schéma itératif suivant :

$$\boldsymbol{\sigma}^{i+1} = \mathbf{b} - \mathbb{Z} \bullet \boldsymbol{\sigma}^i, \quad (2.41)$$

et que l'on initialise avec la valeur $\boldsymbol{\sigma}^{i=1} = \mathbf{b}$.

On peut apporter une simplification au schéma itératif en notant que, pour tout champ de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ à l'équilibre avec le terme source \mathbf{f} , on a

$$\Delta^0 : \mathbb{S}^0 : \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{b}, \quad (2.42)$$

Il vient donc pour le schéma itératif :

$$\boldsymbol{\sigma}^{i+1} = \boldsymbol{\sigma}^i - \Delta^0 * [\mathbb{S} : \boldsymbol{\sigma}^i] \quad (2.43)$$

Les détails pratiques de l'intégration numérique de ce schéma sont présentés dans la section qui suit.

2.2.2 Discrétisation du problème aux limites

Le produit de convolution entre l'opérateur de Green Δ^0 et le taux de déformation $\mathbf{d}^i = \mathbb{S} : \boldsymbol{\sigma}^i$ est réalisé dans l'espace de Fourier ce qui présente deux avantages. D'abord l'opérateur de Green est connu dans l'espace de Fourier à partir des vecteurs d'onde $\boldsymbol{\xi}$

(cf. equation (2.33)). Par ailleurs, le produit de Δ^0 et \mathbf{d}^i devient local dans l'espace de Fourier.

Dans le domaine de Fourier le schéma itératif s'écrit

$$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}^{i+1} = \widehat{\boldsymbol{\sigma}}^i - \widehat{\Delta}^0 : \widehat{\mathbf{d}}^i \quad (2.44)$$

On discrétise le problème avec $2N$ vecteurs d'onde $\boldsymbol{\xi}_n$ définis par

$$\boldsymbol{\xi}_n = 2\pi n \boldsymbol{\zeta}, \quad n = 0, \pm 1, \dots, \pm \infty, \quad \zeta_i = \frac{1}{h_i} \quad (2.45)$$

où h_1, h_2, h_3 sont les dimensions de la cellule élémentaire selon chaque direction de l'espace. Bien sûr, pour les problèmes tridimensionnels, il conviendrait d'utiliser en toute rigueur trois indices n_1, n_2 , et n_3 pour désigner, le nombre d'onde dans chacune des directions de l'espace. Toutefois nous n'utiliserons qu'un seul indice n par soucis de simplicité des écritures. Toujours pour des raisons de simplicité des expressions mathématiques, on notera $\widehat{F}_n = \widehat{F}(\boldsymbol{\xi}_n)$ la transformée de Fourier de la fonction $F(\mathbf{x})$ calculée avec le vecteur d'onde $\boldsymbol{\xi}_n$. On note également

$$F_n = F(\mathbf{x}_n) = \mathcal{F}^{-1}(\widehat{F}_n) \quad (2.46)$$

qui est la transformée de Fourier inverse de \widehat{F}_n . Les valeurs F_n pour $n = -N..N - 1$ sont les valeurs de la fonction $F(\mathbf{x})$ sur une grille régulière de points notés \mathbf{x}_n . Sous la forme discrétisée, le schéma (2.44) devient

$$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^{i+1} = \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^i - \widehat{\Delta}_n^0 : \widehat{\mathbf{d}}_n^i \quad (2.47)$$

A chaque itération, il faut donc calculer le taux de déformation $\widehat{\mathbf{d}}_n^i$ à partir du champ de contrainte $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^i$. Cette étape, qui nécessite le produit de la contrainte avec le tenseur de souplesse \mathbb{S} est réalisé dans l'espace réel :

$$\mathbf{d}_n^i = \mathbb{S}_n : \boldsymbol{\sigma}_n^i, \quad (2.48)$$

où \mathbf{d}_n^i et $\boldsymbol{\sigma}_n^i$ désignent les transformées de Fourier inverse des quantités $\widehat{\mathbf{d}}_n^i$ et $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^i$ et où \mathbb{S}_n est défini par :

$$\mathbb{S}_n = \left[I_f(\mathbf{x}_n) + \frac{1}{h} I_s(\mathbf{x}_n) \right] \frac{1}{2\mu} \mathbb{K} \quad (2.49)$$

Ici, $I_f(\mathbf{x})$ et $I_s(\mathbf{x})$ sont les fonctions caractéristiques des phases déjà introduites dans l'équation (2.12).

A chaque itération, le taux de déformation $\widehat{\mathbf{d}}_n^i$ dans la relation (2.47) est calculé en effectuant successivement :

- la transformée de Fourier discrete inverse de la contrainte $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^i$,
- le produit avec le tenseur \mathbb{S}_n selon la relation (2.48),
- la transformée de Fourier discrete du taux de déformation \mathbf{d}_n^i

La transformée de Fourier discrete et la transformée de Fourier discrete inverse sont effectués avec l'algorithme FFT. Dans notre code de calcul, c'est un module préexistant dans MATLAB qui est utilisé. Le tenseur \mathbb{S}_n est calculé une fois, stocké puis utilisé durant le processus itératif.

Il existe une autre manière pour effectuer le produit de \mathbb{S} par la contrainte $\boldsymbol{\sigma}^i$, elle repose sur l'utilisation des fonctions de forme utilisées par Nemat-Nasser [70] pour établir des expressions approchées des propriétés homogénéisées des composites élastiques et qui seront présentées dans le chapitre suivant. Ces fonctions de forme ont par la suite été utilisées par Bonnet [21] dans le cadre des approches FFT. Plus récemment dans [65], il a été prouvé que l'utilisation de ces fonctions de forme permet garantir le calcul de bornes pour les propriétés homogénéisées.

La transformée de Fourier discrete du tenseur \mathbb{S} s'écrit

$$\widehat{\mathbb{S}}_n = \left[\widehat{\mathbb{I}}_f(\boldsymbol{\xi}_n) + \frac{1}{h} \widehat{\mathbb{I}}_s(\boldsymbol{\xi}_n) \right] \frac{1}{2\mu} \mathbb{K}. \quad (2.50)$$

Dans laquelle $\widehat{\mathbb{I}}_f(\boldsymbol{\xi}_n)$ et $\widehat{\mathbb{I}}_s(\boldsymbol{\xi}_n)$ sont les transformées de Fourier discrètes des fonctions caractéristiques des phases. Par ailleurs, en utilisant la propriété

$$\mathbb{I}_f(\mathbf{x}) + \mathbb{I}_s(\mathbf{x}) = 1 \quad (2.51)$$

Il vient alors pour tout $n \neq 0$:

$$\widehat{\mathbb{I}}_f(\boldsymbol{\xi}_n) + \widehat{\mathbb{I}}_s(\boldsymbol{\xi}_n) = 0 \quad (2.52)$$

et lorsque $n = 0$ alors $\widehat{\mathbb{I}}_f(\boldsymbol{\xi}_n) = c_f$, $\widehat{\mathbb{I}}_s(\boldsymbol{\xi}_n) = c_s$ où c_f et c_s représentent les fractions volumiques des deux phases, fluide et solide. On a donc

$$\widehat{\mathbb{I}}_f(\boldsymbol{\xi}_n) = \delta_n - \widehat{\mathbb{I}}_s(\boldsymbol{\xi}_n) \quad (2.53)$$

où δ_n est nul pour toute valeur de n sauf pour $n = 0$ où $\delta_0 = 1$. Dans l'espace de Fourier, le produit de \mathbb{S} par $\boldsymbol{\sigma}^i$ devient non local et peut s'écrire (en utilisant les relations (2.50) et (2.53)) :

$$\mathcal{F}(\mathbb{S} : \boldsymbol{\sigma}^i) = \frac{1}{2\mu} \left[\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^i + \left(\frac{1}{h} - 1 \right) \widehat{\mathbb{I}}_s(\boldsymbol{\xi}_n) * \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^i \right], \quad (2.54)$$

et qui nécessite le produit de convolution de $\widehat{\mathbb{I}}_s(\boldsymbol{\xi}_n)$ par $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^i$. A nouveau, c'est avec l'algorithme FFT que l'on réalise ce produit de convolution. L'utilisation des fonctions de forme présente véritablement un intérêt que lorsque des expressions analytiques sont disponibles pour $\widehat{\mathbb{I}}_s(\boldsymbol{\xi}_n)$. C'est le cas notamment lorsque l'on considère des solides de forme sphérique, cylindrique, cubique... Dans le cas contraire, pour des géométries quelconques, $\widehat{\mathbb{I}}_s(\boldsymbol{\xi}_n)$ peut être calculé numériquement mais représente un coût numérique important.

Finalement, il reste à calculer le premier terme de la série \mathbf{b} qui est défini par l'équation (2.36) dans laquelle le terme source est défini dans le tableau 2.1 aux différents ordres. Au premier ordre, la transformée de Fourier de \mathbf{f} est :

$$\widehat{\mathbf{f}}_n = \left[\widehat{\mathbb{I}}_f(\boldsymbol{\xi}_n) - \frac{c_f}{c_s} \widehat{\mathbb{I}}_s(\boldsymbol{\xi}_n) \right] \mathbf{G} = -\frac{1}{c_s} \widehat{\mathbb{I}}_s(\boldsymbol{\xi}_n) \mathbf{G}, \quad (2.55)$$

pour tout $n \neq 0$ et vaut $\widehat{\mathbf{f}}_n = 0$ si $n = 0$. A l'ordre suivant, le terme source dépend du champ de vitesse calculé au premier ordre (nous reviendrons plus tard sur le calcul du champ de vitesse). Le terme source à l'ordre deux est défini par

$$\mathbf{f} = \nabla \mathbf{v}^0 \cdot \mathbf{v}^0 \quad (2.56)$$

Le principe de calcul de \mathbf{f} à l'ordre un est résumé dans le tableau 2.2. On procède de

Etape 1 :	$\mathbf{v}_n^0 = \mathcal{F}^{-1}(\widehat{\mathbf{v}}_n^0),$
Etape 2 :	$(\nabla \mathbf{v}^0)_n = \mathcal{F}^{-1}(i\widehat{\mathbf{v}}_n^0 \otimes \boldsymbol{\xi}_n),$
Etape 3 :	$\mathbf{f}_n = (\nabla \mathbf{v}^0)_n \cdot \mathbf{v}_n^0,$
Etape 4 :	$\widehat{\mathbf{f}}_n = \mathcal{F}(\mathbf{f}_n),$

TABLE 2.2 – Calcul du terme source \mathbf{f} pour le problème d'homogénéisation à l'ordre un.

manière similaire pour calculer \mathbf{f} aux ordres supérieurs.

Le schéma itératif appliqué est résumé dans le tableau 2.3. Il reste encore à préciser le test

Etape i=1 :	$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^{i=1} = -\widehat{\boldsymbol{\Omega}}_n \cdot \widehat{\mathbf{f}}_n, \quad \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_0^{i=1} = 0$
	$\widehat{\mathbf{d}}_n^1 = \widehat{\mathbb{S}}_n * \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^{i=1}$
Etape i :	\mathbf{d}_n^i et $\boldsymbol{\sigma}_n^i$ sont connus
	test de convergence
	$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^{i+1} = \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^i - \widehat{\boldsymbol{\Delta}}_n^0 : \widehat{\mathbf{d}}_n^i$
	$\widehat{\mathbf{d}}_n^{i+1} = \widehat{\mathbb{S}}_n * \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_n^{i+1}$

TABLE 2.3 – Schéma de résolution en contrainte.

de convergence que nous utilisons pour stopper l'itération, le choix du milieu de référence ou plutôt la valeur de μ_0 et enfin comment la vitesse est déterminée à chaque ordre des problèmes d'homogénéisation. Le choix de μ_0 et du test de convergence est discuté dans la section qui suit. On discute maintenant du calcul du champ de vitesse.

A la convergence du schéma itératif, le taux de déformation $\widehat{\mathbf{d}}_n^i$ est un champ compatible, c'est à dire que pour tout $n \neq 0$, on a :

$$\widehat{\boldsymbol{\Delta}}_n^0 : \widehat{\mathbf{d}}_n^i = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \widehat{\mathbf{d}}_n^i = \frac{i}{2}(\widehat{\mathbf{v}}_n \otimes \boldsymbol{\xi}_n + \boldsymbol{\xi}_n \otimes \widehat{\mathbf{v}}_n) \quad (2.57)$$

Ainsi, en utilisant la condition d'incompressibilité

$$\widehat{\mathbf{v}}_n \cdot \boldsymbol{\xi}_n = 0, \quad (2.58)$$

on peut alors déterminer le champ de vitesse par la relation

$$\widehat{\mathbf{v}}_n = -\frac{2i}{|\boldsymbol{\xi}_n|^2} \widehat{\mathbf{d}}_n \cdot \boldsymbol{\xi}_n, \quad \forall n \neq 0 \quad (2.59)$$

Le champ de vitesse est défini par ses coefficients de Fourier pour toutes les valeurs de $\boldsymbol{\xi}_n$ à l'exception de $n = 0$. Le champ de vitesse pour $n = 0$ représente la moyenne de ce champ sur le volume de la cellule élémentaire

$$\widehat{\mathbf{v}}_0 = \langle \mathbf{v} \rangle_V = \mathbf{V} \quad (2.60)$$

Le champ de vitesse à chaque ordre peut être décomposé sous la forme

$$\mathbf{v} = \mathbf{V} + \mathbf{v}^*, \quad (2.61)$$

où \mathbf{v}^* est champ périodique à moyenne nulle sur la cellule. Le champ \mathbf{v}^* peut être calculé par

$$\begin{cases} \widehat{\mathbf{v}}_n^* = -\frac{2i}{|\boldsymbol{\xi}_n|^2} \widehat{\mathbf{d}}_n \cdot \boldsymbol{\xi}_n & \forall n \neq 0 \\ \widehat{\mathbf{v}}_n^* = 0 & n = 0 \end{cases} \quad (2.62)$$

La valeur de \mathbf{V} est ensuite obtenue en vérifiant la condition $\mathbf{v} = 0$ dans la phase solide. Effectivement par intégration du taux de déformation, on obtient un champ de vitesse qui est défini à une constante près. Le champ périodique \mathbf{v}^* est à moyenne nulle sur la cellule et prend une valeur constante non nulle dans la phase solide. On détermine donc \mathbf{V} de manière à retrouver la condition $\mathbf{v} = 0$ dans la phase solide. Ainsi, on peut calculer \mathbf{V} par la relation

$$\mathbf{V} = -\mathbf{v}^*(\mathbf{x}_n \in V_s) \quad (2.63)$$

En pratique, on calcule \mathbf{V} en choisissant un point à l'intérieur de la phase solide qui ne se situe pas trop près de l'interface solide-fluide.

2.2.3 Choix du milieu de référence et du critère de convergence

2.2.3.1 Choix du test de convergence

Lorsque le schéma converge on a $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}^{i+1} = \widehat{\boldsymbol{\sigma}}^i$ ce qui équivaut dans la relation (2.47), à :

$$\widehat{\boldsymbol{\Delta}}^0 : \widehat{\mathbf{d}}^i = 0 \quad (2.64)$$

Le tenseur de Green en contrainte est défini par la relation (2.34), dans laquelle les tenseurs d'ordre quatre \mathbb{E}_1 et \mathbb{E}_3 sont des projecteurs. Il résulte donc que la condition (2.64) est satisfaite pour

$$\mathbb{E}_1 : \widehat{\mathbf{d}}^i = 0, \quad \mathbb{E}_3 : \widehat{\mathbf{d}}^i = 0 \quad (2.65)$$

En utilisant les relations (2.22) on en déduit que :

$$\mathbf{Q} \cdot \widehat{\mathbf{d}}^i \cdot \mathbf{Q} = 0 \quad (2.66)$$

en notant que $\mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\xi} = 0$, on observe que l'équation ci-dessus est satisfaite par tout champ de la forme

$$\widehat{\mathbf{d}}^i = \frac{1}{2}(\widehat{\mathbf{v}} \otimes \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\xi} \otimes \widehat{\mathbf{v}}) \quad (2.67)$$

si bien que les conditions (2.64), (2.65) et (2.66) expriment toutes la condition de compatibilité pour le taux de déformation. On introduit dans la suite les définitions suivantes :

$$\mathbb{Q} = \mathbb{E}_1 + \mathbb{E}_3, \quad \mathbb{P} = \mathbb{E}_2 + \mathbb{E}_4 \quad (2.68)$$

Les tenseurs $\mathbb{E}_1, \mathbb{E}_2, \mathbb{E}_3$ et \mathbb{E}_4 étant des projecteurs, les tenseurs \mathbb{P} et \mathbb{Q} sont tous deux également des projecteurs :

$$\forall \underline{\boldsymbol{\xi}} \neq 0 : \begin{cases} \mathbb{P} : \mathbb{P} = \mathbb{P}, & \mathbb{Q} : \mathbb{Q} = \mathbb{Q} \\ \mathbb{P} : \mathbb{Q} = \mathbb{Q} : \mathbb{P} = 0 \\ \mathbb{I} = \mathbb{P} + \mathbb{Q} \end{cases} \quad (2.69)$$

La condition de compatibilité peut donc s'exprimer sous la forme :

$$\forall \underline{\boldsymbol{\xi}} \neq 0 : \quad \mathbb{P} : \widehat{\mathbf{d}}^i = \widehat{\mathbf{d}}^i \quad \text{ou} \quad \mathbb{Q} : \widehat{\mathbf{d}}^i = 0 \quad (2.70)$$

On peut noter que cette condition de compatibilité, contrairement à (2.64), ne fait pas intervenir le milieu de référence. Dans notre schéma itératif, nous utilisons le critère de convergence

$$\sqrt{\sum_{n=N}^{n=N-1} \|\mathbb{Q}_n : \widehat{\mathbf{d}}_n\|^2} < \epsilon \quad (2.71)$$

dans lequel $\mathbb{Q}_n = \mathbb{Q}(\boldsymbol{\xi}_n)$ et la valeur 10^{-3} est utilisée pour ϵ .

2.2.3.2 Choix du milieu de référence

Comme déjà évoqué dans une section précédente, le schéma itératif converge si le rayon spectral de l'opérateur \mathbb{Z} est inférieur à 1 (cf. relation (2.39) pour la définition de \mathbb{Z}). Effectuons à nouveau l'analogie avec les composites élastiques pour déterminer le milieu de référence adéquat.

Pour un composite élastique incompressible, de module de cisaillement $\mu(\mathbf{x})$, la condition de convergence est donnée par (voir par exemple [62]) :

$$\frac{1}{\mu_0} > \frac{1}{2} \max_{\mathbf{x}} \left(\frac{1}{\mu(\mathbf{x})} \right) \quad (2.72)$$

Pour le problème d'écoulement $\mu(\mathbf{x})$ prends la valeur 1 dans la phase fluide et la valeur h où h est choisi très grand. La valeur maximale est donc 1 et la condition s'écrit :

$$\mu_0 < 2 \quad (2.73)$$

Le milieu de référence optimal, c'est à dire conduisant au plus petit nombre d'itérations à convergence du schéma, peut être choisi avec la relation (toujours pour un composite incompressible de module de cisaillement $\mu(\mathbf{x})$) :

$$\frac{1}{\mu_0} = \frac{1}{2} \left[\max_{\mathbf{x}} \left(\frac{1}{\mu(\mathbf{x})} \right) + \min_{\mathbf{x}} \left(\frac{1}{\mu(\mathbf{x})} \right) \right] \quad (2.74)$$

Pour le problème d'écoulement cela conduit à la relation

$$\mu_0 = \frac{2h}{1+h} \quad (2.75)$$

qui est proche de la valeur $\mu_0 = 2$ lorsque h est très grand.

Vérifions ces résultats avec ceux issus des simulations numériques. Sur la figure 2.1 on représente le nombre d'itération à convergence du schéma itératif en fonction de μ_0 pour les problèmes aux ordres 0, 1 et 2 et pour un réseau périodique de cylindres de rayon $R = 0.25$ (voir figure 2.2). On observe que μ_0 est une fonction lentement décroissante puis croît rapidement autour de la valeur $\mu_0 = 2$ et diverge pour une valeur proche de $\mu_0 = 2$ par valeur supérieure. Ce résultat est conforme avec le résultat théorique (2.73). Le fait que μ_0 ne diverge pas exactement à la valeur $\mu_0 = 2$ doit être attribué à la discrétisation du problème avec un nombre fini de vecteurs d'onde. S'agissant maintenant du milieu de référence optimal, on observe sur la figure 2.1 que les courbes atteignent un minimum pour une valeur de l'ordre 1.8 ou 1.9. Pour les simulations numériques nous avons considéré la valeur $\mu_0 = 1.5$ qui est proche du minimum et qui est suffisamment éloignée de la singularité en $\mu_0 \simeq 2$.

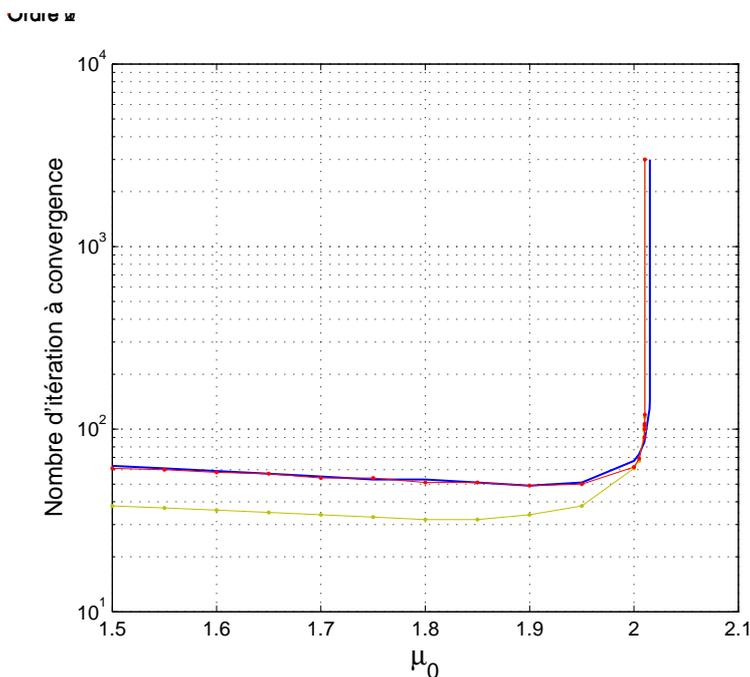


FIGURE 2.1 – Nombre d'itération à convergence du schéma itératif à l'ordre ϵ^0 , l'ordre ϵ^1 et l'ordre ϵ^2 en fonction de μ_0 pour le réseau périodique de cylindres de section circulaire de rayon $R = 0.25$.

2.3 Applications et comparaisons avec la solution complète du problème

Dans cette section on se propose d'appliquer la méthode de résolution basée sur la FFT pour résoudre en cascade les problèmes d'homogénéisation et déterminer les coefficients constitutifs de la loi d'écoulement macroscopique. Nous considérons des problèmes plans correspondant à des écoulements autour de cylindres de sections circulaires ou carrées. Ces problèmes ont été largement étudiés dans la littérature pour déterminer la perméabilité de Darcy. En particulier on peut noter les travaux de Sparrow and Loeffler [83], Banerjee and Hadaller [12], Sangani and Acrivos [80], Drummond and Tahir [33], Larson and Higdon [50, 51], Wang [91], Boutin [24], and Idris [42]. Le problème d'homogénéisation au premier ordre y est alors résolu à l'aide de méthodes semi-analytiques ou alors la méthode des éléments finis. Il n'existe pas de résultats similaires pour le calcul des perméabilités aux ordres supérieurs. Le problème d'écoulement autour de cylindres ne correspond pas à une véritable microstructure de milieu poreux, il permet toutefois d'estimer l'influence des termes d'ordre supérieur et la capacité de l'approche faiblement non linéaire (basée sur la résolution en cascade des problèmes de Stokes) à rendre compte des effets non linéaires. Afin de pouvoir évaluer précisément la solution faiblement non linéaire, celle-ci est comparée avec une solution de référence qui est obtenue en résolvant par la méthode des éléments finis le problème de la cellule élémentaire avec un écoulement de Navier-Stokes. Cette solution est obtenue avec le logiciel COMSOL.

2.3.1 Présentation des problèmes et perméabilités macroscopiques

Pour nos applications, on considère deux types de microstructures représentées sur la figure 2.2. Chaque microstructure est définie par une cellule élémentaire contenant un solide circulaire de rayon R (à gauche) et une inclusion carrée de côté a (à droite). Les calculs sont réalisés sur une cellule élémentaire, carrée, de côté $h = 1$ et en utilisant les fonctions de forme. Dans les relations ci-dessous on donne les expressions des fonctions de forme pour le disque de rayon R et le carré de côté a :

$$\begin{aligned}
 & \bullet \text{ disque : } \widehat{\mathbf{I}}_s(\underline{\xi}) = \frac{2\pi R}{|\underline{\xi}|} J_0(R|\underline{\xi}|), \\
 & \bullet \text{ carré : } \widehat{\mathbf{I}}_s(\underline{\xi}) = \frac{\sin(a\xi_1) \sin(a\xi_2)}{\xi_1 \xi_2},
 \end{aligned} \tag{2.76}$$

où J_0 est la fonction de Bessel de première espèce.

Les calculs sont réalisés en considérant une grille de 128×128 vecteurs d'onde. Concernant les calculs avec la méthode d'éléments finis complets, environ 9000 éléments triangulaires ont été utilisés.

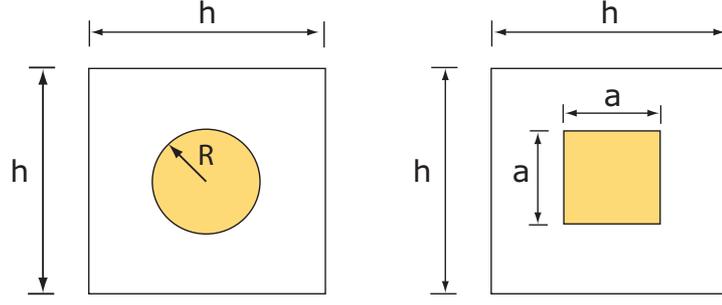


FIGURE 2.2 – Cellules élémentaires des milieux périodiques définis par un réseau de cylindres de section circulaire de rayon R et carrée de côté a .

La méthode basée sur la FFT fournit les champs de vitesse aux différents ordres et dont on peut déduire les perméabilités \mathbf{K}^0 , \mathbf{K}^1 , \mathbf{K}^2 , etc. qui sont des tenseurs d'ordre deux, trois, quatre etc. Il apparaît donc que la loi de filtration macroscopique fait apparaître un très grand nombre de coefficients et donc un très grand nombre de calculs sur la cellule élémentaire sont à réaliser pour leur identification. Il est possible de réduire très significativement le nombre de ces coefficients en considérant les symétries de la cellule élémentaire. Pour les problèmes décrit en figure 2.2, la cellule présente les symétries suivantes :

- les symétries par les réflexions d'axes Ox_1 et Ox_2 ,
- les symétries par toute rotation d'un angle $\pi/2$ autour de l'axe Ox_3 .

Les deux réflexions impliquent que tous les tenseurs d'ordre impaire sont nuls (voir section 1.5.2). Seuls restent les tenseurs \mathbf{K}^0 , \mathbf{K}^2 , \mathbf{K}^4 dans la loi macroscopique.

Pour déterminer plus précisément les relations qui existent entre les coefficients, on peut utiliser les théorèmes de représentation. En particulier, pour les problèmes bidimensionnels, la représentation complète des fonctions à variables vectorielles est fournie par les travaux de Zheng [96]. La loi macroscopique donne la vitesse macroscopique en fonction du gradient de pression imposé \mathbf{G} . On recherche la représentation irréductible de la fonction $\mathbf{V}(\mathbf{G})$. En utilisant les notations introduites dans [96], la classe de symétrie est " C_{4v} ". Dans ce cas, la fonction $\mathbf{V}(\mathbf{G})$ admet pour représentation :

$$\mathbf{V}(\mathbf{G}) = F(I_1, I_2)\mathbf{G} + G(I_1, I_2)\mathbf{\Pi} \quad (2.77)$$

dans laquelle I_1 et I_2 sont les deux invariants scalaires définis par :

$$I_1 = G_1^2 + G_2^2, \quad I_2 = G_1^2 G_2^2 \quad (2.78)$$

où G_1 et G_2 sont les composants du vecteur \mathbf{G} . Ici, $F(I_1, I_2)$ et $G(I_1, I_2)$ sont deux fonctions arbitraires de I_1 et I_2 et le vecteur $\mathbf{\Pi}$ a pour composantes :

$$\mathbf{\Pi}_i = \begin{pmatrix} G_1^3 \\ G_2^3 \end{pmatrix} \quad (2.79)$$

La solution du problème complet, c'est à dire nécessitant la résolution des équations de Navier-Stokes, conduit donc à une loi de filtration macroscopique qui s'écrit sous la forme

générale (2.77) et dans laquelle les fonctions $F(I_1, I_2)$ et $G(I_1, I_2)$ sont indéterminées. Si l'on considère le problème d'écoulement avec l'analyse faiblement non linéaire, alors la solution macroscopique est obtenue en effectuant un développement en série de l'expression (2.77) par rapport au gradient de pression. Ce développement donne aux différents ordres :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{V}^0(\mathbf{G}) &= k_0 \mathbf{G}, \\
 \mathbf{V}^1(\mathbf{G}) &= 0, \\
 \mathbf{V}^2(\mathbf{G}) &= k_2 I_1 \mathbf{G} + k'_2 \mathbf{\Pi}, \\
 \mathbf{V}^3(\mathbf{G}) &= 0, \\
 \mathbf{V}^4(\mathbf{G}) &= k_4 I_1^2 \mathbf{G} + k'_4 I_2 \mathbf{G} + k''_4 I_1 \mathbf{\Pi}, \\
 \mathbf{V}^5(\mathbf{G}) &= 0, \\
 \mathbf{V}^6(\mathbf{G}) &= k_6 I_1^4 \mathbf{G} + k''_6 I_1 I_2 \mathbf{G} + k'''_6 I_1^2 \mathbf{\Pi} + k''''_6 I_2 \mathbf{\Pi}, \\
 &\dots
 \end{aligned} \tag{2.80}$$

Dans les applications numériques proposées dans cette section, on développe la solution jusqu'à $\mathbf{V}^4(\mathbf{G})$ ce qui requiert l'identification des coefficients k_0 , k_2 , k'_2 , k_4 , k'_4 et k''_4 à l'aide de l'algorithme de FFT.

Le développement à l'ordre cinq nécessite l'identification de six coefficients. Six problèmes élémentaires sont donc résolus :

- Un problème à l'ordre 0 pour le calcul de k_0 . On impose $G_1 = 1$ et $G_2 = 0$ et on détermine la composante V_1^0 du champ de vitesse macroscopique \mathbf{V}^0 .
- Deux problèmes à l'ordre deux pour le calcul de k_2 et k'_2 . On pose donc successivement $G_1 = 1, G_2 = 0$ puis $G_1 = 1, G_2 = 1$ et on détermine la composante V_1^2 du champ de vitesse macroscopique \mathbf{V}^2 .
- Trois problèmes à l'ordre quatre pour le calcul de k_4, k'_4 et k''_4 . On pose donc successivement $G_1 = 1, G_2 = 0$ puis $G_1 = 1, G_2 = 1$ et enfin $G_1 = 1, G_2 = 2$ et on détermine la composante V_1^4 du champ de vitesse macroscopique \mathbf{V}^4 .

Les résultats numériques sont présentés dans la section qui suit.

2.3.2 Propriétés homogénéisées

Les calculs numériques pour le réseau de cylindres de sections circulaires sont menés en considérant les rayons $R = 0.05$, $R = 0.25$ et $R = 0.45$. Sur les figures 2.3, 2.4 et 2.5 on a représenté la distribution du champ de vitesse pour un cylindre de rayon $R = 0.25$. Sur la figure 2.3 on donne la distribution des composantes v_1 et v_2 pour le problème à l'ordre ϵ^0 et pour $G_1 = 1, G_2 = 0$. Sur les figures 2.4 et 2.4 on donne les résultats pour les problèmes d'ordre ϵ^1 et ϵ^2 et toujours pour $G_1 = 1, G_2 = 0$. A partir de ces solution élémentaire on peut déterminer les valeurs des coefficients $k_0, k_2, k'_2, k_4, k'_4$ et k''_4 . Les valeurs obtenues sont regroupées dans le tableau 2.4. Les coefficients étant déterminés on peut tracer les variations de la loi d'écoulement de Darcy non linéaire, $\mathbf{V}(\mathbf{G})$, avec le gradient de pression \mathbf{G} . Ainsi, sur la figure 2.6, on représente les variations de la composante V_1 du champ de vitesse macroscopique en fonction de la composante G_1 du gradient de pression. On donne l'approximation au premier ordre qui est linéaire et qui correspond à la loi de Darcy. On donne ensuite les approximations à l'ordre trois et à l'ordre cinq. Enfin pour évaluer la précision des résultats on compare ces solutions avec la solution de référence qui est

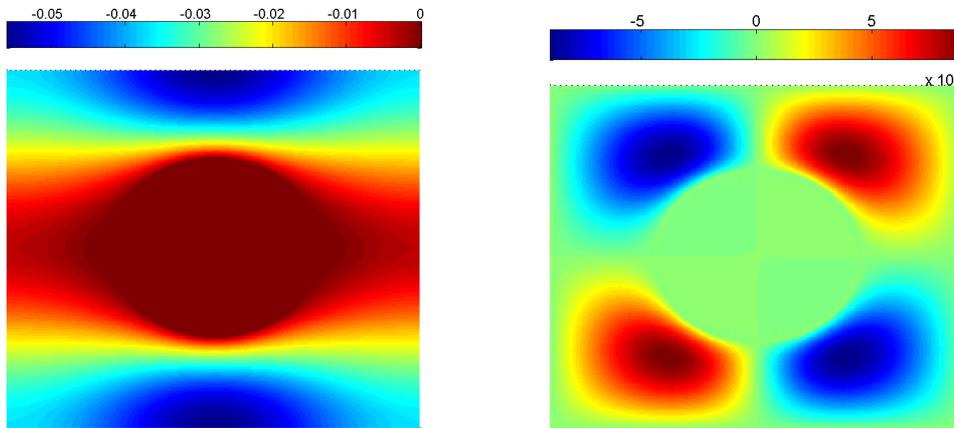


FIGURE 2.3 – Distribution des composantes de la vitesse dans la cellule élémentaire. La vitesse v_1 (à gauche) et v_2 (à droite) à l'ordre ϵ^0 pour le cylindre de rayon $R = 0.25$ et $G_1 = 1, G_2 = 0$.

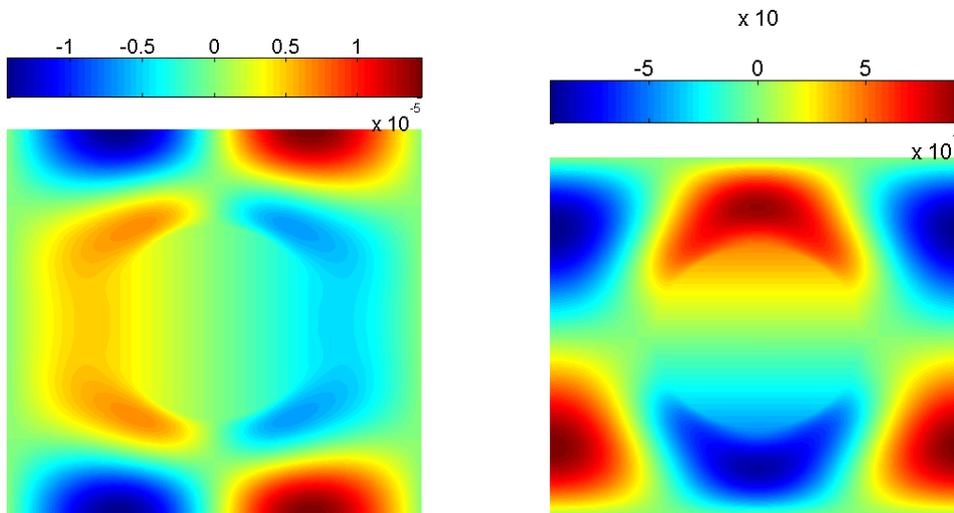


FIGURE 2.4 – Distribution des composantes de la vitesse dans la cellule élémentaire. La vitesse v_1 (à gauche) et v_2 (à droite) à l'ordre ϵ^1 pour le cylindre de rayon $R = 0.25$ et $G_1 = 1, G_2 = 0$.

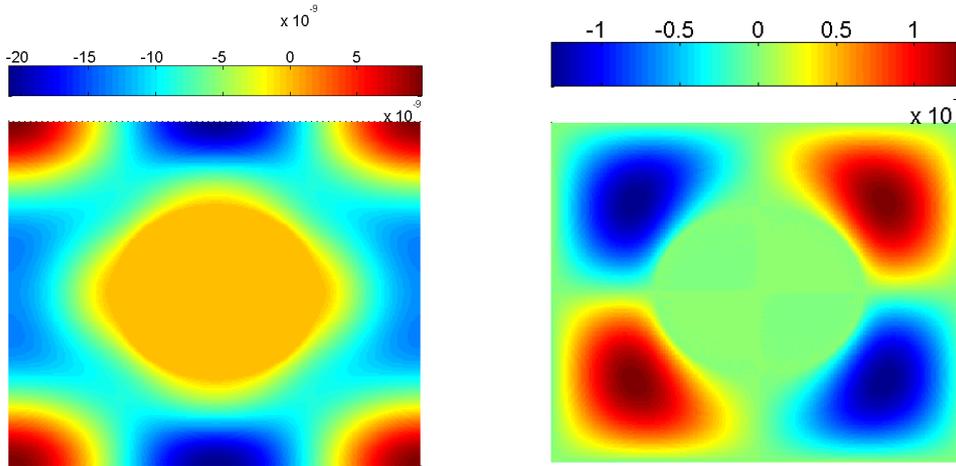


FIGURE 2.5 – Distribution des composantes de la vitesse dans la cellule élémentaire. La vitesse v_1 (à gauche) et v_2 (à droite) à l'ordre ϵ^2 pour le cylindre de rayon $R = 0.25$ et $G_1 = 1, G_2 = 0$.

R	k_0 (10^{-3})	k_2 (10^{-8})	k'_2 (10^{-8})	k_4 (10^{-14})	k'_4 (10^{-13})	k''_4 (10^{-14})
0.05	133.356	-1.5110^3	1.3310^3	2.0510^5	8.1910^4	-1.8410^5
0.25	19.9045	-3.3531	2.7617	3.3948	1.2469	-2.2710
0.45	0.31852	-9.0510^{-7}	-2.1610^{-6}	4.9010^{-10}	-3.5010^{-10}	8.7910^{-10}

TABLE 2.4 – Valeurs des coefficients $k_0, k_2, k'_2, k_4, k'_4$ et k''_4 de la loi macroscopique de filtration pour le réseau de cylindres de section circulaire de rayon R avec les valeurs $R = 0.05, R = 0.25$ et $R = 0.45$

obtenue en résolvant par éléments finis le problème d'écoulement régi par les équations de Navier-Stokes. Sur les figures 2.7 et 2.8 on présente les mêmes résultats pour des cylindres de rayon $R = 0.25$ et $R = 0.45$ respectivement. Sur la figure 2.9 on donne les variations de la composante V_1 du champ de vitesse avec la composante G_1 du gradient de pression pour le réseau périodique de cylindre de section carrée de coté $a = 0.25$.

On peut observer que les quatre solutions, les solution FFT à l'ordre 1, 3 et 5 ainsi que la solution de référence coïncident parfaitement à faible valeur du gradient de pression. Pour des valeurs plus élevées du gradient de pression, les solutions à l'ordre trois et cinq divergent de la solution de référence. On peut noter par ailleurs que la solution au premier ordre (équation de Darcy) reste proche de la solution exacte alors que les solutions aux ordres trois et cinq ne sont plus admissibles. On notera également que les effets non linéaires deviennent plus significatifs à grande porosité, puisque l'on observe ces effets sur la figure 2.8 à des valeurs du gradient de pression très grande (de l'ordre de 10^4 pour le gradient de pression adimensionné G_1) alors que sur la figure 2.6 les effets non linéaires sont observables pour des valeurs de G_1 de l'ordre de 100.

Rappelons que avec le choix $\mu = \rho = h = 1$, on a $V = \bar{V}$. Par ailleurs $\|\bar{V}\|$ est égal au nombre du Reynolds. On observe donc que l'approximation polynomiale (sur les figures 2.6 à 2.9) reste valable pour des nombres de Reynolds intérieur à une valeur de l'ordre de 7 ou 8.

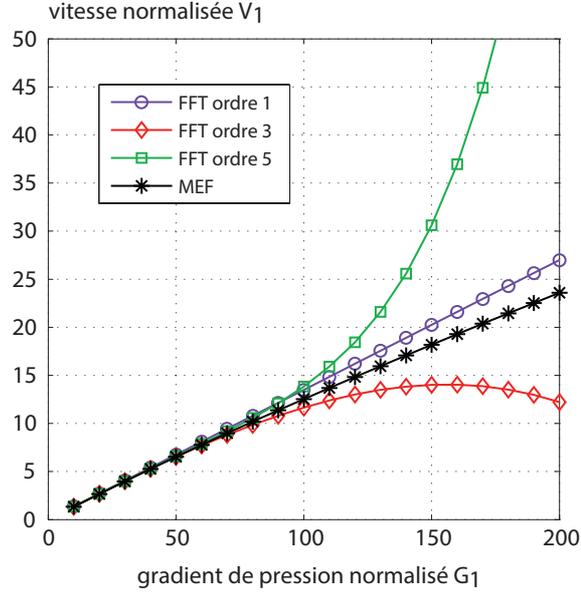


FIGURE 2.6 – Variations de la vitesse macroscopique V_1 avec le gradient de pression G_1 pour le réseau périodique de cylindres de section circulaire de rayon $R = 0.05$. Comparaison entre la solution à l'ordre 1, 3, 5 et la solution exacte obtenue en résolvant l'écoulement régi par l'équation de Navier-Stokes.

2.3.3 Rayon de convergence de l'approche asymptotique numérique

L'approximation du problème de Navier-Stokes à l'aide d'un développement polynomial en G_i est valide uniquement lorsque le nombre de Reynolds reste petit. Les résultats numériques présentés dans la section précédente montrent que pour des valeurs plus grandes, les approximations polynomiales divergent rapidement de la solution exacte. Pour déterminer les limites de l'approche asymptotique à rendre compte des effets non linéaires, on se propose de déterminer le rayon de convergence de la série polynomiale. Par ailleurs, on peut déjà noter que le rayon de convergence dépend du rayon des cylindres (et donc de la porosité). Effectivement, pour les grandes valeurs du rayon (par exemple $R = 0.45$) alors les valeurs des perméabilités aux ordres supérieurs sont très petites et les effets non linéaires sont observés pour les valeurs élevées du gradient de pression. Dans ce cas, le rayon de convergence de la série est grand. Inversement, pour les faibles valeurs du rayon des cylindres les perméabilités aux ordres supérieurs sont plus grandes, les effets non linéaires surviennent plus rapidement, le rayon de convergence de la série est donc

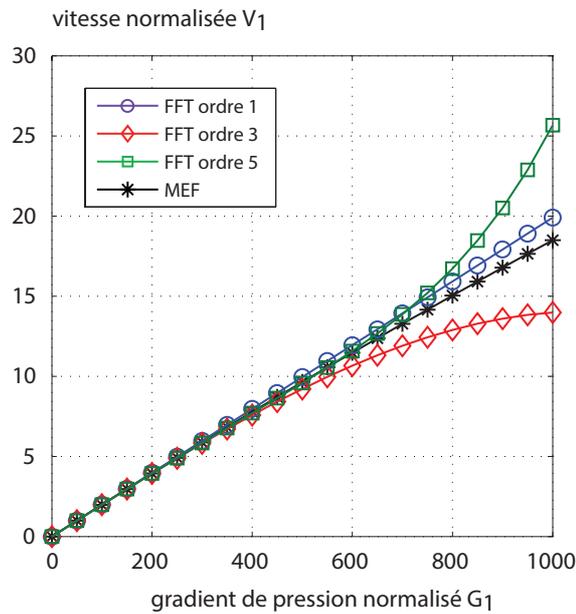


FIGURE 2.7 – Variations de la vitesse macroscopique V_1 avec le gradient de pression G_1 pour le réseau périodique de cylindres de section circulaire de rayon $R = 0.25$. Comparaison entre la solution à l'ordre 1, 3, 5 et la solution exacte

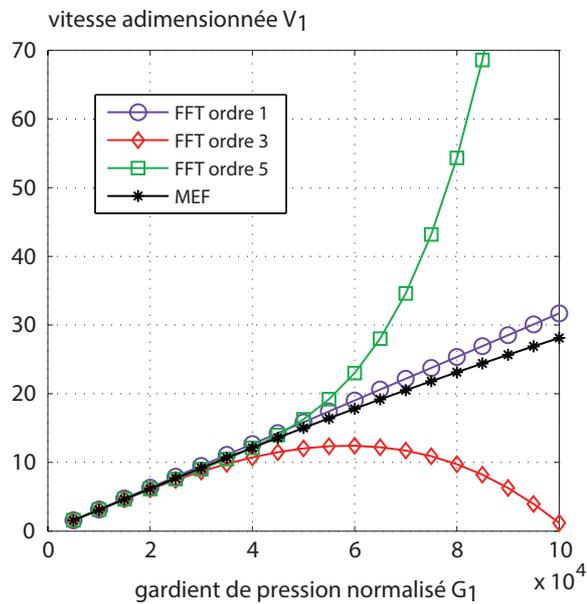


FIGURE 2.8 – Variations de la vitesse macroscopique V_1 avec le gradient de pression G_1 pour le réseau périodique de cylindres de section circulaire de rayon $R = 0.45$. Comparaison entre la solution à l'ordre 1, 3, 5 et la solution exacte.

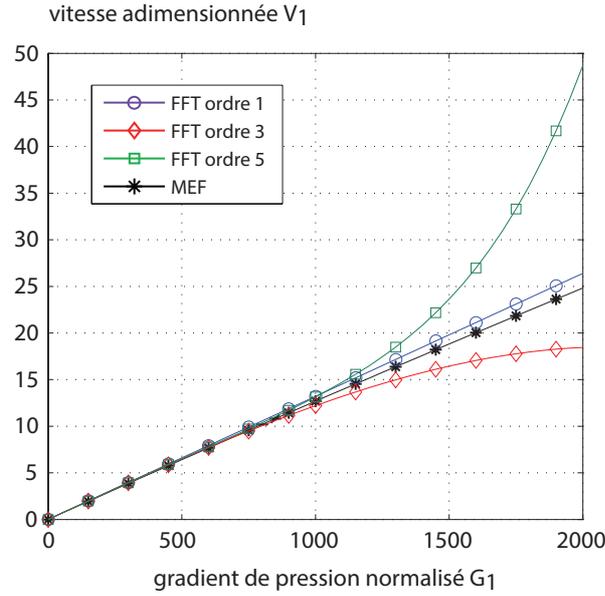


FIGURE 2.9 – Variations du gradient de pression macroscopique V_1 avec le gradient de pression G_1 pour le réseau périodique de cylindres de section carrée de côté $a = 0.25$. Comparaison entre la solution à l'ordre 1, 3, 5 et la solution exacte.

plus petit.

On peut également noter que si on exprime le rayon de convergence de la série en fonction du nombre de Reynolds, ce rayon est quasi indépendant du rayon de l'inclusion. Effectivement, comme déjà mentionné, l'approche polynomiale diverge de la solution de référence pour $Re \approx 7$ ou 8 et ce pour toutes les valeurs du rayon ($R = 0.05$, $R = 0.25$ et $R = 0.45$). Il existe plusieurs manières pour évaluer le rayon de convergence d'une série. Lorsque la composante G_1 seulement est imposée, alors la vitesse macroscopique s'écrit :

$$V_1 = G_1(c_0 + c_1 G_1^2 + c_2 G_1^4 + \dots) \quad (2.81)$$

où l'on a posé $c_0 = k_0$, $c_1 = k_2 + k'_2$, $c_2 = k_4 + k'_4 + k''_4$ etc. Pour une relation unidimensionnelle on peut utiliser la formule de Domb et Sykes [31] pour évaluer le rayon de convergence de la série (2.81). Ainsi, le rayon de convergence de la série $c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 + \dots$ peut être évalué par la formule

$$r = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{c_{n-1}}{c_n} \quad (2.82)$$

où r désigne le rayon de convergence. Puisque le signe des coefficients c_n alterne entre les valeurs 1 et -1 , la relation (2.83) donne une valeur négative pour r . Dans ce cas particulier, c'est $-r$ qui exprime le rayon de convergence de la série. Puisque la série (2.81) est en puissance de G_1^2 , le rayon de convergence exprimé pour la variable G_1 s'écrit donc

$$\mathcal{R}_J = \lim_{n \rightarrow +\infty} \sqrt{\frac{c_{n-1}}{c_n}} \quad (2.83)$$

De manière pratique, on détermine le rayon de convergence en calculant les variations de

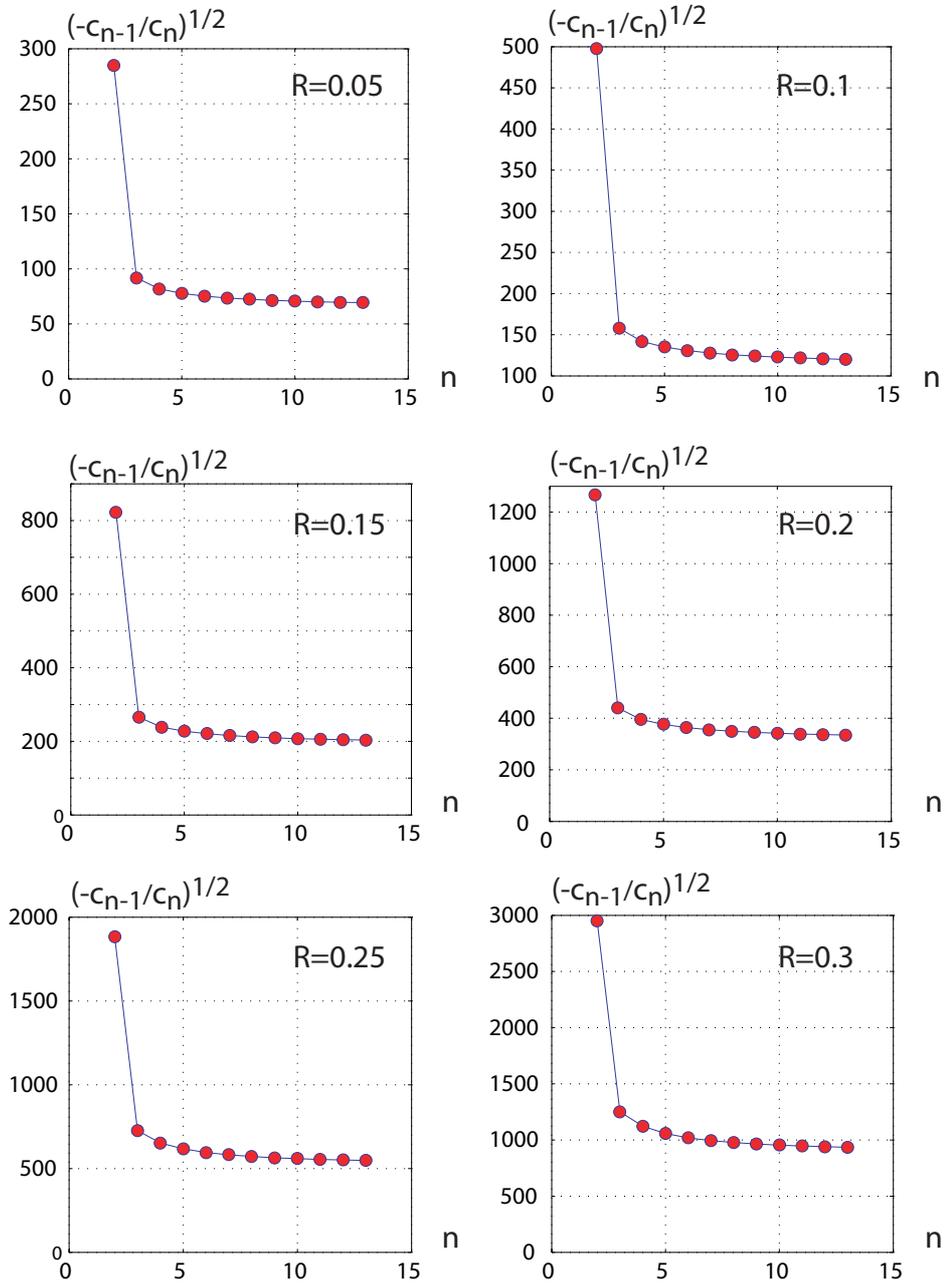


FIGURE 2.10 – Courbes de Domb et Sykes donnant la valeur de $(-c_{n-1}/c_n)^{1/2}$ en fonction de n pour les valeurs du rayon du cylindre $R = 0.05$, $R = 0.1$, $R = 0.15$, $R = 0.2$, $R = 0.25$ et $R = 0.3$.

$(-c_{n-1}/c_n)^{1/2}$ en fonction de n . Ceci est réalisé sur la figure 2.10. Il convient de rappeler que nous recherchons le rayon d'une fonction numérique et non analytique. Chaque terme du développement en série de cette fonction numérique est obtenu en résolvant en cascade les problèmes de la cellule élémentaire. Dans les application proposées ici, on détermine le rayon de convergence de la série (2.83) en développant jusqu'au terme $c_{13}G_1^{26}$. Ceci nécessite la résolution des 26 premiers problèmes pour la cellule élémentaire. Les valeurs de $(-c_{n-1}/c_n)^{1/2}$ en fonction de n sont représentées sur la figure 2.10 pour diverses valeurs de rayon R du cylindre. Pour les différents cas, on observe un bonne convergence de la série $(-c_{n-1}/c_n)^{1/2}$ ce qui permet de calculer précisément la limite de la série $(-c_{n-1}/c_n)^{1/2}$. Le rayon de convergence, que l'on a noté \mathcal{R}_J , est déterminé sur les figures 2.10 pour $n = 13$. Il est ensuite représenté sur la figure 2.11 en fonction du rayon R du cylindre. On peut observer une dépendance quasi-linéaire entre \mathcal{R}_J et R dans le repère logarithmique. Ceci démontre en outre que le rayon de convergence est maximal lorsque le rayon R des cylindres tend vers 0.5 et il est minimal lorsque le rayon du cylindre tend vers zéro.

A partir de la figure 2.11, on peut déterminer la valeur limite du gradient de pression G_1 (redimensionné) pour laquelle l'approche par développement reste admissible. Considérons par exemple les cas particulier de l'eau, les valeurs de la viscosité dynamique et de la densité massique sont $\mu = 10^{-3}Pa.s$ et $\rho = 1kg/m^3$ à température ambiante. Admettons que la distance entre les centres des cylindres soit égale à 1 millimètre (ceci correspondant à une taille de la cellule égale à $h=1mm$). La figure 2.11 fournit donc la limite du gradient de pression G_1 pour laquelle la forme polynomial de la loi macroscopique reste admissible. Il est intéressant aussi de représenter le rayon de convergence pour la variable V_1 que

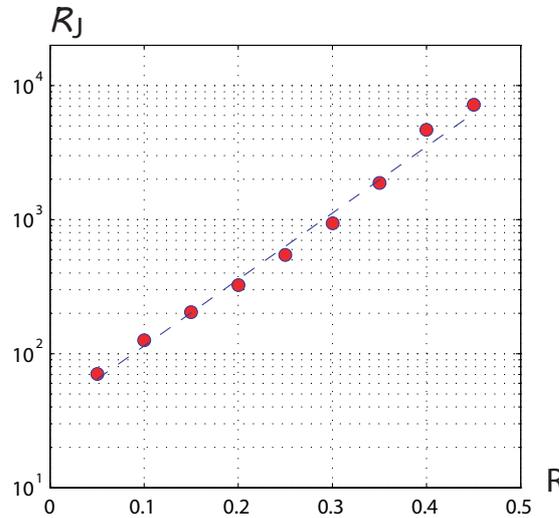


FIGURE 2.11 – Variations du rayon de convergence \mathcal{R}_J de la série polynomiale en fonction du rayon R des cylindres.

l'on note \mathcal{R}_V . Et que l'on détermine en remplaçant dans l'expression (2.81), G_1 par \mathcal{R}_V . Rappelons en outre que $V_1 = V_1^* = \mathcal{R}_e$ le nombre de Reynolds de pore. Ainsi sur la figure 2.12 on représente la valeur de \mathcal{R}_V en fonction du rayon R des cylindres. On observe que

\mathcal{R}_V , qui représente la limite pour le nombre de Reynolds de pore \mathcal{R}_e , est quasi indépendant du rayon des cylindres est approximativement égal à 9.5. Sur la figure 2.13, on représente les mêmes résultats mais pour les cylindres de section carrée de côté a . On observe que la limite pour le nombre de Reynolds de pore \mathcal{R}_e approximativement égal à 7.5.

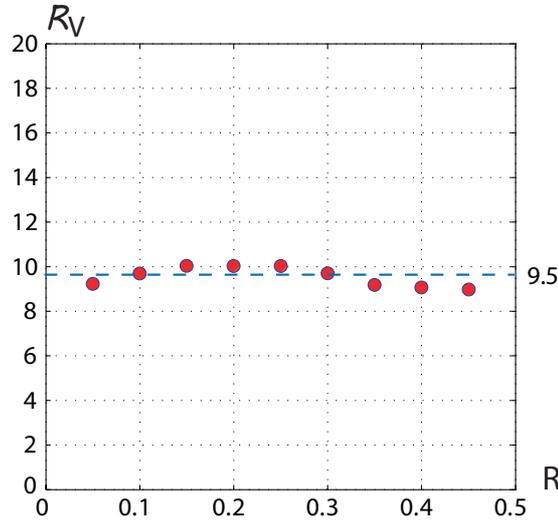


FIGURE 2.12 – Rayon de convergence de la série polynomiale pour le champ de vitesse macroscopique $V_1 = V_1^* \equiv \mathcal{R}_e$ en fonction du rayon R des cylindres.

2.4 Discussion des résultats et conclusion

Les résultats numériques présentés sur les figures 2.6 à 2.9 montrent que les solutions aux ordres supérieurs ne permettent pas de reproduire les effets non linéaires pour les grandes valeurs de G . Les développements aux ordres supérieurs améliorent la solution classique mais dans des plages de valeurs du gradient de pression très restreintes. Ceci est illustré sur la figure 2.14, où l'on a tracé l'erreur relative des solutions obtenues aux différents ordres en comparaison avec la solution exacte obtenue par éléments finis. Dès que les effets non linéaires deviennent significatifs au regard de la solution au premier ordre, les deux approximations, cubique et à l'ordre 5, divergent. Ces résultats montrent clairement qu'une analyse faiblement non linéaire n'est pas adaptée pour reproduire les effets non linéaires à des valeurs du nombre de Reynolds supérieur à 8. On peut noter que des résultats similaires avaient déjà été obtenus par [11] dans le cas d'un écoulement dans une conduite périodique sinusoïdale.

A partir des données numériques obtenues par éléments finis, il est possible d'approcher la solution exacte en utilisant la fonction polynomiale définie dans (2.80). A titre d'exemple, la solution par éléments finis obtenue pour les cylindres de section circulaire avec un rayon $R = 0.25$ est représentée avec l'approximation polynomiale. L'identification des coefficients est effectuée par la méthode des moindres carrés. Des approximations po-

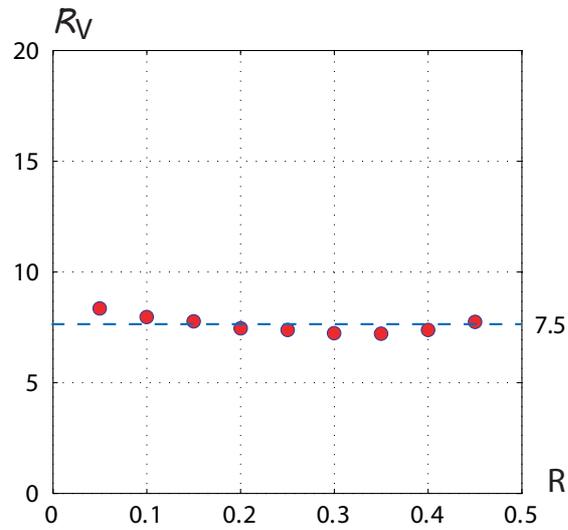


FIGURE 2.13 – Rayon de convergence de la série polynomiale pour le champ de vitesse macroscopique $V_1 = V_1^* \equiv \mathcal{R}_e$ en fonction du côté a des cylindres de section carrée.

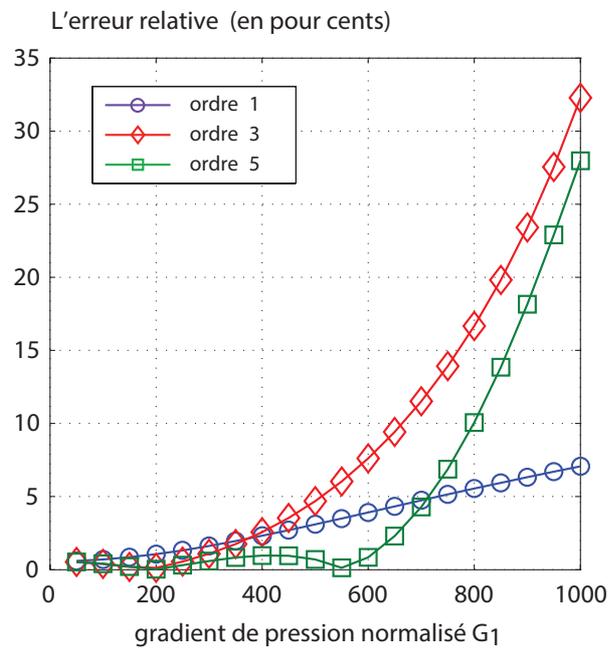


FIGURE 2.14 – Erreur relative (en pour cents) entre les approximations à l'ordre 1, 3, 5 et la solution exacte calculée par élément finis.

lynomiales de degré 3 puis 5 sont considérées. Ces approximations reproduisent bien les résultats numériques par éléments finis dans l'intervalle où les coefficients ont été identifiés. Hors de cet intervalle, l'approximation diverge ce qui est inhérent à l'utilisation de fonctions polynomiales. Évidemment les coefficients évalués par la méthode des moindres carrés sont différents de ceux obtenus par l'approche faiblement non linéaire.

En conclusion, on peut tout d'abord noter que la méthode basée sur une approche faiblement

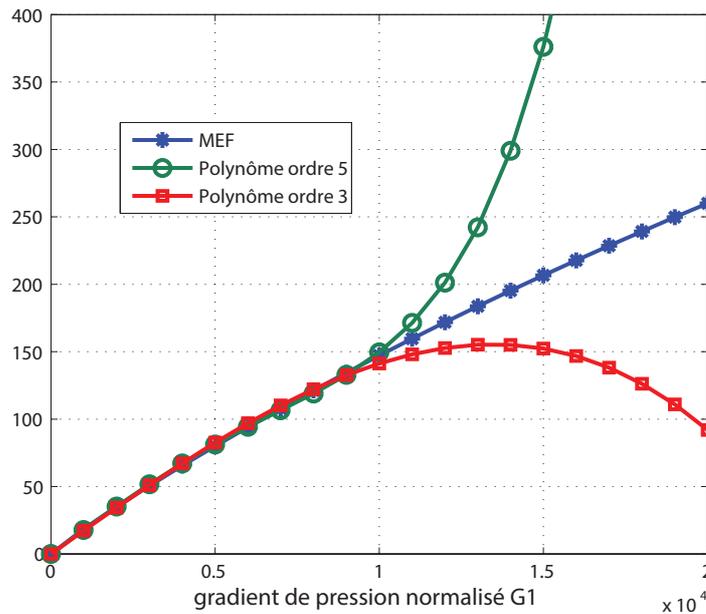


FIGURE 2.15 – Approximation de la solution exacte (par élément finis) par une loi polynomiale

ment non linéaire ne permet pas de décrire de manière satisfaisante les effets non linéaires. L'approche asymptotique est séduisante puisqu'elle nécessite uniquement la résolution de problèmes linéaires de Stokes et leur résolution avec la FFT qui rend la méthode de calcul très rapide. Toutefois tous les résultats obtenus montrent que les développements en série de polynômes divergent avant bien même que les effets non linéaires soient significatifs. Il est possible d'identifier la loi d'écoulement non linéaire en identifiant des coefficients à partir des résultats obtenus par éléments finis, comme effectué sur la figure 2.15. Toutefois ce type de technique peut s'avérer numériquement coûteuse lorsqu'elle est appliquée à des microstructures poreuses tridimensionnelles. Le développement de méthodes de résolution basées sur la FFT pour résoudre l'équation de Navier Stokes peut s'avérer intéressant. Nous reviendrons sur ce point dans la conclusion générale.

Chapitre 3

Expressions analytiques pour les propriétés thermiques de composites à renforts sphériques

3.1 Homogénéisation de composites conducteurs

Dans cette première section on rappelle quelques principes de base de l'homogénéisation de composites conducteurs de la chaleur.

3.1.1 Principes de base de l'homogénéisation

Comme d'autres problèmes physiques, l'homogénéisation des propriétés thermiques est réduite à la résolution de problèmes de localisation d'une cellule élémentaire et de trouver les liens entre les grandeurs moyennes, dites macroscopiques et les grandeurs microscopiques. La détermination de la conductivité thermique d'un matériau hétérogène consiste à résoudre les équations aux dérivées partielles suivantes :

$$\begin{aligned} \mathbf{e}(\mathbf{x}) &= -\nabla T, \quad \nabla \cdot \mathbf{q} = 0, \\ \mathbf{q}(\mathbf{x}) &= \mathbf{K}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{e}(\mathbf{x}) \quad \text{ou} \quad \mathbf{e}(\mathbf{x}) = \mathbf{R}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (3.1)$$

sur le domaine V de la cellule avec les conditions aux limites adaptées. Dans l'équation (3.1), T est le champ de température, \mathbf{e} est l'opposé du gradient de température et \mathbf{q} le flux de chaleur. Comme le matériau est hétérogène, le tenseur de conductivité \mathbf{K} et le tenseur de résistivité \mathbf{R} sont des fonctions de la position \mathbf{x} . La solution du problème (3.1) nous permet d'accéder au flux macroscopique \mathbf{Q} et au gradient de température macroscopique \mathbf{E} qui sont les moyennes volumiques des champs locaux \mathbf{q} et \mathbf{e} :

$$\mathbf{Q} = \langle \mathbf{q}(\mathbf{x}) \rangle_V, \quad \mathbf{E} = \langle \mathbf{e}(\mathbf{x}) \rangle_V \quad (3.2)$$

Le système (3.1) doit être complété par des conditions aux limites. Trois type de conditions sont généralement considérées en homogénéisation [69, 87] : des conditions à température imposée (Dirichlet), à flux imposé (Neumann) et les conditions périodiques au bord de la

cellule.

- Conditions en température imposée (Dirichlet) :

Avec \mathbf{E} donné, on impose la température T au bord de la cellule de la façon suivante :

$$T = -\mathbf{E} \cdot \mathbf{x}, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial V \quad (3.3)$$

Par le théorème de la divergence (ou théorème de moyenne), on peut démontrer que ce champ de température est compatible avec \mathbf{E} , c'est à dire la moyenne volumique de e est égale à \mathbf{E} .

- Conditions en flux imposé (Neumann) :

Avec \mathbf{Q} donné, on prescrit le flux de chaleur par :

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial V \quad (3.4)$$

où \mathbf{n} est le vecteur normal à la surface de la cellule élémentaire. On peut également prouver que la moyenne du flux microscopique est égale à \mathbf{Q} .

- Conditions périodiques :

Pour des milieux hétérogènes périodiques [87, 78] se sont les conditions de périodicité qui sont appliquées. Si V est la cellule de base, les champs e et q sont des fonctions V -périodique de moyenne \mathbf{E} et \mathbf{Q} . La température et le flux satisfont aux conditions

$$T + \mathbf{E} \cdot \mathbf{x} \text{ périodique}, \quad \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \text{ antipériodique} \quad (3.5)$$

La relation linéaire entre \mathbf{Q} et \mathbf{E} conduit aux tenseurs effectifs : \mathbf{K}^{eff} la conductivité effective et \mathbf{R}^{eff} la résistivité effective, du matériau hétérogène

$$\mathbf{Q} = \mathbf{K}^{\text{eff}} \cdot \mathbf{E} \quad \mathbf{E} = \mathbf{R}^{\text{eff}} \cdot \mathbf{Q} \quad (3.6)$$

Grace à la linéarité, on peut définir \mathbf{A} le tenseur de localisation et \mathbf{B} le tenseur de concentration tels que :

$$e(\mathbf{x}) = \mathbf{A}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{E}, \quad q(\mathbf{x}) = \mathbf{B}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{Q} \quad (3.7)$$

Les expressions de \mathbf{K}^{eff} et \mathbf{R}^{eff} qui sont indépendantes des paramètres de chargement \mathbf{E} et \mathbf{Q} sont alors :

$$\mathbf{K}^{\text{eff}} = \langle \mathbf{K}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) \rangle_V, \quad \mathbf{R}^{\text{eff}} = \langle \mathbf{R}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}) \rangle_V \quad (3.8)$$

En terme d'énergie, on a des relations analogues à celle de Hill-Mandel en élasticité. Quelque soit les conditions aux limites considérées pour déterminer les champs microscopiques, l'énergie macroscopique vaut :

$$\langle \mathbf{q} \cdot e \rangle_V = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{E} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{K}^{\text{eff}} \cdot \mathbf{E} = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}^{\text{eff}} \cdot \mathbf{Q} \quad (3.9)$$

3.1.2 Milieux périodiques

Rappelons le problème microscopique à résoudre pour calculer les propriétés effectives des composites périodiques (cf. [87, 78]). Celui-ci est obtenu en appliquant les techniques de développement asymptotique déjà considérées au chapitre 1. Ici le problème étant linéaire, seul le problème à l'ordre 0 est considéré pour le calcul des propriétés effectives du composite périodique.

Considérons le tenseur de conductivité du milieu hétérogène périodique, noté $\mathbf{K}(\mathbf{X})$. On définit

$$\mathbf{K}^\epsilon(\mathbf{X}) = \mathbf{K}(\mathbf{y}), \quad \mathbf{y} = \frac{\mathbf{x}}{\epsilon} \quad (3.10)$$

$\mathbf{K}(\mathbf{y})$ est périodique, de période V , ϵ est le facteur d'échelle et \mathbf{y} est la variable d'espace dite rapide (cf. chapitre 1). Comme notre problème dépend du paramètre ϵ , il est plus commode d'écrire le champ de température comme une fonction des deux variables, lente (\mathbf{x}) et rapide (\mathbf{y}) :

$$T^\epsilon(\mathbf{X}) = T(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad (3.11)$$

Supposons que le terme source f varie lentement avec la variable \mathbf{x} , l'équation d'énergie devient

$$-\nabla \cdot (\mathbf{K}(\mathbf{y}) \cdot \nabla T^\epsilon) = f(\mathbf{x}) \quad (3.12)$$

On cherche la solution V -périodique par un développement asymptotique. On écrit donc $T^\epsilon(\mathbf{X})$ sous la forme d'une série en puissance de ϵ

$$T^\epsilon(\mathbf{x}) = T^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \epsilon T^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \epsilon^2 T^2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots \quad (3.13)$$

et on remplace dans l'équation de la chaleur le gradient par $\nabla = \nabla_{\mathbf{x}} + \epsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{y}}$. Il vient alors :

$$-(\nabla_{\mathbf{x}} + \epsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{y}}) \cdot [\mathbf{K}(\mathbf{y}) \cdot (\nabla_{\mathbf{x}} + \epsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{y}}) (T^0 + \epsilon T^1 + \epsilon^2 T^2 + \dots)] = f(\mathbf{x}) \quad (3.14)$$

On collecte ensuite les termes de même puissance en ϵ . On obtient ainsi aux différents ordres :

- Ordre ϵ^{-2} . Nous obtenons :

$$\nabla_{\mathbf{y}} \cdot (\mathbf{K}(\mathbf{y}) \cdot \nabla_{\mathbf{y}} T^0) = 0 \quad (3.15)$$

qui suggère que T^0 est une fonction de \mathbf{x} uniquement,

$$T^0 = T^0(\mathbf{x}). \quad (3.16)$$

- Ordre ϵ^{-1} . Nous avons l'équation :

$$\nabla_{\mathbf{y}} \cdot (\mathbf{K}(\mathbf{y}) \cdot \nabla_{\mathbf{y}} T^1) + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot (\mathbf{K}(\mathbf{y}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} T^0) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{K}(\mathbf{y}) \cdot \nabla_{\mathbf{y}} T^0) = 0 \quad (3.17)$$

En tenant compte de (3.16), il vient :

$$\nabla_{\mathbf{y}} \cdot [\mathbf{K}(\mathbf{y}) \cdot (\nabla_{\mathbf{y}} T^1 + \nabla_{\mathbf{x}} T^0)] = 0 \quad (3.18)$$

Due à la linéarité du problème en $\nabla_{\mathbf{x}}T^0$, on peut poser :

$$T^1 = \chi(\mathbf{y}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}}T^0, \quad (3.19)$$

où $\chi(\mathbf{y})$ est la solution de l'équation :

$$\nabla_{\mathbf{y}} \cdot [\mathbf{K}(\mathbf{y}) \cdot (\nabla_{\mathbf{y}}^T \chi(\mathbf{y}) + \mathbf{I}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}}T^0] = 0 \quad (3.20)$$

- Ordre ϵ^0 . Le problème s'écrit :

$$\nabla_{\mathbf{y}} \cdot (\mathbf{K}(\mathbf{y}) \cdot \nabla_{\mathbf{y}}T^2) + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot (\mathbf{K}(\mathbf{y}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}}T^1) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{K}(\mathbf{y}) \nabla_{\mathbf{y}}T^1) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{K}(\mathbf{y}) \nabla_{\mathbf{x}}T^0) + f = 0 \quad (3.21)$$

En prenant la moyenne sur le volume V et tenant en compte de la périodicité, on obtient :

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle \mathbf{K}(\mathbf{y}) \cdot (\nabla_{\mathbf{y}}T^1 + \nabla_{\mathbf{x}}T^0) \rangle_V + f(\mathbf{x}) = 0 \quad (3.22)$$

Introduisons maintenant l'expression de T^1 donnée par (3.19), il vient alors :

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{K}^{\text{eff}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}T^0) + f(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{K}^{\text{eff}} = \langle \mathbf{K}(\mathbf{y}) \cdot (\nabla_{\mathbf{y}}^T \chi + \mathbf{I}) \rangle_V \quad (3.23)$$

Relations qui constituent la loi de comportement macroscopique. Comme nous avons déjà démontré, le coeur de notre problème est la résolution du problème à l'ordre ϵ^{-1} . Dans la suite, nous utiliserons les notations suivantes :

$$-\nabla_{\mathbf{x}}T^0 \rightarrow \mathbf{E}, \quad -\nabla_{\mathbf{x}}T^0 - \nabla_{\mathbf{y}}T^1 \rightarrow \mathbf{e}, \quad -\mathbf{K}(\mathbf{y}) \cdot (\nabla_{\mathbf{y}}T^1 + \nabla_{\mathbf{x}}T^0) \rightarrow \mathbf{q}, \quad (3.24)$$

Par commodité, nous utiliserons dans la suite de ce chapitre la variable \mathbf{x} à la place de \mathbf{y} pour désigner les coordonnées d'espace. Les équations (3.17) pour la cellule élémentaire V sont alors parfaitement identiques à (3.1). Avec (3.23), nous retrouvons les relations macroscopiques (3.2) et (3.6). La condition d'antipériodicité du flux $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$ résulte alors de la périodicité de \mathbf{q} . Finalement, si \mathbf{e} est la dérivée d'un scalaire T , le terme $\theta = T + \mathbf{E} \cdot \mathbf{x}$ qui est différent de la température T^1 par une constante près, doit être V périodique. Pour faciliter l'analyse de Fourier présentée dans la suite, on remplace la première équation du système (3.1) par la nouvelle relation $\mathbf{e} - \theta$, on obtient ainsi un système dont les variables sont périodiques :

$$\begin{aligned} \mathbf{e} &= \mathbf{E} - \nabla\theta, & \nabla \cdot \mathbf{q} &= 0 \\ \mathbf{q}(\mathbf{x}) &= \mathbf{K}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{e}(\mathbf{x}) \quad \text{ou} \quad \mathbf{e}(\mathbf{x}) = \mathbf{R}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (3.25)$$

3.2 Homogénéisation des composites périodiques

3.2.1 Formulation des équations intégrales

Dans le système de coordonnées cartésiennes $Ox_1x_2x_3$, considérons un milieu hétérogène périodique avec périodes a_1, a_2 et a_3 . Le matériau composite est constitué de deux

ou plusieurs phases notées α avec les propriétés différentes \mathbf{K}^α et \mathbf{R}^α . La conductivité \mathbf{K} et la résistivité \mathbf{R} sont donc constantes par morceaux et exprimées sous la forme :

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} I_{\alpha}(\mathbf{x})\mathbf{K}^{\alpha}, \quad \mathbf{R}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} I_{\alpha}(\mathbf{x})\mathbf{R}^{\alpha}, \quad (3.26)$$

où $I_{\alpha}(\mathbf{x})$ sont les fonctions caractéristiques des phases définies par :

$$I_{\alpha}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \in V_{\alpha} \\ 0 & \text{si } \mathbf{x} \in V - V_{\alpha} \end{cases} \quad (3.27)$$

Les fonctions $I_{\alpha}(\mathbf{x})$ dépendent uniquement de la géométrie et de la répartition spatiale des différentes phases. Elles satisfont la condition suivante :

$$\sum_{\alpha} I_{\alpha}(\mathbf{x}) = 1 \quad (3.28)$$

Introduisons le milieu de référence de conductivité \mathbf{K}^0 , et le vecteurs \mathbf{e}^* par :

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \mathbf{K}^0 \cdot (\mathbf{e}(\mathbf{x}) - \mathbf{e}^*(\mathbf{x})) \quad \text{ou bien} \quad \mathbf{K}^0 \cdot \mathbf{e}^*(\mathbf{x}) = (\mathbf{K}^0 - \mathbf{K}(\mathbf{x})) \cdot \mathbf{e}(\mathbf{x}) \quad (3.29)$$

Par ailleurs, toute fonction V -périodique ϕ peut être représentée par la série de Fourier :

$$\phi(\mathbf{x}) = \sum_n \widehat{\phi}(\boldsymbol{\xi}_n) e^{i\boldsymbol{\xi}_n \cdot \mathbf{x}}, \quad \widehat{\phi}(\boldsymbol{\xi}) = \mathcal{F}(\phi(\mathbf{x})) = \langle \phi(\mathbf{x}) e^{-i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}} \rangle_V, \quad (3.30)$$

où $\boldsymbol{\xi}_n$ est le vecteur d'onde donné par :

$$\boldsymbol{\xi}_n = \frac{2\pi n}{a}, \quad n = 0, \pm 1, \dots \pm \infty \quad (3.31)$$

En utilisant (3.29) dans le système (3.25) et en appliquant la transformée de Fourier, on obtient :

$$\boldsymbol{\xi} \cdot \widehat{\mathbf{q}}(\boldsymbol{\xi}) = 0, \quad \widehat{\mathbf{e}}(\boldsymbol{\xi}) = -i\boldsymbol{\xi} \widehat{\theta}(\boldsymbol{\xi}), \quad \widehat{\mathbf{q}}(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{K}^0 \cdot (\widehat{\mathbf{e}}(\boldsymbol{\xi}) - \widehat{\mathbf{e}}^*(\boldsymbol{\xi})), \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \quad (3.32)$$

Après quelques manipulations algébriques, on obtient les expressions suivantes pour $\widehat{\theta}(\boldsymbol{\xi})$ et $\widehat{\mathbf{e}}(\boldsymbol{\xi})$ qui sont valables pour tous $\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}$:

$$\widehat{\theta}(\boldsymbol{\xi}) = i \frac{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{K}^0 \cdot \widehat{\mathbf{e}}^*(\boldsymbol{\xi})}{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{K}^0 \cdot \boldsymbol{\xi}}, \quad \widehat{\mathbf{e}}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{K}^0 \cdot \widehat{\mathbf{e}}^*(\boldsymbol{\xi})}{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{K}^0 \cdot \boldsymbol{\xi}} \boldsymbol{\xi}, \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \quad (3.33)$$

La seconde équation dans (3.33) qui donne $\widehat{\mathbf{e}}(\boldsymbol{\xi})$ peut être écrite sous la forme :

$$\widehat{\mathbf{e}}(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{E} \mathbf{1}_{\boldsymbol{\xi}} + \widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi}) \widehat{\mathbf{e}}^*(\boldsymbol{\xi}), \quad \widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{(\boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{K}^0}{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{K}^0 \boldsymbol{\xi}}, \quad (3.34)$$

ce qui permet d'obtenir l'expression de $\mathbf{e}(\mathbf{x})$ dans l'espace réel :

$$\mathbf{e}(\mathbf{x}) = \mathbf{E} + \sum_{n \neq 0} \widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi}_n) \widehat{\mathbf{e}}^*(\boldsymbol{\xi}_n) e^{i\boldsymbol{\xi}_n \cdot \mathbf{x}} \quad (3.35)$$

Ici, $1_{\boldsymbol{\xi}}$ est la fonction indicatrice $1_{\boldsymbol{\xi}} = 1$ si $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{0}$ et $1_{\boldsymbol{\xi}} = 0$ si non. On peut noter dans la dernière relation que le dernier terme à droite de l'égalité représente le produit de convolution de $\mathbf{S}(\mathbf{x})$ par $\mathbf{e}(\mathbf{x})$:

$$\mathbf{S}(\mathbf{x}) * \mathbf{e}(\mathbf{x}) = \sum_{n \neq 0} \widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi}_n) \cdot \widehat{\mathbf{e}}(\boldsymbol{\xi}_n) e^{i\boldsymbol{\xi}_n \cdot \mathbf{x}} \quad (3.36)$$

La forme compacte de l'équation (3.35) est la suivante :

$$\mathbf{e}(\mathbf{x}) = \mathbf{E} + \mathbf{S}(\mathbf{x}) * \mathbf{e}^*(\mathbf{x}) \quad (3.37)$$

Finalement, la combinaison de (3.37) avec (3.29) donne une équation intégrale pour $\mathbf{e}^*(\mathbf{x})$:

$$(\mathbf{K}^0 - \mathbf{K}(\mathbf{x})) \cdot (\mathbf{E} + \mathbf{S}(\mathbf{x}) * \mathbf{e}^*(\mathbf{x})) = \mathbf{K}^0 \cdot \mathbf{e}^*(\mathbf{x}) \quad (3.38)$$

Une équation intégrale duale basée sur la polarisation \mathbf{q}^* peut être également formulée. En utilisant \mathbf{R}^0 pour la résistivité du milieu de référence, \mathbf{q}^* est solution de l'équation intégrale :

$$\mathbf{e}(\mathbf{x}) = \mathbf{R}^0 \cdot (\mathbf{q}(\mathbf{x}) - \mathbf{q}^*(\mathbf{x})) \quad \text{ou bien} \quad \mathbf{R}^0 \cdot \mathbf{q}^*(\mathbf{x}) = (\mathbf{R}^0 - \mathbf{R}(\mathbf{x})) \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}) \quad (3.39)$$

En comparant (3.39) et (3.29), on observe que :

$$\mathbf{e}^*(\mathbf{x}) = -\mathbf{R}^0 \cdot \mathbf{q}^*(\mathbf{x}) \quad (3.40)$$

Ici, \mathbf{q}^* n'est rien d'autre que la polarisation. Utilisons la transformée de Fourier dans (3.39) et (3.40) et utilisons (3.34), on obtient alors les expressions suivantes :

$$\widehat{\mathbf{q}}(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{Q}1_{\boldsymbol{\xi}} + \widehat{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \widehat{\mathbf{q}}^*(\boldsymbol{\xi}), \quad \widehat{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{I} - \frac{\mathbf{K}^0 \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi})}{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{K}^0 \cdot \boldsymbol{\xi}} \quad (3.41)$$

qui sont valables pour tout $\boldsymbol{\xi}$. De manière duale, \mathbf{q} est donné par :

$$\mathbf{q} = \mathbf{Q} + \mathbf{L} * \mathbf{q}^*, \quad (3.42)$$

En utilisant (3.39) dans (3.42), on obtient l'équation intégrale duale pour \mathbf{q}^*

$$(\mathbf{R}^0 - \mathbf{R}) \cdot (\mathbf{Q} + \mathbf{L} * \mathbf{q}^*) = \mathbf{R}^0 \cdot \mathbf{q}^* \quad (3.43)$$

Les deux équations intégrales (3.38) et (3.43) seront utilisées pour les approximations analytiques présentées plus tard. D'autre part, après quelques manipulations, on peut transformer les équations en \mathbf{e}^* et \mathbf{q}^* en équations intégrales en \mathbf{e} et \mathbf{q} .

Comme le tenseur $\widehat{\mathbf{S}}$ dans (3.34) est lié au tenseur de Green $\widehat{\Gamma}^0$ associé au milieu de référence de conductivité \mathbf{K}^0 par :

$$\widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi}) = \widehat{\Gamma}^0(\boldsymbol{\xi}) \cdot \mathbf{K}^0, \quad \widehat{\Gamma}^0(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi}}{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{K}^0 \cdot \boldsymbol{\xi}}, \quad (3.44)$$

on peut déduire une équation intégrale pour \mathbf{e} avec l'aide de (3.29) (cf. [16]) :

$$\mathbf{e} = \mathbf{E} - \Gamma^0 * \delta \mathbf{K} . \mathbf{e}, \quad \delta \mathbf{K} = \mathbf{K}(\mathbf{x}) - \mathbf{K}^0 \quad (3.45)$$

La formulation duale pour le flux \mathbf{q} peut être déduite d'une manière similaire à partir de (3.42) et (3.39) :

$$\mathbf{q} = \mathbf{Q} - \Delta * \delta \mathbf{R} . \mathbf{q}, \quad \delta \mathbf{R} = \mathbf{R}(\mathbf{x}) - \mathbf{R}^0, \quad (3.46)$$

où Δ^0 est l'opérateur de Green dual. La représentation de Δ^0 dans l'espace de Fourier est :

$$\widehat{\Delta}^0(\boldsymbol{\xi}) = \widehat{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\xi}) . \mathbf{K}^0 = \mathbf{K}^0 - \mathbf{K}^0 . \widehat{\Gamma}(\boldsymbol{\xi}) . \mathbf{K}^0 \quad (3.47)$$

Sous cette forme, les deux équations (3.45) et (3.46) peuvent être résolues à l'aide de schémas itératifs similaires à ceux présentés au chapitre 2. D'autre part, dans la plupart des applications, on choisit un matériau de référence isotrope :

$$\mathbf{K}^0 = k_0 \mathbf{I}, \quad \mathbf{R}^0 = r_0 \mathbf{I}, \quad r_0 = 1/k_0 \quad (3.48)$$

Dans ce cas les tenseurs $\widehat{\mathbf{S}}, \widehat{\mathbf{L}}, \widehat{\Gamma}$ et $\widehat{\Delta}$ admettent les formes assez simples :

$$\widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi}) = \bar{\boldsymbol{\xi}} \otimes \bar{\boldsymbol{\xi}} = k_0 \widehat{\Gamma}(\boldsymbol{\xi}), \quad \widehat{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{I} - \bar{\boldsymbol{\xi}} \otimes \bar{\boldsymbol{\xi}} = \frac{1}{k_0} \widehat{\Delta}(\boldsymbol{\xi}), \quad \bar{\boldsymbol{\xi}} = \frac{\boldsymbol{\xi}}{|\boldsymbol{\xi}|} \quad (3.49)$$

3.2.2 Résolution à l'aide de schémas itératifs

Prenons l'équation (3.45), la résolution à l'aide d'un schéma itératif en série de Neumann donne :

$$\mathbf{e} = \sum_{n=0}^{\infty} (-\Gamma^0 * \delta \mathbf{K} .)^n \mathbf{E} = (\mathbf{I} + \Gamma^0 * \delta \mathbf{K} .)^{-1} \mathbf{E} \quad (3.50)$$

D'une façon analogue, on a pour la formulation duale :

$$\mathbf{q} = \sum_{n=0}^{\infty} (-\Delta^0 * \delta \mathbf{R} .)^n \mathbf{Q} = (\mathbf{I} + \Delta^0 * \delta \mathbf{R} .)^{-1} \mathbf{Q} \quad (3.51)$$

Si les séries de Neumann (3.50) et (3.51) convergent, alors il est possible de calculer numériquement \mathbf{e} ou \mathbf{q} en tronquant la série à un ordre suffisamment grand qui est l'idée principale des méthodes itératives. Rappelons les schémas de résolution déjà proposés dans la littérature :

- Le schéma itératif primal, formulé avec le gradient de température \mathbf{e} (cf. [59, 21]) qui est basé sur le développement en série (3.50) et pour lequel on utilise la relation de récurrence :

$$\mathbf{e}^{i+1} = \mathbf{E} - \Gamma^0 * \delta \mathbf{K} . \mathbf{e}^i \quad (3.52)$$

et qui est initialisé avec $\mathbf{e}^{i=1} = \mathbf{E}$. D'autre part, ce schéma itératif peut être simplifié en observant que pour tout vecteur irrotationnel \mathbf{e}^i , nous avons la relation :

$$\Gamma^0 * \mathbf{K}^0 . \mathbf{e}^i = \mathbf{e}^i - \mathbf{E} \quad (3.53)$$

Par conséquence, le schéma itératif devient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{q}^i(\mathbf{x}) = \mathbf{K}(\mathbf{x}).\mathbf{e}^i(\mathbf{x}) \\ \widehat{\mathbf{q}}^i(\boldsymbol{\xi}) = \mathcal{F}(\mathbf{q}^i(\mathbf{x})) \\ \text{Test de convergence} \\ \widehat{\mathbf{e}}^{i+1}(\boldsymbol{\xi}) = \widehat{\mathbf{e}}^i(\boldsymbol{\xi}) - \widehat{\Gamma}^0(\boldsymbol{\xi}).\widehat{\mathbf{q}}^i(\boldsymbol{\xi}) \\ \mathbf{e}^i(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1}(\widehat{\mathbf{e}}^i(\boldsymbol{\xi})) \end{array} \right. \quad (3.54)$$

Ici \mathcal{F} et \mathcal{F}^{-1} désignent la transformée de Fourier et son inverse. Les calculs sont réalisés à l'aide de l'algorithme FFT qui présente l'avantage de réduire considérablement les temps de calcul. Puisque la solution à convergence est donnée pour un flux à divergent nul, on utilise le critère de convergence :

$$\frac{\|\widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi}).\widehat{\mathbf{q}}^i(\boldsymbol{\xi})\|}{\|\widehat{\mathbf{q}}^i(\boldsymbol{\xi})\|} < \epsilon \quad (3.55)$$

où $\widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi})$ est donné par (3.49).

- Le schéma itératif dual (cf. [17, 21]) est basé sur le développement en série (3.46) et une relation de récurrence formulée avec le flux \mathbf{q} . Ce schéma itératif s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{e}^i(\mathbf{x}) = \mathbf{R}(\mathbf{x}).\mathbf{q}^i(\mathbf{x}) \\ \widehat{\mathbf{e}}^i(\boldsymbol{\xi}) = \mathcal{F}(\mathbf{e}^i(\mathbf{x})) \\ \text{Test de convergence} \\ \widehat{\mathbf{q}}^{i+1}(\boldsymbol{\xi}) = \widehat{\mathbf{q}}^i(\boldsymbol{\xi}) - \widehat{\Delta}^0(\boldsymbol{\xi}).\widehat{\mathbf{e}}^i(\boldsymbol{\xi}) \\ \mathbf{q}^i(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1}(\widehat{\mathbf{q}}^i(\boldsymbol{\xi})) \end{array} \right. \quad (3.56)$$

et qui est initialisé avec la valeur $\mathbf{q}^0(\mathbf{x}) = \mathbf{Q}$, la solution à convergence correspond à un champ $\widehat{\mathbf{e}}$ qui est à rotationnel nul. On utilise donc le critère de convergence :

$$\frac{\|\widehat{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\xi}).\widehat{\mathbf{e}}^i(\boldsymbol{\xi})\|}{\|\widehat{\mathbf{e}}^i(\boldsymbol{\xi})\|} < \epsilon \quad (3.57)$$

où $\widehat{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\xi})$ est donné par (3.49).

- Le schéma itératif en polarisation (cf. [63]) qui est formulé avec \mathbf{p} et tel que :

$$\mathbf{p}(\mathbf{x}) = (\mathbf{K}(\mathbf{x}) - \mathbf{K}^0).\mathbf{e}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{q}(\mathbf{x}) = \mathbf{K}^0.\mathbf{e}(\mathbf{x}) + \mathbf{p}(\mathbf{x}) \quad (3.58)$$

Le schéma itératif est défini par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{p}^i(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1}(\widehat{\mathbf{p}}^i(\boldsymbol{\xi})) \\ \mathbf{e}^i(\mathbf{x}) = (\mathbf{K}(\mathbf{x}) - \mathbf{K}^0)^{-1}.\mathbf{p}^i(\mathbf{x}) \\ \widehat{\mathbf{e}}^i(\boldsymbol{\xi}) = \mathcal{F}(\mathbf{e}^i(\mathbf{x})) \\ \widehat{\mathbf{q}}^i(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{K}^0.\widehat{\mathbf{e}}^i(\boldsymbol{\xi}) + \widehat{\mathbf{p}}^i(\boldsymbol{\xi}) \\ \text{Test de convergence} \\ \widehat{\mathbf{p}}^{i+1}(\boldsymbol{\xi}) = \widehat{\mathbf{p}}^i(\boldsymbol{\xi}) - \alpha\widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi}).\widehat{\mathbf{q}}^i(\boldsymbol{\xi}) - \beta\widehat{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\xi}).\mathbf{K}^0.\widehat{\mathbf{e}}^i(\boldsymbol{\xi}) - \gamma\mathbf{K}^0.(\widehat{\mathbf{e}}^i(0) - \mathbf{E})\mathbf{1}_\xi \end{array} \right. \quad (3.59)$$

où $\mathbf{p}^0(\mathbf{x}) = 0$ est pris comme premier terme de la série. Dans (3.59) α , β et γ sont trois coefficients qui seront choisis afin d'obtenir la meilleure convergence. On utilise un critère formulé à la fois sur $\widehat{\mathbf{e}}^i$ et $\widehat{\mathbf{q}}^i$:

$$\max \left(\frac{\|\widehat{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \widehat{\mathbf{e}}^i(\boldsymbol{\xi})\|}{\|\widehat{\mathbf{e}}^i(\boldsymbol{\xi})\|}, \frac{\|\widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \widehat{\mathbf{q}}^i(\boldsymbol{\xi})\|}{\|\widehat{\mathbf{q}}^i(\boldsymbol{\xi})\|} \right) < \epsilon \quad (3.60)$$

Le schéma primal et dual sont appelés schémas de base. Le schéma en polarisation fait partie des schémas dits accélérés tel que le schéma de Eyre et Milton [35, 61], les schémas de Michel, Moulinec et Suquet [58, 60] ou encore Torquato [87]. Ces schémas sont des cas particuliers de l'approche en polarisation (cf. [68]).

Les solutions obtenues par ces schémas serviront de référence pour évaluer les solutions analytiques que nous proposons dans la suite de ce chapitre.

3.3 Estimation des propriétés thermiques effectives

3.3.1 Approximation de la solution de l'équation intégrale

Pour estimer les propriétés élastiques des matériaux composites, Nemat-Nasser, Iwakuma et Hejazi (NIH) [70] ont formulé l'équation intégrale pour la déformation libre et calculé approximativement sa moyenne. Les applications numériques [40] ont montré que ces estimations fonctionnent très bien pour les composites avec des inclusions sphériques noyées dans une matrice. Dans ce travail, on se sert de la similitude entre l'élasticité et la conduction pour appliquer l'approche NIH au problème de conduction thermique.

En choisissant la matrice comme matériau de référence, $\mathbf{K}^0 = \mathbf{K}^M$, la conductivité effective peut être déterminée à partir de la valeur moyenne de \mathbf{e}^* . Effectivement, en moyennant de chaque côté de (3.29) sur le volume de la cellule V et en utilisant la définition (3.6) de \mathbf{K}^{eff} et le fait que \mathbf{e}^* est nul dans la matrice, on obtient :

$$\mathbf{K}^{\text{eff}} \cdot \mathbf{E} = \mathbf{K}^M \cdot [\mathbf{E} - f \langle \mathbf{e}^*(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega}], \quad f = \frac{\Omega}{V} \quad (3.61)$$

Ici, Ω et f sont respectivement le volume occupé par l'inclusion dans la cellule et sa fraction volumique. L'évaluation de $\langle \mathbf{e}^*(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega}$ vient de l'équation intégrale (3.38). En choisissant la matrice comme matériau de référence, la moyenne de (3.38) sur Ω donne :

$$(\mathbf{K}^M - \mathbf{K}^I) \cdot \left[\mathbf{E} + \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} \widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi}) \langle e^{i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}} \rangle_{\Omega} \widehat{\mathbf{e}}^*(\boldsymbol{\xi}) \right] = \mathbf{K}^M \langle \mathbf{e}^*(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega}. \quad (3.62)$$

Sachant que $\mathbf{e}^*(\mathbf{x})$ est nul dans la matrice, l'approximation de type NIH concerne l'évaluation de $\widehat{\mathbf{e}}^*(\boldsymbol{\xi})$ comme suit :

$$\widehat{\mathbf{e}}^*(\boldsymbol{\xi}) = f \langle \mathbf{e}^*(\mathbf{x}) e^{-i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}} \rangle_{\Omega} \simeq f \langle \mathbf{e}^*(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega} \langle e^{-i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}} \rangle_{\Omega} \quad (3.63)$$

Dans le cas limite où l'inclusion est une ellipsoïde et $f \rightarrow 0$, cette approximation devient exacte puisque \mathbf{e}^* est uniforme à l'intérieur de l'inclusion. Cette propriété est démontrée par Eshelby [45, 34] pour l'élasticité. Pour f finie, la simplification (3.63) permet d'obtenir des estimation de \mathbf{K}^{eff} plus précise que les schémas classiques basés sur la solution d'Eshelby. On définit les fonctions $I(\boldsymbol{\xi})$ et $P(\boldsymbol{\xi})$ par :

$$I(\boldsymbol{\xi}) = \Omega \langle e^{i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}} \rangle_{\Omega}, \quad P(\boldsymbol{\xi}) = \frac{f}{\Omega^2} I(\boldsymbol{\xi}) I(-\boldsymbol{\xi}), \quad (3.64)$$

où $I(\boldsymbol{\xi})$ est appelé la fonction de forme et $P(\boldsymbol{\xi})$ le facteur de forme.

En remplaçant (3.63) dans (3.62) et en tenant compte de (3.64), nous obtenons la moyenne $\langle \mathbf{e}^*(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega}$:

$$\langle \mathbf{e}^*(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega} = \left[\mathbf{K}^M - (\mathbf{K}^M - \mathbf{K}^I) \cdot \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} \widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi}) P(\boldsymbol{\xi}) \right]^{-1} \cdot (\mathbf{K}^M - \mathbf{K}^I) \cdot \mathbf{E} \quad (3.65)$$

et l'expression explicite de la conductivité effective grâce à (3.61) :

$$\mathbf{K}^{\text{eff}} = \mathbf{K}^M - f \mathbf{K}^M \cdot \left[\mathbf{K}^M - (\mathbf{K}^M - \mathbf{K}^I) \cdot \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} \widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi}) P(\boldsymbol{\xi}) \right]^{-1} \cdot (\mathbf{K}^M - \mathbf{K}^I) \quad (3.66)$$

Une approximation similaire peut être appliquée à la formulation duale (3.43). Au lieu de calculer $\langle \mathbf{e}^*(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega}$, on calcule $\langle \mathbf{q}^*(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega}$ à partir de (3.43)

$$\langle \mathbf{q}^*(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega} = \left[\mathbf{R}^M - (\mathbf{R}^M - \mathbf{R}^I) \cdot \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} \widehat{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\xi}) P(\boldsymbol{\xi}) \right]^{-1} \cdot (\mathbf{R}^M - \mathbf{R}^I) \cdot \mathbf{Q} \quad (3.67)$$

puis on obtient la résistivité effective par la formule :

$$\mathbf{R}^{\text{eff}} = \mathbf{R}^M - f \mathbf{R}^M \cdot \left[\mathbf{R}^M - (\mathbf{R}^M - \mathbf{R}^I) \cdot \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} \widehat{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\xi}) P(\boldsymbol{\xi}) \right]^{-1} \cdot (\mathbf{R}^M - \mathbf{R}^I) \quad (3.68)$$

3.3.2 Microstructures avec symétries

Dans beaucoup d'applications présentées par la suite, la microstructure possède des symétries qui permet de simplifier les expressions (3.66) et (3.68). Supposons d'abord que la matrice et les inclusions sont thermiquement isotropes ayant les conductivités k_M et k_I . Grâce à l'isotropie de la matrice, les tenseurs $\widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi})$ et $\widehat{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\xi})$ admettent des formes simples (3.49). Évidemment, avec (3.64), la symétrie de l'inclusion dans l'espace physique \mathbf{x} peut être liée à la symétrie de $I(\boldsymbol{\xi})$ dans l'espace de Fourier.

On choisit de travailler directement dans l'espace de Fourier et on désigne \mathcal{S} l'ensemble des vecteurs d'onde décrits par (3.31). Dans les cas où $P(\boldsymbol{\xi})$ et \mathcal{S} satisfont les deux conditions suivantes :

i) $P(\boldsymbol{\xi})$ et \mathcal{S} sont invariants par une transformation de réflexion par rapport à l'un des trois plans $O\xi_i\xi_j$ ($i, j = 1, 2, 3$)

$$P(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = P(\pm\xi_1, \pm\xi_2, \pm\xi_3), \quad \text{et} \quad (\pm\xi_1, \pm\xi_2, \pm\xi_3) \in \mathcal{S} \quad (3.69)$$

ii) $P(\boldsymbol{\xi})$ et \mathcal{S} sont invariants par permutation de deux indices i, j

$$\begin{aligned} P(\xi_1, \xi_2, \xi_3) &= P(\xi_1, \xi_3, \xi_2) = P(\xi_3, \xi_2, \xi_1) = P(\xi_2, \xi_1, \xi_3), \\ \text{et} \quad (\xi_1, \xi_2, \xi_3), (\xi_1, \xi_3, \xi_2), (\xi_3, \xi_2, \xi_1), (\xi_2, \xi_1, \xi_3) &\in \mathcal{S}, \end{aligned} \quad (3.70)$$

alors les sommes infinies $\sum \widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi})P(\boldsymbol{\xi})$ et $\sum \widehat{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\xi})P(\boldsymbol{\xi})$ sont diagonales,

$$\sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} \widehat{\mathbf{S}}(\boldsymbol{\xi})P(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\mathbf{I}}{3} \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} P(\boldsymbol{\xi}), \quad \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} \widehat{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\xi})P(\boldsymbol{\xi}) = \frac{2\mathbf{I}}{3} \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} P(\boldsymbol{\xi}) \quad (3.71)$$

La première condition (3.69) implique que les termes non-diagonaux disparaissent

$$\sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} \bar{\xi}_i \bar{\xi}_j P(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = 0, \quad i \neq j, \quad (3.72)$$

Avec la deuxième condition (3.70), on peut déduire que tous les termes diagonaux sont identiques

$$\begin{aligned} \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} \bar{\xi}_1^2 P(\xi_1, \xi_2, \xi_3) &= \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} \bar{\xi}_2^2 P(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} \bar{\xi}_3^2 P(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \\ &= \frac{1}{3} \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} (\bar{\xi}_1^2 + \bar{\xi}_2^2 + \bar{\xi}_3^2) P(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \frac{1}{3} \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} P(\boldsymbol{\xi}) \end{aligned} \quad (3.73)$$

Par conséquent, le matériau effectif est isotrope et la conductivité k^{eff} est donnée par (3.66) :

$$k^{\text{eff}} = k_M - \frac{fk_M}{\frac{k_M}{k_M - k_I} - \frac{1}{3} \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} P(\boldsymbol{\xi})}, \quad (3.74)$$

ou par (3.68) :

$$k^{\text{eff}} = \frac{k_M}{1 - \frac{f}{\frac{k_I}{k_I - k_M} - \frac{2}{3} \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} P(\boldsymbol{\xi})}} \quad (3.75)$$

L'ensemble des vecteurs discrets \mathcal{S} spécifié par (3.31) dépend uniquement de la dimension de la cellule périodique. Comme ce dernier est un cube, les deux conditions pour \mathcal{S} sont automatiquement satisfaites. La validité des conditions $P(\boldsymbol{\xi})$ dépend de la répartition des inclusions à l'intérieur de la cellule. Toutefois, pour les structures considérées dans les sections suivantes (réseaux cubiques de sphères ou la distribution isotrope de sphères), ces deux conditions pour $P(\boldsymbol{\xi})$ sont également réunies.

3.4 Réseaux cubiques de sphères rigides

3.4.1 Réseau cubique simple (CS)

Avant de commencer, notons d'abord que le coefficient de forme $I(\boldsymbol{\xi})$ pour une sphère de volume V_s centré en $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_c$ s'écrit :

$$\int_{V_s} e^{i\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{x}} d\boldsymbol{x} = 3V_s \frac{\sin \eta - \eta \cos \eta}{\eta^3} e^{i\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{x}_c}, \quad \eta = \xi R, \quad V_s = \frac{4\pi R^3}{3}, \quad \xi = |\boldsymbol{\xi}|, \quad (3.76)$$

Dans les structures CS, l'inclusion sphérique est située au centre de la cellule périodique (figure 3.1a) ce qui correspond à $\boldsymbol{x}_c = 0$. Compte tenu de (3.76), on observe que les deux fonctions $I(\boldsymbol{\xi})$ et $P(\boldsymbol{\xi})$ dépendent uniquement du module ξ

$$I(\boldsymbol{\xi}) = \frac{3(\eta \cos \eta - \sin \eta)}{\eta^3}, \quad P(\boldsymbol{\xi}) = \frac{9f(\eta \cos \eta - \sin \eta)^2}{\eta^6}, \quad (3.77)$$

et vérifient ainsi les deux conditions (3.69) et (3.70). Le reste du travail consiste à évaluer la somme infinie $\sum_{\boldsymbol{\xi}} P(\boldsymbol{\xi})$ dans (3.74). On remarque que les points $\boldsymbol{\xi}$ forment une grille

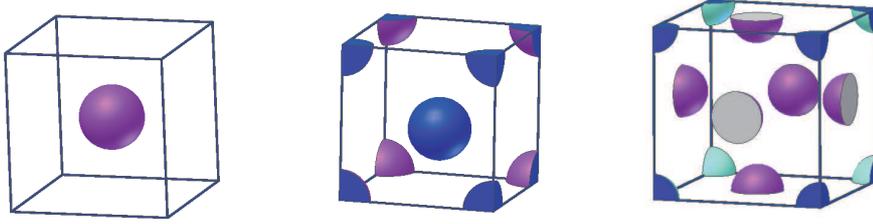


FIGURE 3.1 – Cellule de base pour les microstructures cubiques (de gauche à droite : cubique simple, cubique centré, cubique faces centrées)

régulière avec un espacement de $2\pi/a$ (figure 3.2). Par conséquent, en prenant un volume dV suffisamment grand, le nombre total de points dN contenu dans dV peut être estimé en multipliant dV avec la densité de points ρ .

$$dN = \rho dV, \quad \rho = \frac{a^3}{8\pi^3}. \quad (3.78)$$

A grand $\boldsymbol{\xi}$, $P(\boldsymbol{\xi})$ varie lentement, ce qui permet de remplacer $\sum_{\boldsymbol{\xi}} P(\boldsymbol{\xi})$ dans la région dV par la formule [85] :

$$\sum_{\boldsymbol{\xi} \in (dV \cap \mathbb{S})} P(\boldsymbol{\xi}) = P(\boldsymbol{\xi}) dN = P(\boldsymbol{\xi}) \rho dV, \quad (3.79)$$

La formule précédente peut être généraliser pour un domaine lointain D quelconque par :

$$\sum_{\boldsymbol{\xi} \in (D \cap \mathbb{S})} P(\boldsymbol{\xi}) = \rho \int_D P(\boldsymbol{\xi}) dV. \quad (3.80)$$

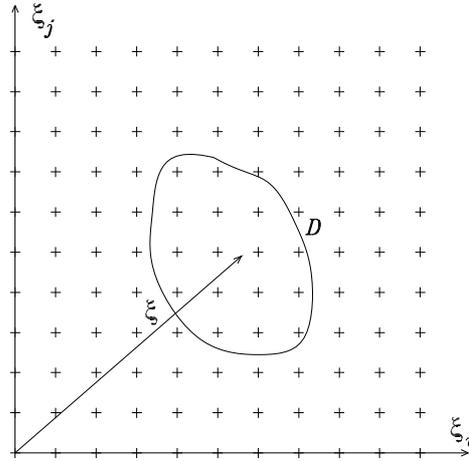


FIGURE 3.2 – La grille de ξ dans un plan. La somme de réseaux dans le volume D est estimée par $\rho \int_D P(\xi) dV$

A petit ξ , $P(\xi)$ fluctue fortement et l'approximation ci-dessus n'est plus valable. Pour calculer la somme infinie avec une bonne précision, les premiers termes de la série seront retenus et le reste sera estimé analytiquement avec l'intégrale. La somme infinie $\sum_{\xi} P(\xi)$ peut être estimée par la formule :

$$\sum_{\xi \neq 0} P(\xi) \simeq \sum_{0 < |\xi| < \xi_c} P(\xi) + \frac{a^3}{2\pi^2} \int_{\xi_c}^{\infty} P(\xi) \xi^2 d\xi, \quad (3.81)$$

dans laquelle ξ_c est la distance qui définit le nombre de termes initiaux pris en compte dans cette nouvelle expression. Par des changements de variables, l'intégrale dans (3.81) est réécrite comme suit

$$\frac{a^3}{2\pi^2} \int_{\xi_c}^{\infty} P(\xi) \xi^2 d\xi = \frac{6}{\pi} \int_{\eta_c}^{\infty} \frac{[\eta \cos \eta - \sin \eta]^2}{\eta^4} d\eta, \quad \eta = \xi R, \quad \eta_c = \xi_c R \quad (3.82)$$

On note que la primitive est donnée par l'expression analytique

$$\int \frac{[\eta \cos \eta - \sin \eta]^2}{\eta^4} d\eta = \frac{\cos 2\eta}{6\eta} + \frac{1}{3} \text{Si}(2\eta) - \frac{1}{2\eta} - \frac{1}{6\eta^3} + \frac{\sin 2\eta}{3\eta^2} + \frac{\cos 2\eta}{6\eta^3} \quad (3.83)$$

où $\text{Si}(\eta)$ est la fonction sinus intégral, définit par :

$$\text{Si}(\eta) = \int_0^{\eta} \frac{\sin \eta'}{\eta'} d\eta'. \quad (3.84)$$

Par conséquent, on obtient la nouvelle expression pour la somme infinie (3.81) :

$$\sum_{\xi \neq 0} P(\xi) \simeq \sum_{0 < |\xi| < \xi_c} P(\xi) + \frac{3 - \cos 2\eta_c}{\pi \eta_c} + \frac{2 \sin^2 \eta_c}{\pi \eta_c^3} - \frac{2 \sin 2\eta_c}{\pi \eta_c^2} - \frac{2}{\pi} \text{Si}(2\eta_c) + \quad (3.85)$$

Dans les applications, on ne garde que 4 termes initiaux, ce qui correspond à $\xi_c = 2\epsilon/R$ où $\epsilon = 2\pi R/a$. La formule explicite de $\frac{1}{3} \sum_{\xi \neq 0} P(\xi)$ devient alors :

$$\begin{aligned} \frac{1}{3} \sum_{\xi \neq 0} P(\xi) \simeq f & \left[18 \frac{(\epsilon \cos \epsilon - \sin \epsilon)^2}{\epsilon^6} + 36 \frac{(\sqrt{2}\epsilon \cos \sqrt{2}\epsilon - \sin \sqrt{2}\epsilon)^2}{8\epsilon^6} + \right. \\ & \left. + 24 \frac{(\sqrt{3}\epsilon \cos \sqrt{3}\epsilon - \sin \sqrt{3}\epsilon)^2}{27\epsilon^6} + 18 \frac{(2\epsilon \cos 2\epsilon - \sin 2\epsilon)^2}{64\epsilon^6} \right] + \\ & + \frac{1}{3\pi} \left[\frac{3 - \cos 4\epsilon}{2\epsilon} + \frac{2 \sin^2 2\epsilon}{8\epsilon^3} - \frac{2 \sin 4\epsilon}{4\epsilon^2} - 2\text{Si}(4\epsilon) + \pi \right] \end{aligned} \quad (3.86)$$

Finalement, il suffit de remplacer (3.86) dans (3.74) et (3.75) pour obtenir la solution analytique pour k^{eff} .

3.4.2 Réseau cubique centré (CC)

Dans les structures CC, une sphère est située au centre de la cellule cubique périodique et huit huitièmes se trouvent aux huit coins (figure 3.1b). En se basant sur (3.76) et (3.64), la fonction $P(\xi)$ est donnée par l'expression suivante :

$$P(\xi) = \frac{9f}{4} \frac{[\eta \cos \eta - \sin \eta]^2}{\eta^6} [1 + \cos \pi(n_1 + n_2 + n_3)]^2 \quad (3.87)$$

Ce facteur de forme $P(\xi)$ satisfait les deux conditions (3.69) et (3.70) et la somme infinie de $P(\xi)$ peut être estimée avec la même procédure comme celle établie précédemment. On note que le terme $[1 + \cos \pi(n_1 + n_2 + n_3)]^2$ peut prendre l'une des deux valeurs 0 ou 4 avec la même probabilité : cela dépend si $n_1 + n_2 + n_3$ est pair ou impair. En moyenne, la somme de $P(\xi)$ peut être estimée dans le domaine dV :

$$\sum_{\xi \in (dV \cap S)} P(\xi) = \rho \bar{P}(\xi) dV, \quad (3.88)$$

où $\bar{P}(\xi)$ est la valeur moyenne :

$$\bar{P}(\xi) = \frac{9f}{4} \frac{[\eta \cos \eta - \sin \eta]^2}{\eta^6} \left[\frac{1}{2} \cdot 0 + \frac{1}{2} \cdot 4 \right] = \frac{9f[\eta \cos \eta - \sin \eta]^2}{2\eta^6} \quad (3.89)$$

Alors, la somme infinie $\sum_{\xi \neq 0} P(\xi)$ devient :

$$\sum_{\xi \neq 0} P(\xi) \simeq \sum_{0 < |\xi| < \xi_c} P(\xi) + \frac{a^3}{2\pi^2} \int_{\xi_c}^{\infty} \bar{P}(\xi) \xi^2 d\xi \quad (3.90)$$

Finalement, en gardant les 4 termes initiaux avec $\xi_c = \sqrt{8\epsilon}/R$, la somme infinie peut être calculée avec la formule analytique suivante :

$$\begin{aligned} \frac{1}{3} \sum_{\xi \neq 0} P(\xi) \simeq f & \left[36 \frac{(\sqrt{2}\epsilon \cos \sqrt{2}\epsilon - \sin \sqrt{2}\epsilon)^2}{8\epsilon^6} + 18 \frac{(2\epsilon \cos 2\epsilon - \sin 2\epsilon)^2}{64\epsilon^6} \right. \\ & + 72 \frac{(\sqrt{6}\epsilon \cos \sqrt{6}\epsilon - \sin \sqrt{6}\epsilon)^2}{216\epsilon^6} + 36 \frac{(\sqrt{8}\epsilon \cos \sqrt{8}\epsilon - \sin \sqrt{8}\epsilon)^2}{512\epsilon^6} \left. \right] + \\ & + \frac{1}{3\pi} \left[\frac{3 - \cos 4\sqrt{2}\epsilon}{2\sqrt{2}\epsilon} + \frac{2 \sin^2 2\sqrt{2}\epsilon}{(2\sqrt{2}\epsilon)^3} - \frac{2 \sin 4\sqrt{2}\epsilon}{(2\sqrt{2}\epsilon)^2} - 2\text{Si}(4\sqrt{2}\epsilon) + \pi \right] \end{aligned} \quad (3.91)$$

3.4.3 Réseau cubique à faces centrés (CFC)

Dans les structures CFC, huit huitièmes d'inclusions sont aux coins et six sixièmes sont aux centres des six facettes (figure 3.1c). On utilise toujours la même procédure d'estimation décrite dans la section précédente, on obtient alors :

$$\begin{aligned} \frac{1}{3} \sum_{\xi \neq 0} P(\xi) \simeq f & \left[24 \frac{(\sqrt{3}\epsilon \cos \sqrt{3}\epsilon - \sin \sqrt{3}\epsilon)^2}{27\epsilon^6} + 18 \frac{(2\epsilon \cos 2\epsilon - \sin 2\epsilon)^2}{64\epsilon^6} \right. \\ & + 36 \frac{(\sqrt{8}\epsilon \cos \sqrt{8}\epsilon - \sin \sqrt{8}\epsilon)^2}{512\epsilon^6} + 72 \frac{(\sqrt{11}\epsilon \cos \sqrt{11}\epsilon - \sin \sqrt{11}\epsilon)^2}{1331\epsilon^6} \left. \right] + \\ & + \frac{1}{3\pi} \left[\frac{3 - \cos 2\sqrt{11}\epsilon}{\sqrt{11}\epsilon} + \frac{2 \sin^2 \sqrt{11}\epsilon}{(\sqrt{11}\epsilon)^3} - \frac{2 \sin 2\sqrt{11}\epsilon}{(\sqrt{11}\epsilon)^2} - 2\text{Si}(2\sqrt{11}\epsilon) + \pi \right] \end{aligned} \quad (3.92)$$

3.4.4 Applications numériques

Les différentes solutions analytiques obtenues précédemment sont basées sur des approximations des équations intégrales pour \mathbf{e}^* ou pour \mathbf{q}^* . Dans cette section, ces solutions sont comparées avec des solutions numériques exactes obtenues par la méthode FFT. Le rapport de conductivité entre l'inclusion et la matrice k_I/k_M varie de 10^{-3} à 10^3 et la fraction volumique f varie de 0% à 90% de la valeur maximale f_{\max} . Concernant le schéma itératif basé sur la FFT, une résolution avec une grille de taille $128 \times 128 \times 128$ a été adoptée et une précision de calcul fixée à 10^{-3} .

Pour l'évaluation numérique des sommes dans l'approximations NIH, la valeur $N_c = 128$ est également utilisée, c.a.d que la somme est calculée pour tout $|n_i| < N_c$. Les tests préliminaires montrent que les paramètres adoptés génèrent des résultats satisfaisants avec un coût de calcul raisonnable. La symétrie de la grille par rapport à 9 plans $\xi_i = 0$ et $\xi_i = \pm \xi_j$ ($i, j = 1, 2, 3$) est également exploitée pour maximiser l'efficacité du calcul.

Sur les figures 3.3 à 3.5 on observe un excellent accord entre l'approximation NIH, calculée numériquement, et les expressions analytiques obtenues dans ce chapitre, et ce pour

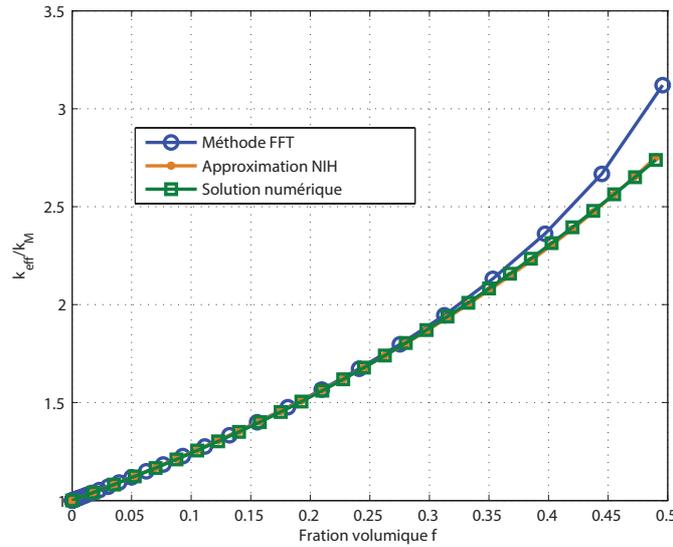


FIGURE 3.3 – Comparaison entre l’approximation NIH, la solution analytique, la solution FFT pour le réseau CS

toutes les valeurs de la fraction volumique des inclusions, pour chaque réseau cubique et pour toutes les valeurs du rapport des conductivités thermiques. L’estimation NIH est assez proche de la solution numérique obtenue par la méthode FFT jusqu’à $f = 0.8f_{\text{max}}$ (voir figures 3.3 à 3.5). Les trois méthodes de calcul basées sur la FFT présentées dans la section 3.2.2 donnent les mêmes résultats alors que les écarts entre l’estimation NIH et la solution FFT deviennent significatifs pour les valeurs élevées de la fraction volumique. Malgré la forme différente, les solutions basées sur e^* et q^* sont très proches l’une de l’autre (voir Fig. 3.6). Concernant l’influence du rapport de conductivité, la figure 3.7 met en évidence un écart plus élevé pour le rapport k_I/k_M ($k_I/k_M = 10^3$) entre l’estimation NIH et la solution exacte par FFT, un très bon accord entre eux pour le petit rapport $k_I/k_M = 10^{-3}$.

3.5 Distribution aléatoire de sphères rigides

3.5.1 Distribution radiale et facteur de structure

Dans cette section, on considère le cas où un cube de taille a contient un grand nombre N de sphères identiques de rayon R (figure 3.8). Les fonctions de forme $I(\xi)$ et $P(\xi)$

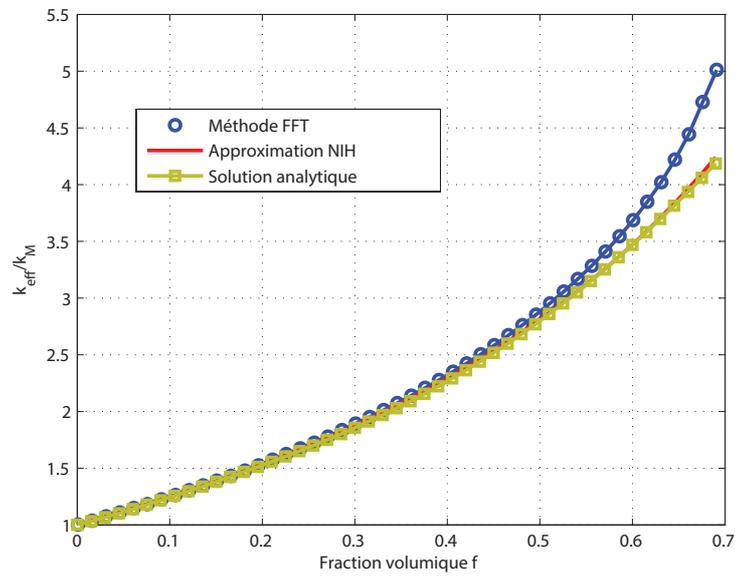


FIGURE 3.4 – Comparaison entre l’approximation NIH, la solution analytique, la solution FFT pour le réseau CC.

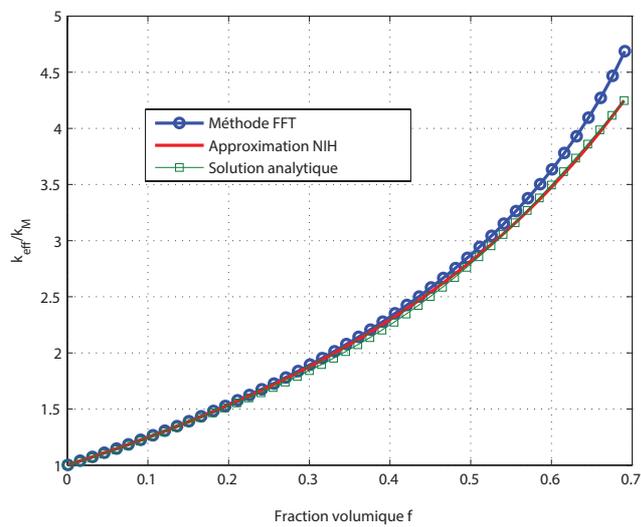


FIGURE 3.5 – Comparaison entre l’approximation NIH, la solution analytique, la solution FFT pour le réseau FCC.

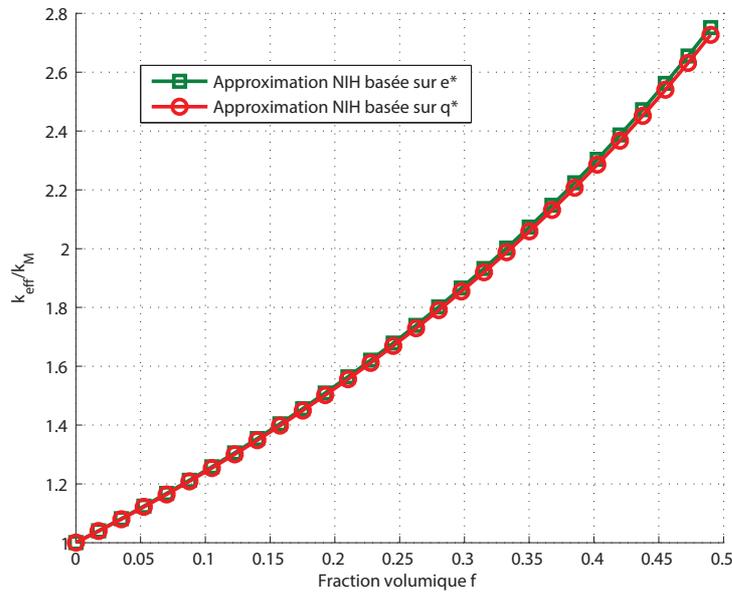


FIGURE 3.6 – Comparaison entre les approximations NIH basé sur e^* , q^* pour le réseau CS

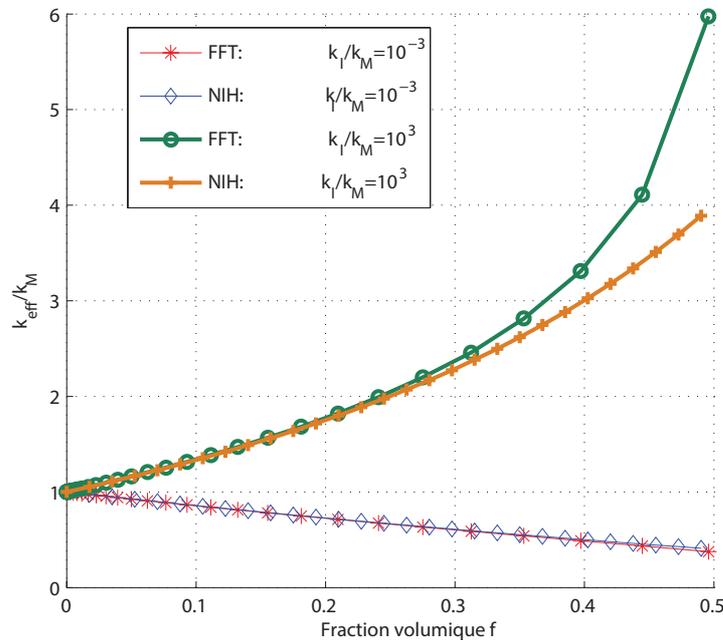


FIGURE 3.7 – Comparaison entre l'approximations NIH et la solution FFT pour le réseau CS et le rapport de contraste élevé ($k_I/k_M = 10^{-3}, 10^3$)

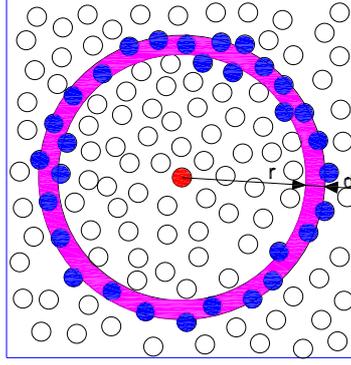


FIGURE 3.8 – Distribution aléatoire de sphères dans la cellule de base

deviennent :

$$\begin{aligned}
 I(\boldsymbol{\xi}) &= V_s \frac{3[\eta \cos \eta - \sin \eta]}{\eta^3} \sum_{i=1}^{i=N} e^{i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}_i}, \\
 P(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{V_s}{V} \frac{9[\eta \cos \eta - \sin \eta]^2}{\eta^6} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{i=N} e^{i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}_i} \sum_{i=1}^{i=N} e^{-i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}_i}, \quad (3.93)
 \end{aligned}$$

où \mathbf{x}_i est la position de la sphère i dans la cellule.

Sous l'hypothèse de milieu ergodique [87], quand le volume tend vers l'infini, la moyenne volumique $\langle \mathbf{e}^* \rangle_\Omega$ (ou $\langle \mathbf{q}^* \rangle_\Omega$) et la double somme $P(\boldsymbol{\xi})$ dans (3.61,3.63) peuvent être remplacées par leurs moyennes d'ensemble $\langle \rangle_{ens}$. On note donc :

$$S(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^{i=N} e^{i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}_i} \sum_{i=1}^{i=N} e^{-i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}_i} \right\rangle_{ens} \quad (3.94)$$

Ici, $S(\boldsymbol{\xi})$ est le facteur de structure statique, un outil de la mécanique statistique pour étudier la distribution locale des particules [26, 38, 56]. Le terme $9[\eta \cos \eta - \sin \eta]^2/\eta^6$ n'est rien d'autre que le facteur de forme d'une particule sphérique. Il est intéressant de remarquer aussi que $S(\boldsymbol{\xi})$ peut être déterminé expérimentalement par la technique de diffraction de rayon X [13]. Le facteur de structure $S(\boldsymbol{\xi})$ est lié à la fonction de distribution radiale (FDR) $g(\mathbf{r})$ par :

$$S(\boldsymbol{\xi}) = 1 + n \int_V e^{-i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{r}} [g(\mathbf{r}) - 1] d\mathbf{r}, \quad (3.95)$$

où n est la densité des particules. Concernant la densité des particules, elle est liée à la fraction volumique f par :

$$f = nV_s = \frac{4\pi R^3}{3} n \quad (3.96)$$

Quand $g(\mathbf{r})$ est isotrope et $V \rightarrow \infty$, $S(\boldsymbol{\xi})$ est une fonction de $|\boldsymbol{\xi}|$ seulement. Par un changement de variable, (3.95) devient :

$$S(\boldsymbol{\xi}) = 1 + 3f \int_0^\infty \frac{\sin \eta \bar{r}}{\eta} [g(r) - 1] \bar{r} d\bar{r}, \quad \bar{r} = \frac{r}{R} \quad (3.97)$$

Enfin, la nouvelle forme pour $P(\boldsymbol{\xi})$ utilisant le facteur de structure statique $S(\boldsymbol{\xi})$ est réécrit comme ci-dessous :

$$P(\boldsymbol{\xi}) = \frac{12\pi[\eta \cos \eta - \sin \eta]^2}{\eta^6} \left(\frac{R}{a}\right)^3 S(\boldsymbol{\xi}) \quad (3.98)$$

La somme infinie de $P(\boldsymbol{\xi})$ peut être évaluée analytiquement avec la procédure décrite dans la section précédente, c'est à dire que :

$$\sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} P(\boldsymbol{\xi}) \simeq \sum_{0 < |\boldsymbol{\xi}| < \xi_c} P(\boldsymbol{\xi}) + \frac{6}{\pi} \int_{\eta_c}^{\infty} \frac{[\eta \cos \eta - \sin \eta]^2}{\eta^4} S(\boldsymbol{\xi}) d\eta, \quad (3.99)$$

ou alors elle est calculée numériquement. Bien que l'équation (3.99) est obtenue à partir de la relation entre $g(r)$ et $S(\boldsymbol{\xi})$ qui est valable pour le volume infini (i.e $R/a \rightarrow 0$), elle peut être utilisée pour déterminer, comme une approximation, la conductivité effective pour les volumes finis. Finalement, pour une fraction volumique donnée f , k^{eff} dépend de la taille de la cellule, via le paramètre R/a .

3.5.2 Solutions analytiques

3.5.2.1 Cas d'un volume infini

Afin d'obtenir la conductivité effective dans ce cas, on calcule la somme infinie de $P(\boldsymbol{\xi})$ pour un volume fini V puis on considère la limite quand $V \rightarrow \infty$:

$$\lim_{R/a \rightarrow 0} \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} P(\boldsymbol{\xi}) \quad (3.100)$$

Lorsque le rapport R/a tend vers 0, la grille de $\boldsymbol{\xi}$ devient plus dense. Pour tout domaine donné D (figure 3.2), il est rempli d'un nombre infini de points $\boldsymbol{\xi}$ avec un espacement infiniment petit. L'équation (3.80) est donc valable pour tous D à condition que $R/a \rightarrow 0$

$$\lim_{R/a \rightarrow 0} \sum_{\boldsymbol{\xi} \in D} P(\boldsymbol{\xi}) \simeq \rho \int_D P(\boldsymbol{\xi}) dV, \quad \forall D \quad (3.101)$$

La somme infinie de $P(\boldsymbol{\xi})$ peut maintenant être évaluée par une intégrale :

$$\lim_{R/a \rightarrow 0} \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} P(\boldsymbol{\xi}) \simeq \frac{6}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{[\eta \cos \eta - \sin \eta]^2}{\eta^4} S(\boldsymbol{\xi}) d\eta \quad (3.102)$$

ou encore :

$$\lim_{R/a \rightarrow 0} \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} P(\boldsymbol{\xi}) \simeq \frac{6}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{[\eta \cos \eta - \sin \eta]^2}{\eta^4} \left[1 + 3f \int_0^{\infty} \frac{\sin \eta \bar{r}}{\eta} [g(r) - 1] \bar{r} d\bar{r} \right] d\eta. \quad (3.103)$$

Comme les sphères ne sont pas interpénétrables, nous avons $g(r) = 0$; $\bar{r} < 2$ et donc la propriété suivante :

$$\int_0^\infty \frac{[\eta \cos \eta - \sin \eta]^2}{\eta^5} \sin(\eta \bar{r}) d\eta = 0, \quad \forall \bar{r} \geq 2 \quad (3.104)$$

Par conséquent, la somme infinie de $P(\boldsymbol{\xi})$ peut être donnée par :

$$\lim_{R/a \rightarrow 0} \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} P(\boldsymbol{\xi}) \simeq 1 - f \quad (3.105)$$

En remplaçant (3.105) dans (3.74) puis en prenant en compte (3.75), on obtient :

$$k^{\text{eff}} = k_M - \frac{f k_M}{\frac{k_M}{k_M - k_I} - \frac{1}{3}(1 - f)}, \quad (3.106)$$

qui est la formule de Clausius-Mossotti (ou bien l'approximation de Maxwell) pour la conductivité [61]. Il est intéressant de remarquer que l'approximation NIH conduit alors à un résultat fonction de k_M , k_I , f mais indépendant de la structure locale des particules $g(r)$ et $S(\boldsymbol{\xi})$. La précision de l'expression (3.106) pour le cas des suspensions de particules sphériques a été discuté dans [20]. Ces auteurs ont montré que (3.106) prédit très bien la conductivité effective lorsque le rapport de contraste de k_I/k_M n'est pas trop élevé et que les particules sont suffisamment éloignées. Dans des situations extrêmes, l'interaction entre les particules est beaucoup plus forte et l'approximation NIH conduit à des résultats erronés. Ces effets peuvent être considérés dans le cadre de la théorie de la percolation et doivent être étudiés par une analyse adaptée [20, 14].

Pour prouver numériquement la solution pour le volume infini (3.106), des études de convergence de (3.100) sont réalisées quand $R/a \rightarrow 0$ et pour deux systèmes présentant une structure différente (figure 3.9) : une distribution bien mélangée (WS pour Well-Stirred) et la distribution Percus-Yevick (PY).

3.5.3 Distribution bien mélangée (WS)

Le premier cas considéré est un système sans structure dont la fonction RDF est exprimée par la fonction de Heaviside

$$g(r) = H(\bar{r} - 2) \quad (3.107)$$

qui correspond à une distribution bien mélangée notée WS pour well-stirred [54, 32]. En combinant les relations (3.97) et (3.107), on obtient les expressions suivantes pour $S(\boldsymbol{\xi})$ et $P(\boldsymbol{\xi})$:

$$\begin{aligned} S(\boldsymbol{\xi}) &= 1 + 3f \frac{2\eta \cos(2\eta) - \sin(2\eta)}{\eta^3}, \\ P(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{12\pi[\eta \cos \eta - \sin \eta]^2}{\eta^6} \left(\frac{R}{a}\right)^3 \left[1 + 3f \frac{2\eta \cos(2\eta) - \sin(2\eta)}{\eta^3}\right] \end{aligned} \quad (3.108)$$

Dans [54], les auteurs ont montré que cette distribution well-stirred est réaliste que pour une fraction volumique $f < 1/8$.

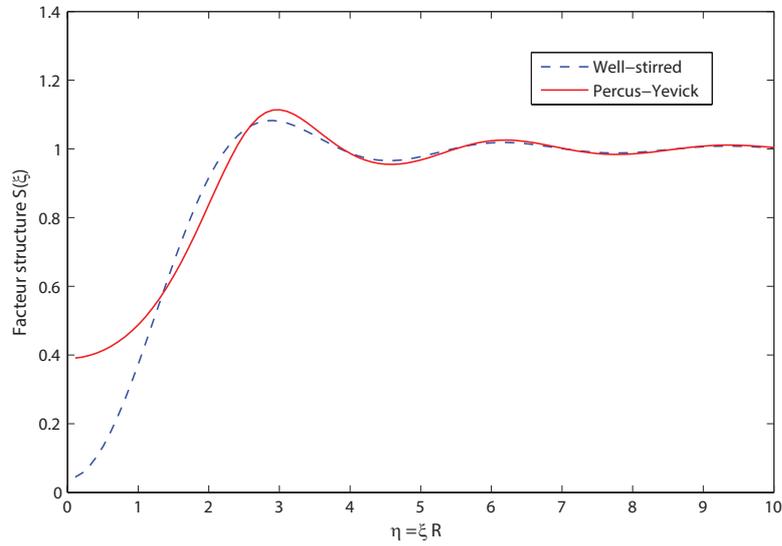


FIGURE 3.9 – Facteur de structure statique $S(\xi)$ à $f = 0.12$ pour les systèmes de sphère durs calculées par (3.108) et (3.113)

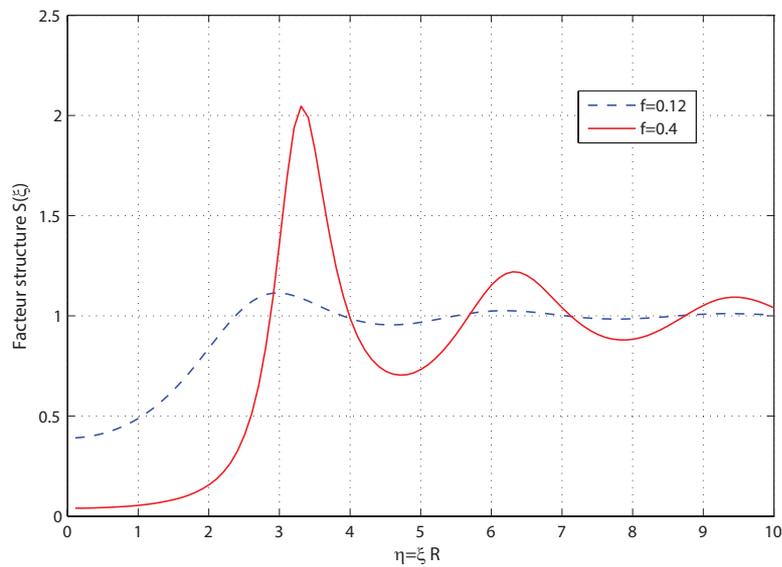


FIGURE 3.10 – Facteur de structure statique $S(\xi)$ pour la distribution Percus-Yeick et pour deux valeurs de la fraction volumique f

3.5.3.1 Distribution Percus-Yevick (PY)

La distribution WS est une approximation brute et valable uniquement pour $f < 1/8$. Dans le cadre de la mécanique statistique, Ornstein et Zernike [73] ont établi une équation intégrale "OZ" pour déterminer la fonction de distribution radiale d'un fluide en équilibre. Percus et Yevick [74] ont proposé des approximations PY qui ont conduit à la condition de fermeture pour résoudre l'équation OZ. Wertheim [92] a résolu analytiquement l'équation PY pour le cas de sphères rigide et Drugan et Willis [32] a utilisé la solution de Wertheim pour déterminer la taille minimale d'un VER. Le calcul suivant est basé sur la solution de Wertheim présenté dans [32]. La solution de [92] pour $g(r)$ est donnée sous la forme de la transformée de Laplace de la fonction RDF

$$\int_0^\infty \bar{r}[g(r) - 1]e^{-s\bar{r}} d\bar{r} = \frac{2sL(2s)}{3f[L(2s) + M(2s)e^{2s}] - \frac{1}{s^2}}, \quad (3.109)$$

où $L(t)$ et $M(t)$ sont des polynômes définis par

$$\begin{aligned} L(t) &= 12f \left[\left(1 + \frac{f}{2}\right)t + (1 + 2f) \right], \\ M(t) &= (1 - f)^2 t^3 + 6f(1 - f)t^2 + 18f^2 t - 12f(1 + 2f) \end{aligned} \quad (3.110)$$

Il n'existe pas de formule analytique pour $g(r)$ mais on peut calculer $S(\boldsymbol{\xi})$ en utilisant (3.97) et (3.109) et la relation entre la transformation de Laplace et la transformation de Fourier. Si s est purement imaginaire, $s = i\eta$, nous pouvons prouver que

$$\int_0^\infty \frac{\sin(\eta\bar{r})}{\eta} [g(r) - 1] \bar{r} d\bar{r} = -\Re \left\{ \frac{1}{i\eta} \int_0^\infty \bar{r}[g(r) - 1]e^{-i\eta\bar{r}} d\bar{r} \right\} \quad (3.111)$$

En combinant (3.109) et (3.111), on peut obtenir $S(\boldsymbol{\xi})$ analytiquement

$$S(\boldsymbol{\xi}) = 1 - \Re \left\{ \frac{2L(2i\eta)}{L(2i\eta) + M(2i\eta)e^{2i\eta}} \right\} \quad (3.112)$$

La variation de $S(\boldsymbol{\xi})$ par rapport à la fraction de volume f est illustrée sur la figure (3.10). La somme infinie de $\sum P(\boldsymbol{\xi})$ devient maintenant

$$\sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} P(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0}} \frac{12\pi[\eta \cos \eta - \sin \eta]^2}{\eta^6} \left(\frac{R}{a}\right)^3 \left[1 - \Re \left\{ \frac{2L(2i\eta)}{L(2i\eta) + M(2i\eta)e^{2i\eta}} \right\} \right] \quad (3.113)$$

3.5.4 Applications numériques

L'ingrédient principale de nos solutions analytiques pour les systèmes aléatoires est $P(\boldsymbol{\xi})$ dans les relations (3.108), (3.113) et qui dépend de f et du rapport R/a . Ce dernier montre l'effet de taille, mais dans les calculs nous nous sommes intéressés à la convergence dans la limite d'un volume infini ($R/a \rightarrow 0$).

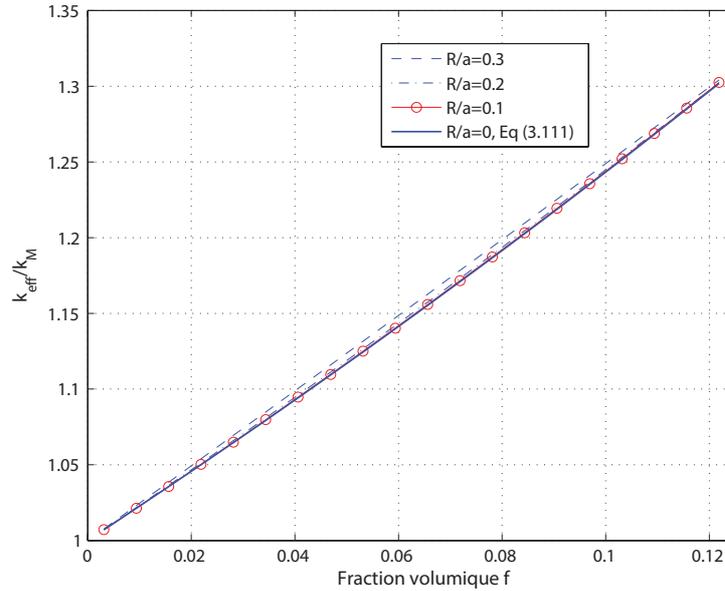


FIGURE 3.11 – L’approximation NIH pour la distribution WS ($k_I/k_M = 10$, $f \leq 1/8$). Les courbes correspondant $R/a < 0.1$ se superposent à la solution correspondant à $R/a = 0$, cf. équation (3.106).

Pour les applications, les paramètres suivants sont utilisés : $k_I/k_M = 10$, f varie de 0 à 0.5 et R/a de 0 à 0.3. Pour un faible rapport R/a , une résolution égale à 1024 pour N_c est nécessaire pour assurer la convergence de la somme.

Concernant la convergence à $R/a \rightarrow 0$, les figures 3.11 et 3.12 montrent que les courbes de conductivité pour les deux distributions PY et WS deviennent stables pour $R/a = 0.1$ et coïncident avec la solution analytique (3.106) pour $R/a = 0$.

3.6 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons établi de nouvelles formules analytiques pour les propriétés de conductivité des composites renforcés par des inclusions de forme sphérique. L’approche utilise le formalisme usuel de l’homogénéisation périodique, les fonctions de Green, les fonctions de forme associées à la géométrie des inclusions et l’approximation NIH qui consiste à considérer une polarisation constante dans l’inclusion. Les résultats sont établis en considérant les symétries qui conduisent à des propriétés macroscopiques isotropes.

Des expressions analytiques sont d’abord établies pour des réseaux cubiques et comparées avec des solutions numériques obtenues par FFT. Les résultats montrent que la solution analytique reproduit parfaitement les résultats numériques pour une large gamme de fractions volumiques. Les résultats ont ensuite été étendus à des distributions aléatoires d’inclusions sphériques. Nous avons montré que les solutions dépendent du facteur de

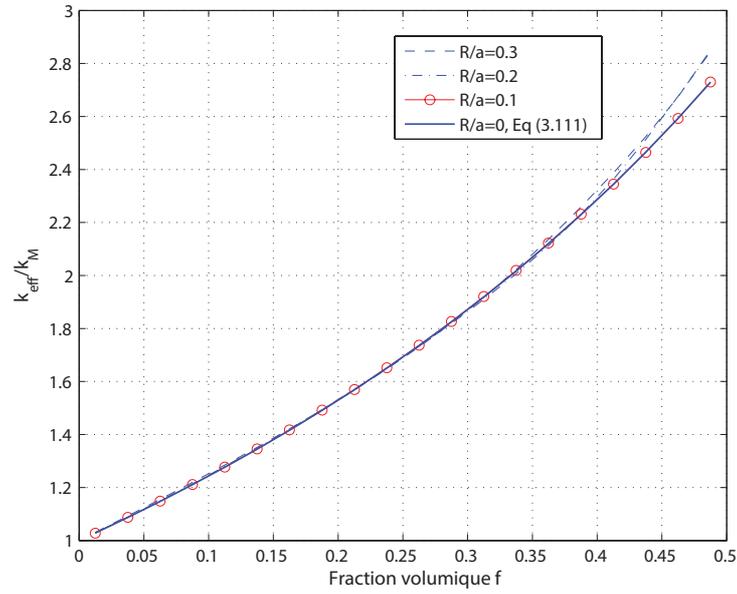


FIGURE 3.12 – L’approximation NIH pour la distribution PY ($k_I/k_M = 10$). Les courbes à $R/a < 0.1$ se superposent à la solution correspondant à $R/a = 0$, cf. équation (3.106).

structure et de la taille de la cellule. En particulier, une étude de convergence dans le cas limite d’un volume infini a également été effectuée pour trouver la conductivité effective.

Chapitre 4

Couplage convection-diffusion dans les milieux poreux

Dans ce dernier chapitre on propose de déterminer numériquement les propriétés de diffusivité d'un milieu poreux saturé par un fluide visqueux. Ce problème a été étudié dans le cadre des approches par homogénéisation périodique par Bloch et Auriault [19], Allaire [3] et dont on rappelle les principaux résultats dans la première section de chapitre. On propose ensuite de nouveaux schémas itératifs basés sur la FFT pour déterminer numériquement le tenseur de diffusivité. Différents exemples numériques seront présentés afin de montrer les capacités de ces nouvelles approches.

4.1 Approche par homogénéisation asymptotique

4.1.1 Couplage convection-diffusion

On considère un milieu poreux périodique saturé dont le fluide et le squelette solide sont tous deux conducteurs de la chaleur avec la diffusivité thermique k_f et k_s . L'équation de transfert de chaleur s'écrit :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k \nabla T), \quad (4.1)$$

où T et k sont respectivement la température et la diffusivité thermique. Le champ de vitesse \mathbf{v} est supposé connu par la résolution des équations de Stokes qui a été abordé dans les deux premiers chapitres. Dans ce chapitre seule la solution au premier ordre est considérée si bien que le champ de vitesse dépend linéairement du gradient de pression \mathbf{G} . L'équation (4.1) est valable pour les deux phases du fait que le champ de vitesse \mathbf{v} est nul dans la phase solide. La diffusivité thermique locale k est une fonction constante par morceaux :

$$k = k_s \quad \text{dans la phase solide,} \quad k = k_f \quad \text{dans la phase fluide} \quad (4.2)$$

On se base toujours sur la procédure d'homogénéisation asymptotique avec le rapport d'échelle $\epsilon = h/L \ll 1$, où h et L sont les longueurs caractéristiques des échelles microscopique et macroscopique. Tout d'abord, les quantités dans (4.1) sont normalisées par

des valeurs caractéristiques par exemple $\mathbf{x} = L\mathbf{x}^*$, $\mathbf{v} = v_c\mathbf{v}^*$, $T = T_cT^*$, $k = k_ck^*$, $t = t_ct^*$ etc... La forme adimensionnelle de (4.1) devient :

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \mathbf{v}^* \cdot \nabla T^* = \nabla \cdot (k^* \nabla T^*) \quad (4.3)$$

A noter que l'équation (4.3) est obtenue sous les hypothèses suivantes :

$$\frac{v_ch}{k_c} = \mathcal{O}(1), \quad \frac{L^2}{k_ct_c} = \mathcal{O}(1) \quad (4.4)$$

Pour obtenir le comportement macroscopique à partir des équations de transport, on peut procéder par deux approches : celle basée sur la moyenne volumique ou celle utilisant les développements asymptotiques. L'approche par moyennes volumiques utilise l'équation de bilan pour un grand volume de matériau poreux et sur lequel sont réalisés des moyennes spatiales [93, 82, 94, 43]. L'approche par homogénéisation asymptotique a déjà été présentée pour les milieux poreux et les composites [5, 19]. Notons que seul la seconde méthode nous permet d'utiliser la méthode FFT pour déterminer les paramètres macroscopiques [86].

4.1.2 Approche par développement asymptotique

Pour faciliter les calculs, nous allons supprimer la notation avec les exposants "*" dans (4.3). En utilisant la technique de la vitesse d'entraînement [3, 2], on admet la forme asymptotique suivante pour la température T :

$$T = \sum_{i=0}^{\infty} \epsilon^i T^i \left(t, \mathbf{x} - \frac{\mathbf{v}'t}{\epsilon}, \mathbf{y} \right), \quad (4.5)$$

Le terme \mathbf{v}' est une vitesse constante dans la cellule et dont le rôle sera justifié plus tard. Les opérateurs différentiels ∇ et $\partial/\partial t$ qui apparaissent dans la dérivée particulière deviennent :

$$\begin{aligned} \nabla \left[T^i \left(t, \mathbf{x} - \frac{\mathbf{v}'t}{\epsilon}, \mathbf{y} \right) \right] &= (\nabla_{\mathbf{x}} T^i + \epsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{y}} T^i) \left(t, \mathbf{x} - \frac{\mathbf{v}'t}{\epsilon}, \mathbf{y} \right), \\ \frac{\partial T^i}{\partial t} \left(t, \mathbf{x} - \frac{\mathbf{v}'t}{\epsilon}, \mathbf{y} \right) &= \left(\frac{\partial T^i}{\partial t} - \epsilon^{-1} \mathbf{v}' \cdot \nabla_{\mathbf{x}} T^i \right) \left(t, \mathbf{x} - \frac{\mathbf{v}'t}{\epsilon}, \mathbf{y} \right), \end{aligned} \quad (4.6)$$

En substituant (4.6) dans l'équation locale adimensionnelle (4.3) sans notation (*), on obtient :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} - \epsilon^{-1} \mathbf{v}' \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \right) (T_0 + \epsilon T_1 + \dots) + \frac{1}{\epsilon} \mathbf{v}' \cdot (\nabla_{\mathbf{x}} + \epsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{y}}) (T_0 + \epsilon T_1 + \dots) = \\ = (\nabla_{\mathbf{x}} + \epsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{y}}) \cdot (k (\nabla_{\mathbf{x}} + \epsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{y}}) (T_0 + \epsilon T_1 + \dots)) \end{aligned} \quad (4.7)$$

En développant, puis en collectant les termes de même puissance en ϵ , on obtient une hiérarchie de problèmes pour les champs de température T^0, T^1, \dots

Ordre ϵ^{-2}

A cet ordre, on a l'équation :

$$\mathbf{v}(\mathbf{y}) \cdot \nabla_{\mathbf{y}} T^0 - \operatorname{div}_{\mathbf{y}}(k(\mathbf{y}) \nabla_{\mathbf{y}} T^0) = 0, \quad (4.8)$$

dont la solution est une fonction de t et \mathbf{x} uniquement : $T^0(t, \mathbf{x}, \mathbf{y}) = T^0(t, \mathbf{x})$.

Ordre ϵ^{-1}

A cet ordre, le problème prend la forme suivante :

$$-\mathbf{v}' \cdot \nabla_{\mathbf{x}} T^0 + \mathbf{v}(\mathbf{y}) \cdot (\nabla_{\mathbf{x}} T^0 + \nabla_{\mathbf{y}} T^1) - \operatorname{div}_{\mathbf{y}}(k(\mathbf{y}) (\nabla_{\mathbf{x}} T^0 + \nabla_{\mathbf{y}} T^1)) = 0 \quad (4.9)$$

En prenant la moyenne de (4.9) il vient :

$$\begin{aligned} -\mathbf{v}' \cdot \nabla_{\mathbf{x}} T^0 + \langle \mathbf{v}(\mathbf{y}) \rangle_V \cdot \nabla_{\mathbf{x}} T^0 + \frac{1}{V} \int_V \mathbf{v}(\mathbf{y}) \cdot \nabla_{\mathbf{y}} T^1 dy \\ - \frac{1}{V} \int_V \operatorname{div}_{\mathbf{y}}(k(\mathbf{y}) (\nabla_{\mathbf{x}} T^0 + \nabla_{\mathbf{y}} T^1)) dy = 0 \end{aligned} \quad (4.10)$$

En reprenant les notations du premier chapitre on pose

$$\mathbf{V} = \langle \mathbf{v}(\mathbf{y}) \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V \mathbf{v}(\mathbf{y}) dy \quad (4.11)$$

la vitesse macroscopique. Dans l'équation (4.10), on peut utiliser le théorème de la divergence pour calculer le dernier terme à droite de l'égalité :

$$\frac{1}{V} \int_V \operatorname{div}_{\mathbf{y}}(k(\mathbf{y}) (\nabla_{\mathbf{x}} T^0 + \nabla_{\mathbf{y}} T^1)) dy = \frac{1}{V} \int_{\partial V} k(\mathbf{y}) (\nabla_{\mathbf{x}} T^0 + \nabla_{\mathbf{y}} T^1) \cdot \mathbf{n} dy \quad (4.12)$$

et qui est nul compte tenu de l'antipériodicité du flux sur les bords de la cellule élémentaire. Toujours dans l'équation (4.10), on a :

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int_V \mathbf{v}(\mathbf{y}) \cdot \nabla_{\mathbf{y}} T^1 dy &= \frac{1}{V} \int_V \operatorname{div}_{\mathbf{y}}(\mathbf{v}(\mathbf{y}) T^1) dy \\ &= \frac{1}{V} \int_{\partial V} \mathbf{v}(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{n} T^1 dy \end{aligned} \quad (4.13)$$

et qui est nul compte tenu de la périodicité de T^1 et de $\mathbf{v}(\mathbf{y})$. Il reste donc dans (4.10) :

$$(\mathbf{V} - \mathbf{v}') \cdot \nabla_{\mathbf{x}} T^0 = 0 \quad (4.14)$$

qui est vérifié si

$$\mathbf{v}' = \mathbf{V} \quad (4.15)$$

Cette condition justifie le choix de \mathbf{v}' . En outre, sans l'introduction de ce terme d'entraînement, cela conduit à $\mathbf{V} = 0$, ce qui n'est pas licite pour le problème d'écoulement.

Compte tenu de la linéarité du problème, le champ T^1 vaut :

$$T^1 = \mathbf{g}(\mathbf{y}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} T^0(t, \mathbf{x}), \quad (4.16)$$

où \mathbf{g} est la solution de l'équation

$$-\mathbf{V} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} T^0 + \mathbf{v}(\mathbf{y}) \cdot (\mathbf{I} + \nabla_{\mathbf{y}}^T \mathbf{g}) \nabla_{\mathbf{x}} T^0 - \operatorname{div}_{\mathbf{y}}(k(\mathbf{y})(\mathbf{I} + \nabla_{\mathbf{y}}^T \mathbf{g}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} T^0) = 0. \quad (4.17)$$

Ordre ϵ^0

L'équation à cet ordre est la suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial T^0}{\partial t} - \mathbf{V} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} T^1 + \mathbf{v}(\mathbf{y}) \cdot (\nabla_{\mathbf{x}} T^1 + \nabla_{\mathbf{y}} T^2) - \operatorname{div}_{\mathbf{y}}(k(\mathbf{y})(\nabla_{\mathbf{x}} T^1 + \nabla_{\mathbf{y}} T^2)) \\ - \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(k(\mathbf{y})(\nabla_{\mathbf{x}} T^0 + \nabla_{\mathbf{y}} T^1)) = 0. \end{aligned} \quad (4.18)$$

En prenant la moyenne de cette équation sur le volume de la cellule unitaire on élimine, comme pour l'ordre précédent, le terme $\mathbf{v}(\mathbf{y}) \cdot \nabla_{\mathbf{y}} T^2$ et le terme sous le divergent "div $_{\mathbf{y}}$ " et ce pour les mêmes raisons déjà évoquées ci-dessus. Il reste alors :

$$\frac{\partial T^0}{\partial t} - \operatorname{div}_{\mathbf{x}} [\langle k(\mathbf{y})(\nabla_{\mathbf{x}} T^0 + \nabla_{\mathbf{y}}^T \mathbf{g} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} T^0) \rangle_V] = 0, \quad (4.19)$$

En utilisant le résultat (4.16), cette dernière relation peut être réécrite sous la forme compacte :

$$\frac{\partial T^0}{\partial t} - \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{K} \cdot \mathbf{E}) = 0. \quad (4.20)$$

Dans laquelle on introduit le tenseur diffusivité thermique effectif \mathbf{K} par :

$$\mathbf{K} = \langle k(\mathbf{y})(\mathbf{I} + \nabla_{\mathbf{y}}^T \mathbf{g}) \rangle - \langle (\mathbf{v} - \mathbf{V}) \otimes \mathbf{g} \rangle. \quad (4.21)$$

et le gradient de température macroscopique

$$\mathbf{E} = \nabla_{\mathbf{x}} T^0 \quad (4.22)$$

Il est à noter que \mathbf{K} est défini de manière unique même si \mathbf{g} est déterminé à une constante près. Le tenseur \mathbf{K} selon la définition (4.21) pouvant être non symétrique, il peut être symétrisé pour l'utilisation dans (4.20) sans poser aucun problème :

$$K_{ij} \rightarrow K_{ij}^s = \frac{1}{2}[K_{ij} + K_{ji}] \quad (4.23)$$

Le terme de convection n'apparaît pas dans (4.20) car il est obtenu dans un système en mouvement avec le fluide. En réintroduisant $T(t, \mathbf{x}) = T^0(t, \mathbf{x} - \mathbf{V}t/\epsilon)$, l'équation macroscopique devient :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{\epsilon} \mathbf{V} \cdot \mathbf{E} = \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{K} \cdot \mathbf{E}) \quad (4.24)$$

A noter que l'équation macroscopique ci-dessus est sans dimension, y compris l'opérateur de divergence. En réintroduisant les grandeurs avec dimensions, on obtient finalement :

$$\nabla \cdot [\mathbf{K} \cdot \nabla T] = \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \mathbf{E} \quad (4.25)$$

Pour déterminer la diffusivité effective, il est nécessaire de résoudre le problème de transfert local (4.9) pour une cellule. En posant $-\nabla_{\mathbf{x}} T^0 \rightarrow \mathbf{E}$, $\mathbf{E} + \nabla_{\mathbf{y}}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{E}) \rightarrow \mathbf{e}$ et $k\mathbf{e} \rightarrow \mathbf{q}$, on réécrit (4.9) sous la forme plus familière :

$$\mathbf{e} = -\nabla T, \quad \mathbf{q} = k\mathbf{e}, \quad \nabla \cdot \mathbf{q} - \mathbf{v} \cdot \mathbf{e} + \mathbf{V} \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (4.26)$$

Il s'agit donc d'un problème de transfert de chaleur classique mais avec le terme source $-\mathbf{v} \cdot \mathbf{e} + \mathbf{V} \cdot \mathbf{E}$. On peut aussi transformer (4.21) en équation de moyenne pour une cellule

$$\mathbf{Q} = \mathbf{K} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{C} \quad (4.27)$$

où \mathbf{C} est la moyenne du terme de convection :

$$\mathbf{C} = \langle (\mathbf{v} - \mathbf{V})\theta \rangle, \quad \theta = T + \mathbf{E} \cdot \mathbf{x} \quad (4.28)$$

Comme le problème est périodique, nous allons utiliser une méthode basée sur la transformée de Fourier pour résoudre le problème à l'échelle microscopique. Mais avant cela on se propose d'établir une solution exacte pour le problème classique d'écoulement entre plans parallèles.

4.2 Solution analytique entre plans parallèles

Nous considérons un problème de référence où le milieu poreux est constitué des pores parallèles de hauteur $2h$ avec la fraction volumique f . Une cellule carrée unitaire de dimension $2H$ centrée à l'origine est considérée sur la figure (4.1). La fraction volumique est alors définie par $f = h/H$.

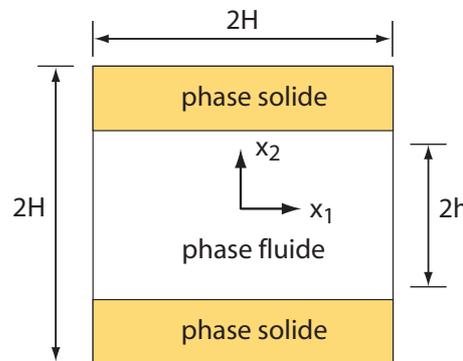


FIGURE 4.1 – Cellule élémentaire d'un milieu poreux composé de pores parallèles.

Par ailleurs, dans le problème de Poiseuille où le gradient de pression agit le long de la direction d'écoulement x_1 , c.a.d $\mathbf{G} = G\mathbf{e}_1$, le champ de vitesse local du fluide admet la forme parabolique suivante [49] :

$$\begin{aligned} v_1(x_2) &= \frac{G}{2\eta_f} [x_2^2 - h^2], & |x_2| \leq h, \\ v_1(x_2) &= 0, & h \leq |x_2| \leq H. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Le champ de vitesse macroscopique devient

$$V_1 = -\frac{Gh^3}{3H\eta_f}. \quad (4.30)$$

Pour le problème de transfert thermique, un gradient température macroscopique est imposé dans la même direction que l'écoulement, soit $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_1$. On adopte la forme suivante pour le champ de température dans la phase fluide et solide :

$$T = Ex_1 + \psi(x_2), \quad (4.31)$$

que l'on substitue dans l'équation de la chaleur. Par conséquent, la fonction $\psi(x_2)$ doit satisfaire les équations différentielles

$$\begin{aligned} \text{Phase fluide : } k_f\psi''(x_2) &= \left[v_1(x_2) + k_s \frac{G^*h^3}{3\eta_f H} \right] E \\ &= \frac{G^*k_s E}{H^3} \left[\frac{x_2^2}{2} - \frac{h^2}{2} + \frac{h^3}{3H} \right] \\ \text{Phase solide : } k_s\psi''(x_2) &= \frac{G^*k_s E h^3}{3H^4} \end{aligned} \quad (4.32)$$

où G^* est le gradient de pression adimensionnel :

$$G^* = \frac{GH^3}{k_s\eta_f} \quad (4.33)$$

En intégrant (4.32) et en utilisant la symétrie du problème, on obtient :

$$\begin{aligned} \text{Phase fluide : } \psi(x_2) &= \frac{G^*k_s E}{H^3k_f} \left[\frac{x_2^2 h^2}{4} - \frac{x_2^4}{24} - \frac{h^3}{6H} x_2^2 \right] + C_1 \\ \text{Phase solide : } \psi(x_2) &= -\frac{G^*k_s E}{H^3k_s} \left[\frac{h^3}{6H} x_2^2 \right] + C_2 + C_3|x_2| \end{aligned} \quad (4.34)$$

où C_1 , C_2 et C_3 sont des constantes d'intégration. La continuité de la température et du flux à l'interface entre le solide et le fluide (à $x_2 \pm h$) conduit à :

$$\begin{aligned} C_3 &= -\frac{G^*h^3k_s E}{3H^3k_s}, \\ C_1 = C_2 &= \frac{G^*h^4k_s E}{24H^4} \left[\frac{4h - 5H}{k_f} + \frac{4(2H - h)}{k_s} \right] \end{aligned} \quad (4.35)$$

Ces deux équations ne sont pas suffisantes pour déterminer C_1 , C_2 et C_3 , ce qui est normal parce que la température est déterminée à une constante près. Le choix de cette constante n'a aucune influence sur les propriétés effectives. Par exemple, on peut fixer la température en posant $\langle T \rangle_V = 0$ et obtient :

$$C_2 = \frac{G^* h^3 k_s E}{H^5} \left[\frac{(5h - 6H)h^2}{45k_f} + \frac{2H^3 + 3Hh^2 - 2h^3}{18k_s} \right] \quad (4.36)$$

Le calcul de la diffusivité effective à partir de la relation (4.21) conduit à :

$$K_{11} = (1 - f)k_s + fk_f + (G^*)^2 k_s^2 f^6 \left[\frac{f(51 - 84f + 35f^2)}{945k_f} + \frac{(1 - f)^3}{27k_s} \right] \quad (4.37)$$

On peut observer que les deux premiers termes dans l'expression de K_{11} correspondents à la solution classique pour une composite stratifié. Le dernier terme est associé au transfert de chaleur par convection. Notons également que dans la direction transverse, la composante K_{22} du tenseur \mathbf{K} , elle n'est pas affectée par l'écoulement et reste inchangé par rapport à la solution classique :

$$K_{22} = \left[\frac{1 - f}{k_s} + \frac{f}{k_f} \right]^{-1} \quad (4.38)$$

La solution exacte (4.37) sera utilisée pour vérifier la validité du schéma de résolution numérique proposé dans la section suivante.

4.3 Résolution par FFT

Dans cette section on établit de nouveaux schémas itératifs basés sur la FFT pour résoudre le problème élémentaire (4.26). Dans la section qui suit on établit d'abord les équations intégrales associées au problème (4.26).

4.3.1 Formulation des équations intégrales

Considérons d'abord le flux \mathbf{q} en équilibre avec un terme source s :

$$\nabla \cdot \mathbf{q} + s = 0 \quad (4.39)$$

et un champ irrotationnel \mathbf{e} :

$$\nabla \wedge \mathbf{e} = 0 \quad (4.40)$$

Dans l'espace Fourier, les équations (4.39) et (4.40) deviennent :

$$\widehat{\mathbf{S}} \cdot \widehat{\mathbf{q}} + \widehat{\omega} \widehat{s} = 0, \quad \widehat{\mathbf{L}} \cdot \widehat{\mathbf{e}} = 0 \quad (4.41)$$

où $\widehat{\mathbf{S}}$, $\widehat{\mathbf{L}}$ sont définis par (3.49) et $\widehat{\omega}$ par :

$$\widehat{\omega} = -i \frac{\xi}{|\xi|^2} \quad (4.42)$$

Lorsque la dernière condition de (4.41) est vérifiée, \mathbf{e} dérive de la température T . La température θ est alors déterminée par :

$$\widehat{\theta} = \widehat{\omega} \cdot \widehat{\mathbf{e}} \quad (4.43)$$

Dans notre problème, le terme source et sa transformée Fourier ont les expressions :

$$s = -\mathbf{v} \cdot \mathbf{e} + \mathbf{V} \cdot \mathbf{E}, \quad \widehat{s} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{E} 1_{\xi} - \widehat{\mathbf{v}} * \widehat{\mathbf{e}} \quad (4.44)$$

On introduit un milieu de référence isotrope de diffusivité $\mathbf{K}^0 = k_0 \mathbf{I}$ comme dans (3.29) et on utilise la polarisation $\mathbf{p} = \delta k \mathbf{e}$ avec $\delta k = k - k_0$. En notant la propriété suivante :

$$\widehat{\mathbf{S}} \cdot \widehat{\omega} = \widehat{\omega} \quad (4.45)$$

et en remplaçant \mathbf{q} par $\delta k \mathbf{e} + k_0 \mathbf{e}$ dans (4.41), il vient alors :

$$\widehat{\mathbf{S}} \cdot \widehat{\mathbf{e}} + \frac{1}{k_0} \widehat{\mathbf{S}} \cdot [\widehat{\mathbf{p}} - \widehat{\omega}(\widehat{\mathbf{v}} * \widehat{\mathbf{e}})] = 0, \quad \widehat{\mathbf{L}} \cdot \widehat{\mathbf{e}} = 0 \quad (4.46)$$

Comme $\widehat{\mathbf{S}} + \widehat{\mathbf{L}} = \mathbf{I}$, on peut en déduire l'équation d'intégrale dans l'espace Fourier :

$$\widehat{\mathbf{e}} + \widehat{\Gamma}^0 \cdot [\widehat{\delta k} * \widehat{\mathbf{e}} - \widehat{\omega}(\widehat{\mathbf{v}} * \widehat{\mathbf{e}})] = 0, \quad (4.47)$$

et dans l'espace réel :

$$\mathbf{e} = \mathbf{E} - \Gamma^0 * [\delta k \mathbf{e} - \omega * (\mathbf{v} \cdot \mathbf{e})] \quad (4.48)$$

où Γ^0 est l'opérateur de Green associé au milieu de référence de conductivité k_0 défini par (3.44). On peut réécrire l'équation intégrale sous la forme :

$$\mathbf{e} = (\mathbf{I} + \mathbf{Z})^{-1} \mathbf{E}, \quad \mathbf{Z} = \Gamma * [\delta k - \omega * \mathbf{v}] \quad (4.49)$$

4.3.2 Formulation du schéma itératif de base

En se basant sur (4.47) et (4.48), la solution peut être déterminée à partir du schéma itératif suivant :

$$\widehat{\mathbf{e}}^{i+1} = \mathbf{E} 1_{\xi} - \widehat{\Gamma} \cdot [\widehat{\delta k} * \widehat{\mathbf{e}}^i - k_0 \widehat{\mathbf{e}}^i - \widehat{\omega}(\widehat{\mathbf{v}} * \widehat{\mathbf{e}}^i)] \quad (4.50)$$

qui est initialisé avec la valeur :

$$\widehat{\mathbf{e}}^{i=1} = \mathbf{E} 1_{\xi} \quad (4.51)$$

où l'on rappelle que 1_{ξ} est la fonction indicatrice $1_{\xi} = 1$ si $\xi = \mathbf{0}$ et $1_{\xi} = 0$ si non. Une simplification du schéma itératif ci-dessus est possible en prenant en compte du fait que :

$$\Gamma * (k_0 \mathbf{e}^i) = \mathbf{e}^i - \mathbf{E} \quad (4.52)$$

pour tout champ \mathbf{e}^i irrotationnel. On obtient donc le schéma itératif suivant :

$$\widehat{\mathbf{e}}^{i+1} = \widehat{\mathbf{e}}^i - \widehat{\Gamma} \cdot (\widehat{k} * \widehat{\mathbf{e}}^i - \widehat{\omega}(\widehat{\mathbf{v}} * \widehat{\mathbf{e}}^i)), \quad \widehat{\mathbf{e}}^0 = \mathbf{E} 1_{\xi} \quad (4.53)$$

A la convergence, on peut calculer la température :

$$\widehat{\theta} = \widehat{\omega} \cdot \widehat{e} \quad (4.54)$$

qui conduit à \mathbf{g} et ensuite la diffusivité effective (voir relations 4.16 et 4.21). Dans (4.53), $\widehat{k} * \widehat{e}^i$ et $\widehat{v} * \widehat{e}^i$ sont les produits de convolution dans l'espace de Fourier. Les produits duals $k\mathbf{e}^i$ et $\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}^i$ sont locaux dans l'espace réel. Il faut donc effectuer ces opérations dans l'espace réel en utilisant la transformée de Fourier rapide.

Les détails de l'intégration numérique de l'algorithme sont donnés ci-dessous :

$$\begin{array}{l} \text{Initialization : } \quad \widehat{e}^0 = \mathbf{E}1_{\xi} \\ \text{Itération : } \quad \widehat{e}^i \text{ est connu} \\ \quad \mathbf{e}^i = \mathcal{F}^{-1}(\widehat{e}^i) \\ \quad \mathbf{q}^i = k\mathbf{e}^i, \quad \mathbf{s}^i = -\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}^i \\ \quad \widehat{\mathbf{q}}^i = \mathcal{F}(\mathbf{q}^i), \quad \widehat{\mathbf{s}}^i = \mathcal{F}(\mathbf{s}^i) \\ \quad \widehat{e}^{i+1} = \widehat{e}^i - \widehat{\Gamma} \cdot (\widehat{\mathbf{q}}^i + \widehat{\omega}\widehat{\mathbf{s}}^i) \end{array} \quad (4.55)$$

Comme démontré dans [60, 62] pour le cas de composites élastiques et [63] pour le cas de la conductivité, ce schéma de base converge assez mal à fort contraste de propriétés thermiques. Avec la présence du terme de convection dans les équations intégrales, le schéma de base peut également diverger en augmentant la valeur de gradient de pression et donc l'amplitude de la vitesse. En effet, la convergence est assurée si le rayon spectral de l'opérateur \mathbf{Z} dans (4.49) est inférieur à 1. Dans le cas de la conduction thermique sans terme de convection [61], la convergence est assurée pour :

$$k_0 > \frac{1}{2}k_{max} \quad (4.56)$$

où k_{max} est la diffusivité maximale des constituants. En général, pour les matériaux bi-phasiques, on choisit :

$$k_0 = \frac{1}{2}(k_f + k_s) \quad (4.57)$$

où k_f et k_s sont la diffusivité du fluide et du solide respectivement. Pour le problème de transfert de chaleur avec convection, la recherche des conditions de convergence est plus difficile en raison de la présence de la vitesse qui dépend fortement de la géométrie de la microstructure.

Malgré cette incapacité à obtenir des conditions simples de convergence, le module de référence optimal k_0 peut être déterminé numériquement. On note également que le champ de vitesse dépend linéairement du gradient de pression. Ceci suggère que le cas des valeurs élevées du gradient de pression est comparable au cas de forts contrastes et qui conduit à un grand nombre d'itérations pour obtenir la convergence du schéma itératif. Pour améliorer la convergence, nous proposons dans la section suivante d'étendre le schéma en polarisation pour le problème de transfert de chaleur avec convection.

4.3.3 Schéma itératif basé sur la polarisation

Le schéma basé sur la polarisation a été proposé dans [62] dans le cas de composites élastiques et [63] pour le problème de transfert thermique des composites conducteurs de la chaleur. Ce schéma améliore la convergence pour toutes les valeurs de contraste. Dans cette section, nous proposons d'adapter cette approche au problème de transfert de chaleur avec convection. Pour résumer, nous recherchons la polarisation \mathbf{p} qui satisfait les relations (4.58) :

$$\widehat{\Gamma}.[\widehat{\mathbf{q}} + \widehat{\omega}\widehat{\mathbf{s}}] = 0, \quad \widehat{\Delta}.\widehat{\mathbf{e}} = 0, \quad \widehat{\mathbf{e}}(\mathbf{0}) = \mathbf{E} \quad (4.58)$$

Où la polarisation est définie par :

$$\mathbf{p}(\mathbf{x}) = (\mathbf{K}(\mathbf{x}) - \mathbf{K}^0).\mathbf{e}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{q}(\mathbf{x}) = \mathbf{K}^0.\mathbf{e}(\mathbf{x}) + \mathbf{p}(\mathbf{x}) \quad (4.59)$$

A noter que $\widehat{\Gamma}$ et $\widehat{\Delta}$ peuvent être remplacés par $\widehat{\mathbf{S}}$ et $\widehat{\mathbf{L}}$. La polarisation doit ensuite être calculée avec le processus itératif suivant :

Initialisation :	$\widehat{\mathbf{p}}^0 = 0$	
Itération :	$\widehat{\mathbf{p}}^i$ est connu	
	$\mathbf{p}^i = \mathcal{F}^{-1}(\widehat{\mathbf{p}}^i)$	
	$\mathbf{e}^i = (k - k_0)^{-1}\mathbf{p}^i, \quad \mathbf{q}^i = \mathbf{p}^i + k_0\mathbf{e}^i, \quad \mathbf{s}^i = -\mathbf{v}.\mathbf{e}^i$	(4.60)
	$\widehat{\mathbf{e}}^i = \mathcal{F}(\mathbf{e}^i), \quad \widehat{\mathbf{q}}^i = \mathcal{F}(\mathbf{q}^i), \quad \widehat{\mathbf{s}}^i = \mathcal{F}(\mathbf{s}^i)$	
	$\widehat{\mathbf{p}}^{i+1} = \widehat{\mathbf{p}}^i - \alpha\widehat{\mathbf{S}}(\widehat{\mathbf{q}}^i + \widehat{\omega}^i\widehat{\mathbf{s}}^i) - \beta\widehat{\Delta}.\widehat{\mathbf{e}}^i, \quad \text{si } \xi \neq 0$	
	$\widehat{\mathbf{p}}^{i+1}(\mathbf{0}) = \widehat{\mathbf{p}}^i(\mathbf{0}) - \gamma k_0.(\widehat{\mathbf{e}}^i(\mathbf{0}) - \mathbf{E})$	

Conformément à [65], on choisit $\beta = \gamma = -\alpha$. Maintenant, nous allons discuter du choix de k_0 et du coefficient α . Lorsque le terme de convection est nul, la convergence de l'algorithme est assurée si (voir [63]) :

$$\alpha \in]0, 2[, \quad k_0 \in]-\infty, 0[\quad (4.61)$$

Avec le terme de convection, on rencontre les mêmes difficultés déjà mentionnées pour le schéma itératif de base. Encore une fois, le choix optimal de k_0 doit être évalué numériquement. S'agissant de α on peut choisir la valeur 1.5 considérée dans [63].

4.4 Applications

4.4.1 Milieu poreux composé des pores parallèles

On considère le cas d'un milieu poreux composé de pores parallèles comme illustré sur la figure (4.1). Comme la solution analytique existe pour ce problème (voir section 4.2), il est intéressant de la comparer avec les résultats numériques issus des méthodes FFT. Pour cela, on fixe $f = 0.5$ et le rapport de contraste $k_f/k_s = 10$.

Tout d'abord, on analyse la convergence des deux schémas FFT : le schéma de base formulé avec le gradient de température (cf. (4.55)) et le schéma accéléré basé sur la polarisation (cf. (4.60)). Comme déjà mentionné dans la section précédente, la convergence

de ces schémas itératifs dépend du contraste, de la diffusivité des phases, mais également de la valeur du gradient de pression appliqué. Malheureusement, il n'est pas possible de déduire les conditions pour la diffusivité de référence k_0 donnant la meilleure convergence du schéma, le meilleur choix pour k_0 doit donc être déterminé numériquement. La dépendance de la valeur optimale du milieu de référence avec le vecteur d'onde est généralement très faible, on peut donc déterminer la valeur optimale de k_0 sur une grille de petite taille. Dans nos applications numériques nous avons observé que les valeurs $k_0 = 12$ pour le schéma de base et $k_0 = -3$ pour le schéma accéléré permettent de résoudre le problème de la diffusion thermique sur une large gamme de gradient de pression et pour un contraste $k_f/k_s = 10$. Ces valeurs sont utilisées pour toutes les applications proposées dans la suite de ce chapitre. Dans cette section, on travaille avec le gradient de pression adimensionnel \mathbf{G}^* défini par :

$$\mathbf{G}^* = \frac{(2H)^3}{\eta_f k_s} \mathbf{G} \quad (4.62)$$

Dans la figure 4.2, on présente le nombre d'itérations à la convergence en fonction du gradient de pression appliqué G_1^* pour le schéma de base et le schéma accéléré. Bien que pour les faibles valeurs de G_1^* le nombre d'itérations à convergence soit plus faible que pour le schéma de base, il peut être observé que le schéma accéléré a un meilleur taux de convergence pour des valeurs supérieures de G_1^* . En outre, il faut noter que le nombre d'itérations avec le schéma de base augmente linéairement avec le gradient de pression appliqué G_1^* . Cependant, avec le schéma accéléré, le nombre d'itération est quasi indépendante du gradient de pression. Au vu de ces résultats, on observe que le schéma en polarisation permet de réduire le temps de calcul et seul ce schéma accéléré sera utilisé pour les applications données dans les sections suivantes. La figure 4.3 montre la dépendance de la diffusivité effective K_{11} (normalisée par k_s) avec le gradient de pression G_1^* , obtenue par les deux méthodes numériques et la solution exacte. Pour la mise en oeuvre numérique, $N = 64$ vecteurs d'onde sont utilisés suivant chacune des deux directions de l'espace. On remarque deux régimes de comportement pour la diffusivité effective K_{11} :

- à faible gradient de pression, la diffusivité effective n'est pas affectée par le gradient de pression et est égale à celle calculée à $G_1^* = 0$.
- à plus grandes valeurs ($G_1^* > 10^3$), le terme convectif devient prédominant dans le problème de transfert de chaleur. La diffusivité effective dépend linéairement du gradient de pression G_1^* dans le repère logarithmique.

Ceci suggère que seulement deux points doivent être calculés afin de déterminer le comportement asymptotique dans le domaine des forts gradients de pression. Puisque les trois courbes sont très proches dans la figure 4.3, un zoom est fourni dans la figure 4.4 pour montrer leurs différences. Un bon accord entre la solution exacte et la solution numérique est observée. Les différences entre les solutions numériques et la solution exacte peuvent être réduites en augmentant le nombre de vecteurs d'onde. Sur les tableaux 1 et 2, on donne des valeurs de la diffusivité effective K_{11}/k_s associées aux valeurs $G_1^* = 1000$ et $G_1^* = 10000$ et pour différentes valeurs du nombre de vecteurs d'onde. Le tableau 4.1 présente les résultats obtenus par le schéma de base et le tableau 4.2 pour le schéma accéléré. Dans chaque cas, la valeur exacte de la diffusivité effective et les erreurs entre la solution exacte et la solution numérique sont également données. On observe que les

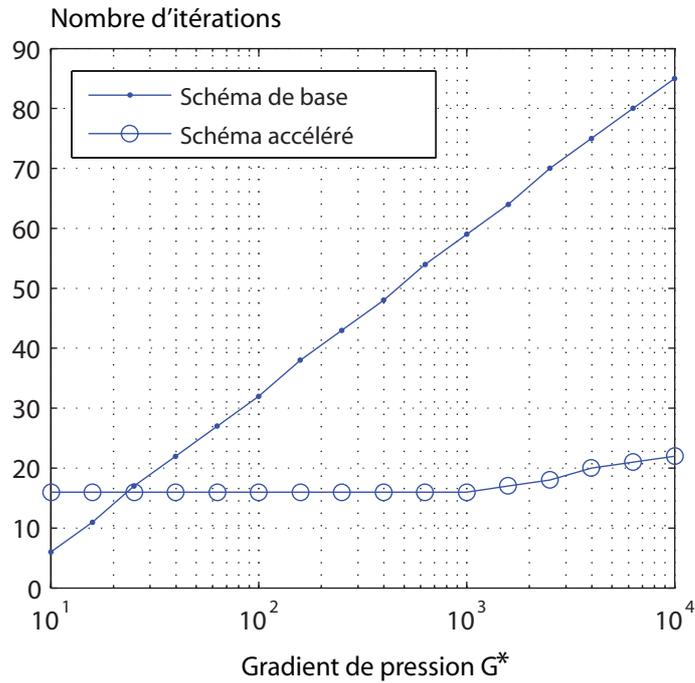


FIGURE 4.2 – Nombre d’itérations à convergence en fonction du gradient de pression G_1^* . La fraction volumique est $f = 0.5$ et le rapport de contraste est $k_f/k_s = 10$.

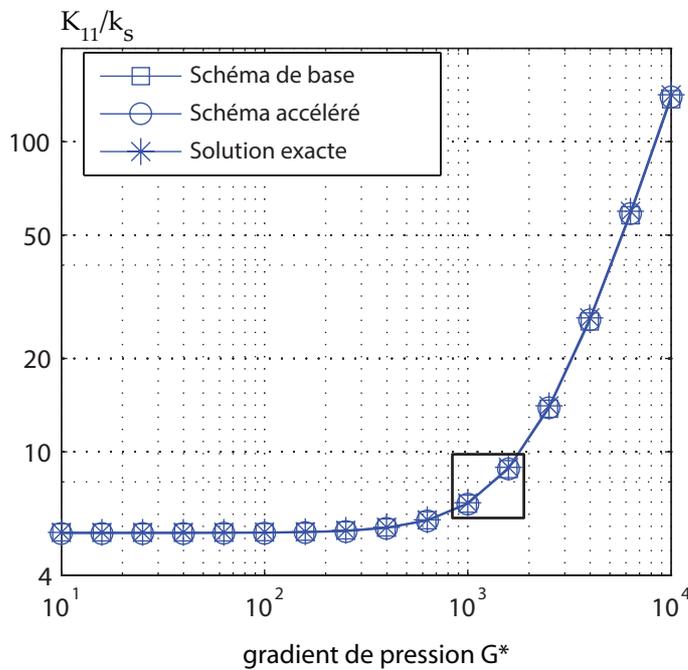


FIGURE 4.3 – Valeurs de K_{11}/k_s avec le gradient de pression G^* . La fraction volumique est $f = 0.5$ et le rapport de contraste est $k_f/k_s = 10$.

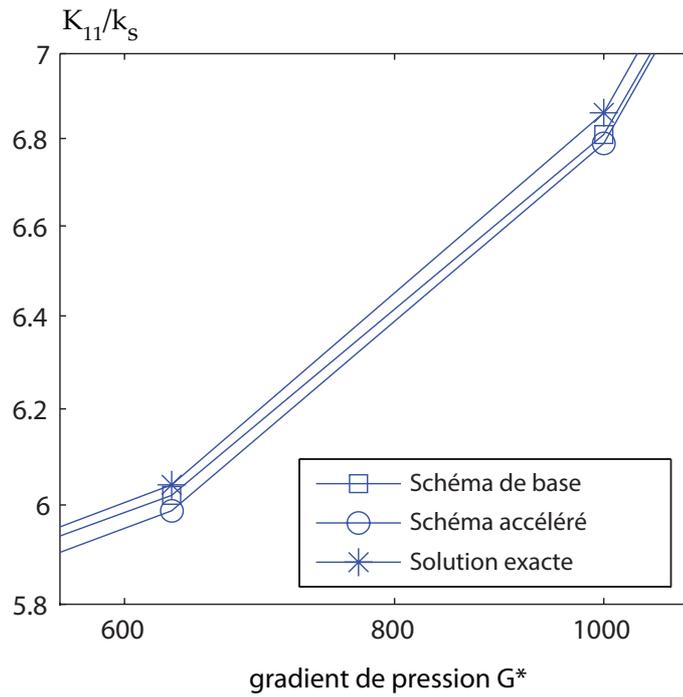


FIGURE 4.4 – Valeurs de K_{11}/k_s avec le gradient de pression G^* . La fraction volumique est $f = 0.5$ et le rapport de contraste est $k_f/k_s = 10$.

solutions numériques convergent vers la solution exacte si le nombre de vecteurs d'onde augmente.

	$G_1^* = 1000$	$G_1^* = 10000$
64×64	6.8091 (0.73%)	137.0031 (3.1%)
128×128	6.8305 (0.42%)	139.1757 (1.6%)
256×256	6.8414 (0.27%)	140.2743 (0.83%)
512×512	6.8468 (0.19%)	140.8266 (0.44%)
exact	6.8596	141.4566

TABLE 4.1 – Diffusivité effective K_{11}/k_s calculée en fonction du gradient de pression G_1^* et le nombre de vecteurs d'onde. Solutions obtenues avec le schéma de base.

	$G_1^* = 1000$		$G_1^* = 10000$	
64×64	6.7886	(1.0%)	139.1980	(1.6%)
128×128	6.8159	(0.64%)	140.2881	(0.83%)
256×256	6.8296	(0.44%)	140.8360	(0.44%)
512×512	6.8364	(0.34%)	141.1106	(0.24%)
exact	6.8596		141.4566	

TABLE 4.2 – Diffusivité effective K_{11}/k_s calculée en fonction du gradient de pression G_1^* et le nombre de vecteurs d’onde. Solutions obtenues avec le schéma en polarisation.

4.4.2 Milieu poreux composé d’un réseau de cylindres

On considère maintenant le cas où un fluide s’écoule à travers un réseau périodique de cylindres de sections circulaires. Les cylindres ont le même rayon R et sont tous alignés suivant la direction Ox_3 . Pour la mise en oeuvre numérique des schémas FFT, une cellule carrée unitaire de dimension H avec un cercle de rayon R à l’origine a été considéré (voir figure 4.5). Le problème est bidimensionnel et $N = 256$ vecteurs d’onde sont considérés suivant chaque directions. Seul le schéma accéléré a été utilisé pour cette application.

Sur la figure 4.6, on présente les variations de la diffusivité effective K_{11} en fonction

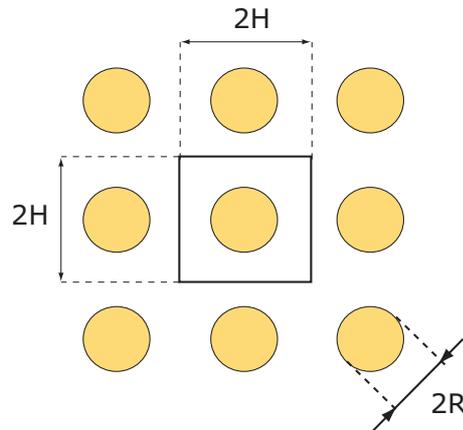


FIGURE 4.5 – Cellule élémentaire du milieu poreux périodique avec cylindres à sections circulaires.

du rapport R/H et du gradient de pression G_1 . Le rapport de contraste solide/fluide est fixé à $k_f/k_s = 10$. Pour un gradient de pression donné, la diffusivité effective diminue si on augmente le rayon du cylindre. Cette remarque est logique puisque la diffusivité du solide est plus faible que celle du fluide. En outre, l’augmentation du gradient de pression conduit à l’augmentation de la diffusivité effective.

Maintenant, nous étudions la dépendance de la diffusivité effective K_{11} avec la direction de l’écoulement. En effet, dans le dernier exemple, la diffusivité K_{11} est calculée en imposant le gradient de température macroscopique E_1 et un gradient de pression dans la même direction. Maintenant, le gradient de température macroscopique E_1 est encore appliqué

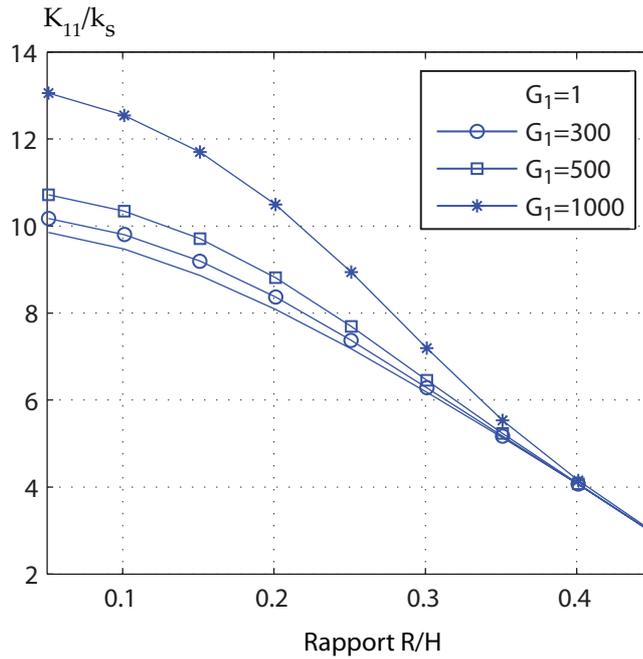


FIGURE 4.6 – Variations de la diffusivité effective K_{11} en fonction du rapport R/H et du gradient de pression G_1 , pour l'écoulement à travers un réseau de cylindres et pour le rapport de contraste $k_f/k_s = 10$.

pour calculer K_{11} , mais la direction d'écoulement est modifiée. Pour cela, nous exprimons les composantes du gradient de pression sous la forme :

$$G_1 = G \cos(\theta), \quad G_2 = G \sin(\theta), \quad (4.63)$$

où G est la norme du gradient de pression appliqué \mathbf{G} et θ un angle θ appartenant à l'intervalle $[0, 2\pi]$. La dépendance de K_{11} en fonction de l'angle est illustrée sur les figures (4.7- 4.9). Les résultats sont interprétés dans le système de coordonnées polaires avec différentes valeurs de G . A partir de ces résultats, on peut voir que la diffusivité est affectée par la direction d'écoulement, en particulier lorsque l'écoulement est parallèle au gradient de pression appliqué. Quand le gradient de pression est appliqué dans la direction orthogonale au gradient de température ($\theta = 90^\circ$), la diffusivité effective est quasiment inchangée. Il faut noter également que l'influence de la direction d'écoulement est plus importante lorsque le rayon du cylindre est faible. Pour les cylindres plus grands, par exemple $R = 0.4$, les effets sont beaucoup moins importants (voir la figure 4.9).

4.4.3 Applications à des milieux poreux à fibres aléatoirement distribuées

Dans cette section, nous utilisons la méthode FFT pour traiter une microstructure poreuse 3D constituée de fibres aléatoires interconnectées. Un exemple de cette microstructure est montré sur la figure 4.10. Le nombre total de fibres est $N = 10$ avec le

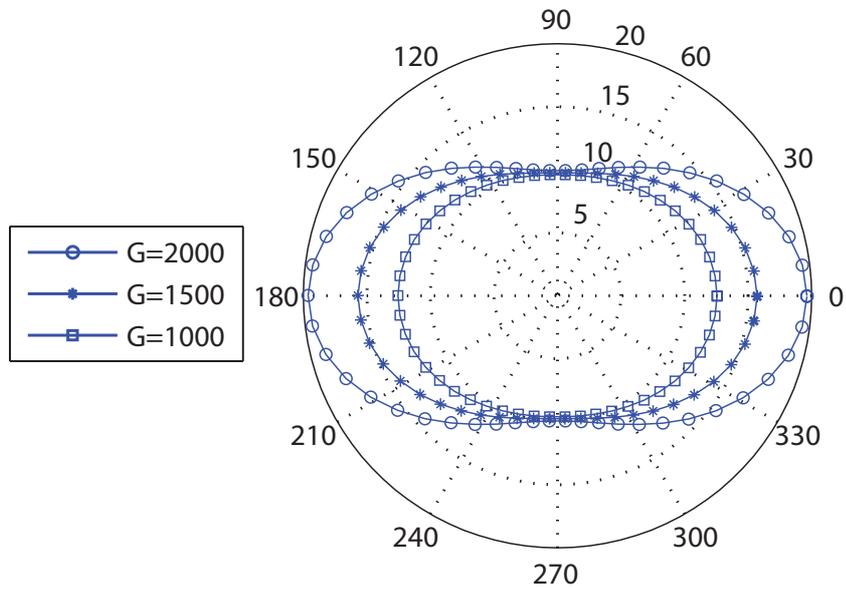


FIGURE 4.7 – Variation de la diffusivité effective en fonction de la direction de l'écoulement pour $R/H = 0.2$

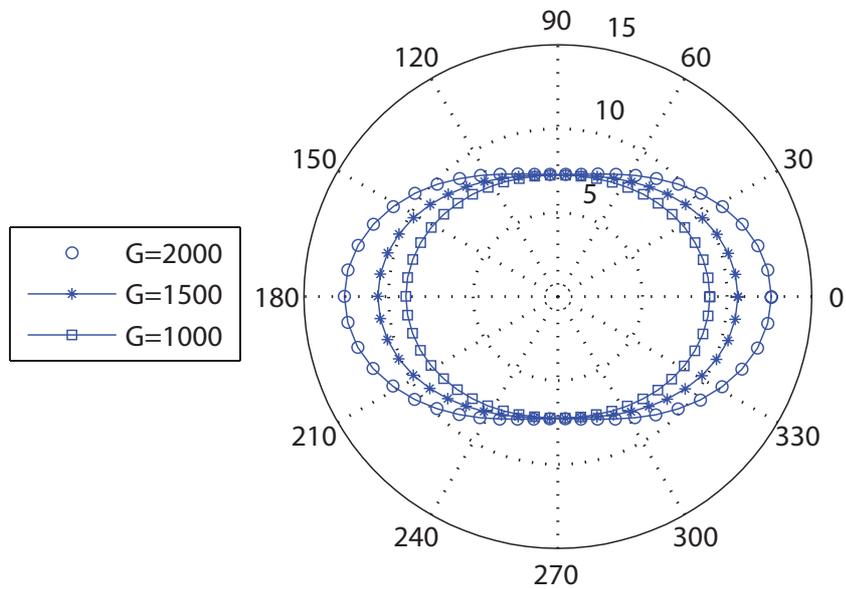


FIGURE 4.8 – Variation de la diffusivité effective en fonction de la direction de l'écoulement pour $R/H = 0.5$

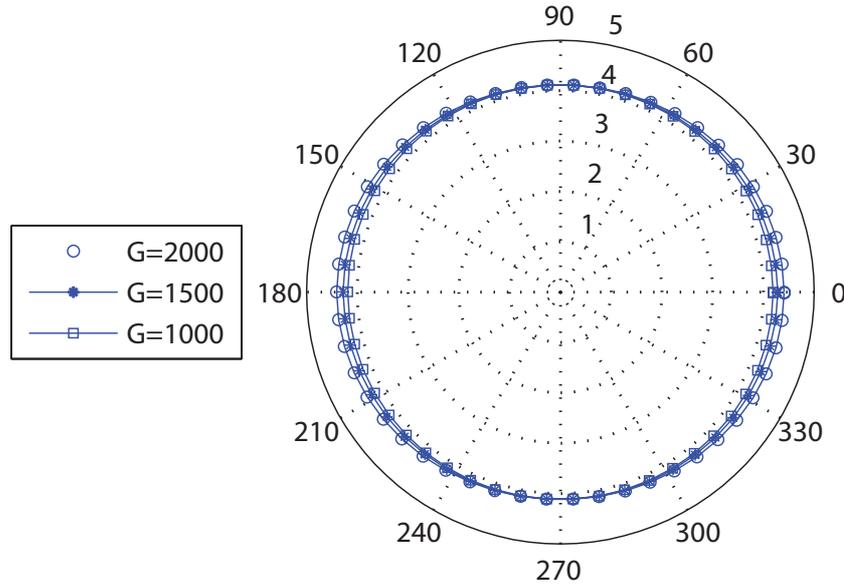


FIGURE 4.9 – Variation de la diffusivité effective en fonction de la direction de l'écoulement pour $R/H = 0.8$

rayon $R/H = 0.05$ (ici $2H$ est la dimension de la cellule unitaire carrée). Pour construire un milieu poreux interconnecté, on adopte un algorithme pour générer successivement les cylindres. A chaque étape, l'axe du nouveau cylindre doit couper l'axe de celui généré à l'étape précédente mais son orientation est aléatoire. Le rapport de diffusivité thermique est toujours fixé à $k_f/k_s = 10$.

Les calculs sont réalisés en prenant 256 vecteurs d'onde suivant chaque directions d'espace. Un gradient de pression G_3 est prescrit pour générer l'écoulement suivant la direction Ox_3 . La diffusivité effective K_{33} est calculée en imposant le gradient de température E_3 .

Les résultats de ces calculs sont présentés dans le tableau 3 et sur les figures 4.11 et 4.12. La diffusivité effective normalisée K_{33}/k_s est donnée dans le tableau 4.3 pour différentes valeurs de G_3 et pour différents tirages aléatoires. La porosité de chaque échantillon est donnée dans la dernière colonne. On observe que les résultats varient fortement avec la variation du gradient de pression. Cet effets sont dus à la faible porosité et à l'influence de la distribution des fibres. Cette remarque est en accord avec les exemples précédents.

Les figures 4.11 et 4.12 montrent la diffusivité effective pour chaque échantillon et la valeur moyenne cumulée de K_{33}/k_s . Nous observons également une variation forte entre les différents tests mais la valeur moyenne se stabilise quand le nombre de test augmente. Une analyse en détail de ces incertitudes et sur le choix de l'élément de volume représentatif peut être effectuée par exemple en suivant les approches développées dans [44, 47]. Ce n'est pas l'objectif ici.

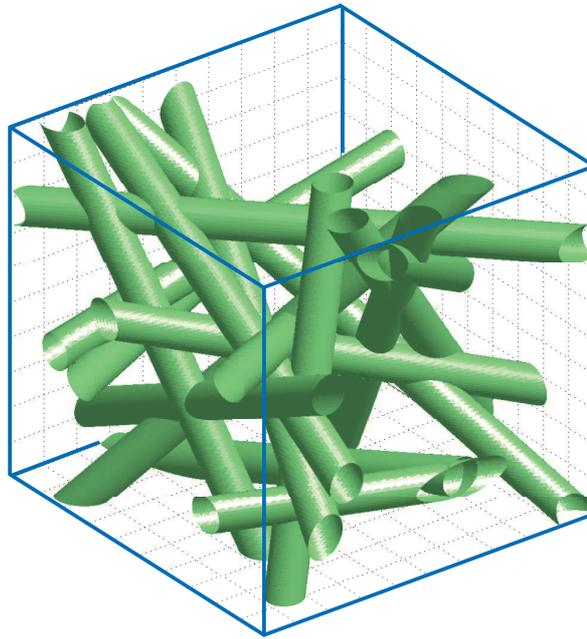


FIGURE 4.10 – Microstructure 3D de fibres aléatoires interconnectées constituée de 10 cylindres distribués aléatoirement avec le rayon $R = 0.05$

N^0	K_{33}/k_s			fraction volumique
	$G_3 = 10$	$G_3 = 1000$	$G_3 = 2000$	
1	1.1257	4.2988	12.5952	0.0311
2	1.1087	4.1956	12.4108	0.0308
3	1.1291	5.3233	17.2091	0.0314
4	1.1305	2.6669	6.7024	0.0321
5	1.1200	3.5004	9.6789	0.0316
6	1.1114	4.4589	13.3691	0.0306
7	1.1297	5.9579	19.3942	0.0314
8	1.1138	3.0092	8.1635	0.0293
9	1.1294	2.9117	8.0133	0.0319
10	1.1442	2.4569	5.8313	0.0323

TABLE 4.3 – Diffusivité effective pour les fibres aléatoires et pour différente tirages. Le nombre de fibres est $N = 10$ et le rapport de contraste est $k_f/k_s = 10$

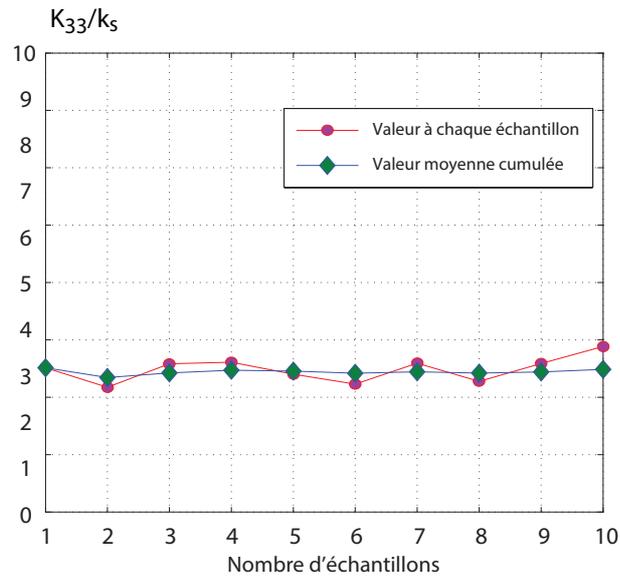


FIGURE 4.11 – Diffusivité effective pour les fibres aléatoires et pour les différentes tirages (courbe avec des cercles) et la valeur cumulée de la diffusivité effective (courbe avec des losanges) pour $G_3 = 10$. Le nombre de fibres $N = 10$ et le rapport de contraste $k_f/k_s = 10$

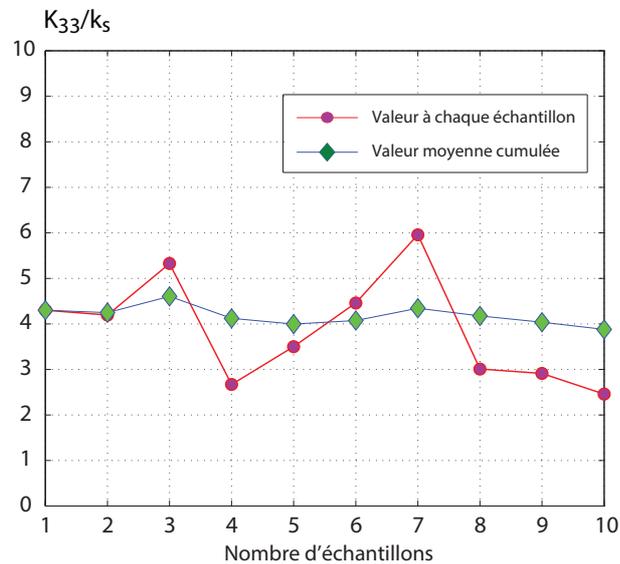


FIGURE 4.12 – Diffusivité effective pour les fibres aléatoires et pour les différentes tirages (courbe avec des cercles) et la valeur cumulée de la diffusivité effective (courbe avec des losanges) pour $G_3 = 1000$. Le nombre de fibres est $N = 10$ et le rapport de contraste est $k_f/k_s = 10$

4.5 Conclusion

Dans ce chapitre, une nouvelle méthode numérique basée sur la FFT a été proposée pour calculer la diffusivité effective d'un milieu poreux saturé par un fluide visqueux. La diffusivité est obtenue dans le cadre de l'homogénéisation périodique et consiste à résoudre deux problèmes locaux successivement : le problème Darcy sous un gradient de pression appliqué, le problème de transfert de chaleur dû à la conduction et la convection. Le problème de Darcy a déjà été étudié au chapitre 1 et 2, c'est le problème de transfert de chaleur avec convection qui doit être résolu pour calculer la diffusivité effective en fonction du gradient de température et du gradient de pression appliqués. Deux méthodes de résolution basée sur FFT sont proposées pour résoudre le problème de transfert de chaleur. La première méthode est basée sur le gradient de température et sur l'utilisation du tenseur de Green associé. Un schéma accéléré basé sur la polarisation et les deux tenseurs de Green est également proposé pour améliorer le taux de convergence de l'approche et réduire les temps de calcul.

La précision et la capacité de ces deux schémas itératifs sont d'abord évalués pour le problème de l'écoulement entre plans parallèles et pour lequel la solution a pu être déterminée de manière analytique. Ensuite, des problèmes 2D et 3D ont été considérés. Les résultats ont montré que la méthode en polarisation présente une bonne convergence et permet de traiter différents problèmes d'intérêt pratique.

Sur le problème d'écoulement entre plans, il a été montré que les propriétés effectives de diffusivité présentent deux régimes très distincts : (i) un premier régime à faibles valeurs du gradient de pression pour lequel G_1 n'affecte pas la diffusivité effective, (ii) pour des plus grandes valeurs du gradient de pression, les propriétés effectives de diffusivité augmentent linéairement avec le gradient de pression dans un repère logarithmique.

Sur le problème bidimensionnel d'écoulement dans un réseau périodique de cylindres alignés, Il a été mis en évidence une anisotropie du tenseur de diffusivité qui est induite par la direction d'écoulement.

Enfin, c'est un milieu poreux constitué de fibres aléatoirement distribuées qui est considéré pour montrer les capacités de l'approche numérique à traiter de véritables microstructures tridimensionnelles.

Conclusion générale et perspectives

Ces travaux de thèse ont contribué au calcul des propriétés macroscopiques des composites conducteurs et des milieux poreux. Les trois contributions principales sont : (i) le calcul des coefficients constitutifs d'une loi de filtration non linéaire par le calcul numérique avec FFT, (ii) la détermination d'expressions analytiques pour les propriétés de conductivité thermique de milieux composites, (iii) le calcul par FFT du tenseur de diffusivité de milieux poreux conducteurs de la chaleur.

Considérant les propriétés de la loi non linéaire de filtration, il a été développé une approche numérique par transformée de Fourier en suivant la démarche par développement asymptotique introduite par Mei et Auriault, [57], Wodie et Levy [95], Skjetne et Auriault, [81]. L'approche conduit alors à une loi polynomiale qui introduit des tenseurs d'ordres supérieurs de la perméabilité macroscopique. Chaque tenseur est déterminé en résolvant en cascade des problèmes de Stokes avec un terme source qui dépend explicitement du champ de vitesse calculé à l'ordre précédent. Cette approche est numériquement intéressante puisque les problèmes microscopiques à résoudre sont de nature linéaire pour lesquels on a proposé une méthode de résolution basée sur la FFT. L'approche a été ensuite appliquée à des microstructures poreuses bidimensionnelles correspondant à des arrangements périodiques de cylindres. Les comparaisons avec le calcul complet du problème de Navier-Stokes sur la cellule élémentaire ont permis de mettre en évidence des incapacités de l'approche par développement en série à reproduire correctement les effets non linéaires. Systématiquement, nous avons pu observer que l'approximation polynomiale diverge de la solution exacte dès que les effets d'origine inertiel deviennent significatifs. Par ailleurs, en étudiant le rayon de convergence de la série polynomiale nous avons pu évaluer précisément les limites de l'approche par développement en série.

Comme nous l'avons montré au chapitre 2, il est possible d'approcher la solution exacte, obtenue par éléments finis à partir d'approximation à base de polynômes. Toutefois cette approche perd tout l'intérêt de l'approche asymptotique : (i) résolution d'un problème non linéaire au lieu d'une succession de problèmes linéaires, (ii) l'utilisation des éléments finis au lieu des méthodes FFT.

Une des perspectives de ce travail concerne donc le développement d'outils numériques par FFT pour résoudre l'équation de Navier-Stokes. Les méthodes basées sur la FFT ont été étendues pour traiter les composites non linéaires, il existe déjà plusieurs travaux sur ce sujet [66, 60, 17, 18, 88, 41, 65]. Toutefois, la non linéarité présente dans l'équation de Navier-Stokes n'est pas la même, elle est liée à la loi de comportement pour les composites (plasticité ou viscoplasticité) tandis qu'elle apparaît dans le terme inertiel pour le pro-

blème d'écoulement en milieux poreux. Une approche de type incrémentale pour résoudre l'équation de Navier-Stokes semble être indiquée en adaptant par exemple la Méthode Asymptotique Numérique (MAN) [10, 29, 71].

Au chapitre 3 ont été établies de nouvelles estimations analytiques de la conductivité thermique des composites périodiques constitués d'inclusions sphériques dans une matrice. Une équation intégrale périodique en terme de la polarisation a été formulée et la polarisation moyenne de l'inclusion a été approchée par la méthode de Nemat-Nasser-Iwakuma-Hejazi (NIH) [70]. Cette estimation repose sur l'évaluation de la somme de séries dans l'espace des vecteurs d'onde et qui a été remplacée par une intégrale. Des formules analytiques on pu être ainsi obtenues pour des réseaux cubiques et des distributions aléatoires et isotropes. Les comparaisons avec les calculs numériques par FFT sont tout à fait encourageant pour étendre ces travaux à d'autre type de configuration et problèmes. En outre la méthode peut être étendue au cas des inclusions ellipsoïdales, polydisperses pour les problèmes de conduction thermique ou de comportement élastique. Une estimation qui combine l'avantage de la série de Neumann et l'estimation de type NIH peut être aussi envisagée. Pour le cas des distributions aléatoires, nous projetons également d'utiliser les grandeurs statistiques d'ordre supérieur pour estimer plus précisément les propriétés macroscopiques des composites. L'extension des approches pour traiter des matrices au comportement anisotrope présente également un intérêt important.

La dernière partie de ce travail de thèse a porté sur le calcul par FFT du tenseur de diffusivité de milieux poreux périodiques. Lorsque le fluide est en écoulement, le tenseur de diffusivité est déterminé en résolvant sur la cellule élémentaire un problème de thermique avec un terme de convection. Dans le chapitre 4, nous avons proposé de nouveaux algorithmes basés sur la FFT pour la résolution de ce problème. D'abord c'est un algorithme basé sur le gradient de température, adapté du schéma initial de Moulinec et Suquet [67], qui a été proposé. Afin d'améliorer le taux de convergence du schéma itératif, nous avons proposé un second algorithme en adaptant le schéma en polarisation [62, 63]. Les solutions numériques obtenues par ces deux schémas ont été comparées avec une solution exacte pour le problème d'écoulement entre plans parallèles. Les solutions numériques obtenues sont en accord avec la solution exacte et nous avons montré que le schéma en polarisation permet de réduire significativement les temps de calcul au regard de ceux obtenus avec le premier schéma. La méthode a ensuite été appliquée à d'autre microstructures bi- et tri-dimensionnelles. D'abord, le cas d'un réseau périodique de cylindres a été étudié en nous intéressant notamment à l'anisotropie induite par la direction d'écoulement. Enfin, une application à un assemblage de fibres aléatoirement distribuées dans le volume a été proposé afin de démontrer les capacités de l'approche à traiter de microstructures 3D. En perspectives de ce travail, nous pouvons aisément envisager le calcul du tenseur de diffusivité en tenant compte des effets non linéaires d'origine inertiel étudiés aux deux premiers chapitres. Il s'agit alors de considérer dans le terme de convection le champ de vitesse solution du problème de Navier-Stokes. Un autre perspective intéressant concerne l'optimisation de systèmes de refroidissement dans les micro- ou nano-systèmes en fonction de la géométrie des pores et de leur répartition spatiale.

Bibliographie

- [1] Nazeer Ahmed. *Physical properties of porous medium affecting laminar and turbulent flow of water*. PhD thesis, Colorado State University, 1967.
- [2] G. Allaire. Convection-diffusion-réaction en milieu poreux. In *Ecole Thématique 2013, Transport dans les milieux micro-structurés*. GDR CHANT.
- [3] G. Allaire and A. L. Raphael. Homogenization of a convection-diffusion model with reaction in a porous medium. *C. R. Math.*, 344(8) :523 – 528, 2007.
- [4] Grégoire Allaire. Homogenization of the stokes flow in a connected porous medium. *Asymptotic Analysis*, 2(3) :203–222, 1989.
- [5] J.-L. Auriault, C. Boutin, and C. Geindreau. *Homogenization of coupled phenomena in heterogenous media*. John Wiley & Sons, 2010.
- [6] Jean-Louis Auriault, Christian Geindreau, and Claude Boutin. Filtration law in porous media with poor separation of scales. *Transp. Porous Media*, 60(1) :89–108, 2005.
- [7] Jean-Louis Auriault and E Sanchez-Palencia. Etude du comportement macroscopique dun milieu poreux saturé déformable. *Journal de mécanique*, 16(4) :575–603, 1977.
- [8] J.L. Auriault, C. Boutin, and C. Geindreau. *Homogénéisation de phénomènes couplés en milieu hétérogène 1 : diffusion et dispersion*. Hermès Sciences, 2009.
- [9] J.L. Auriault, C. Boutin, and C. Geindreau. *Homogénéisation de phénomènes couplés en milieu hétérogène 2 : quasi-statique et dynamique des milieux poreux*. Hermès Sciences, 2009.
- [10] Cochelin B. A path following technique via an asymptotic numerical method. *Comput. struct.*, 53 :1181–1192, 1994.
- [11] Matthew Balhoff, Andro Mikelić, and Mary F Wheeler. Polynomial filtration laws for low reynolds number flows through porous media. *Transp. Porous Media*, 81(1) :35–60, 2010.
- [12] S Banerjee and GI Hadaller. Longitudinal laminar flow between cylinders arranged in a triangular array by a variational technique. *J. Appl. Mech.*, 40(4) :1136–1138, 1973.
- [13] J.L. Barrat and J.P. Hansen. *Basic concepts for simple and complex liquids*. Cambridge Univ Pr, 2003.
- [14] G.K. Batchelor and R.W. O’Brien. Thermal or electrical conduction through a granular material. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 355(1682) :313–333, 1977.

- [15] Y. Benveniste. On the effective thermal conductivity of multiphase composites. *Z. Angew. Math. Phys.*, 37(5) :696–713, 1986.
- [16] D.J. Bergman. Dielectric constant of a two-component granular composite : a practical scheme for calculating the pole spectrum. *Phys. Rev. B*, 19 :2359–2368, 1979.
- [17] K. Bhattacharya and P.M. Suquet. A model problem concerning recoverable strains of shape-memory polycrystals. *Proc. R. Soc. A*, 461(2061) :2797–2816, 2005.
- [18] N. Bilger, F. Auslender, M. Bornert, J.-C. Michel, H. Moulinec, P. Suquet, and A. Zaoui. Effect of a nonuniform distribution of voids on the plastic response of voided materials : a computational and statistical analysis. *Int. J. Solids Struct.*, 42 :517–538, 2005.
- [19] J.-F. Bloch and J.-L. Auriault. Heat transfer in nonsaturated porous media. modelling by homogenisation. *Transp. Porous Media*, 30(3) :301–321, 1998.
- [20] R.T. Bonnecaze and J.F. Brady. The effective conductivity of random suspensions of spherical particles. *Proc. R. Soc. A*, 432(1886) :445–465, 1991.
- [21] G. Bonnet. Effective properties of elastic periodic composite media with fibers. *J. Mech. Phys. Solids*, 55(5) :881 – 899, 2007.
- [22] Alain Bourgeat, Eduard Marušić-Paloka, and Andro Mikelić. Weak nonlinear corrections for darcy’s law. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 6(08) :1143–1155, 1996.
- [23] Claude Boutin. Microstructural effects in elastic composites. *Int. J. Solids Struct.*, 33(7) :1023–1051, 1996.
- [24] Claude Boutin. Study of permeability by periodic and self-consistent homogenisation. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 19(4) :603–632, 2000.
- [25] William Fuller Brown Jr. Solid mixture permittivities. *J. Chem. Phys.*, 23(8) :1514–1517, 1955.
- [26] D. Chandler. *Introduction to Modern Statistical Mechanics*. Oxford University Press, 1987.
- [27] G Chauveteau and CL Thirriot. Régimes d’écoulement en milieu poreux et limite de la loi de darcy. *La Houille Blanche*, (2) :141–148, 1967.
- [28] Zhangxin Chen, Stephen L Lyons, and Guan Qin. Derivation of the forchheimer law via homogenization. *Transp. Porous Media*, 44(2) :325–335, 2001.
- [29] Pottier-Ferry M. Cochelin B., Damil N. *Méthode asymptotique numérique*. Hermès Science Publications, 2007.
- [30] Henry Darcy. *Les fontaines publiques de la ville de Dijon : exposition et application... de distribution d’eau...* Victor Dalmont, 1856.
- [31] Sykes M.F. Domb, V. Use of series expansions for the ising model susceptibility and excluded volume problem. *J. Maths. Phys*, 7 :2–63, 1961.
- [32] W.J. Drugan and J.R. Willis. A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 44(4) :497–524, 1996.
- [33] JE Drummond and MI Tahir. Laminar viscous flow through regular arrays of parallel solid cylinders. *Int. J. Multiphase Flow*, 10(5) :515–540, 1984.

-
- [34] J.D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 241(1226) :376–396, 1957.
- [35] D.J. Eyre and G.W. Milton. A fast numerical scheme for computing the response of composites using grid refinement. *Eur. Phys. J. Appl. Phys.*, 6(01) :41–47, 1999.
- [36] Philipp Forchheimer. Wasserbewegung durch boden. *Z. Ver. Deutsch. Ing.*, 45(1782) :1788, 1901.
- [37] Tiziana Giorgi. Derivation of the forchheimer law via matched asymptotic expansions. *Transp. Porous Media*, 29(2) :191–206, 1997.
- [38] J.P. Hansen and I.R. McDonald. *Theory of simple liquids*. Academic Press, 2006.
- [39] Z. Hashin and S. Shtrikman. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 11(2) :127 – 140, 1963.
- [40] D.H. Hoang. *Contribution à l’homogénéisation de matériaux hétérogènes viscoélastiques : milieux aléatoires et périodiques et prise en compte des interfaces*. PhD thesis, Université Paris-Est, 2011.
- [41] M.I. Idiart, F. Willot, Y.-P. Pellegrini, and P. Ponte-Castaneda. Infinite-contrast periodic composites with strongly nonlinear behavior : Effective-medium theory versus full-field simulations. *Int. J. Sol. Struct.*, 46 :3365–3382, 2009.
- [42] Zakaria Idris, Laurent Orgéas, Christian Geindreau, Jean-Francis Bloch, and Jean-Louis Auriault. Microstructural effects on the flow law of power-law fluids through fibrous media. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 12(5) :995, 2004.
- [43] D.B. Ingham and I. Pop. *Transport phenomena in porous media III*, volume 3. Elsevier, 2005.
- [44] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, and D. Jeulin. Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *Int. J. Solids. Struct.*, 40(13) :3647–3679, 2003.
- [45] O.D. Kellogg. *Foundations of potential theory*. Dover Publications, 1929.
- [46] Jeenu Kim, Jysoo Lee, and Koo-Chul Lee. Nonlinear correction to darcy’s law for a flow through periodic arrays of elliptic cylinders. *Physica A*, 293(1) :13–20, 2001.
- [47] P.-S. Koutsourelakis. Stochastic upscaling in solid mechanics : An exercise in machine learning. *J. Comput. Phys.*, 226(1) :301–325, 2007.
- [48] Ekkehart Kröner. *Statistical continuum mechanics*. Springer, 1972.
- [49] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Fluid Mechanics*. New York : Pergamon Press, 1987.
- [50] RE Larson and JJJ Higdon. Microscopic flow near the surface of two-dimensional porous media. part 1. axial flow. *J. Fluid Mech.*, 166 :449–472, 1986.
- [51] RE Larson and JJJ Higdon. Microscopic flow near the surface of two-dimensional porous media. part 2. transverse flow. *J. Fluid Mech.*, 178 :119–136, 1987.
- [52] T. Levy. Fluid flow through an array of fixed particles. *International Journal of Engineering Science*, 21(1) :11–23, 1983.
- [53] Erik Lindquist. On the flow of water through porous soil. In *Proc., 1er Congres des Grands Barrages*, pages 81–101, 1933.

- [54] K.Z. Markov and J.R. Willis. On the two-point correlation function for dispersions of nonoverlapping spheres. *Math. Mod. Meth. Appl S.*, 8(02) :359–377, 1998.
- [55] James Clerk Maxwell. *A treatise on electricity and magnetism*, volume 1. Clarendon press, 1881.
- [56] D.A. McQuarrie. *Statistical Mechanics*. University Science Books, 2000.
- [57] CC Mei and J-L Auriault. The effect of weak inertia on flow through a porous medium. *J. Fluid Mech.*, 222 :647–663, 1991.
- [58] J.-C. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet. A computational method based on augmented lagrangians and fast fourier transforms for composites with high contrast. *Comput. Model. Eng. Sci.*, 1(2) :9–88, 2000.
- [59] J.C. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet. Effective properties of composite materials with periodic microstructure : a computational approach. *Comput. Method Appl. Mech. Eng.*, 172(1–4) :109 – 143, 1999.
- [60] J.C. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet. A computational scheme for linear and non-linear composites with arbitrary phase contrast. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 52(1-2) :139–160, 2001.
- [61] G.W. Milton. *The theory of composites*, volume 6. Cambridge University Press, 2002.
- [62] V. Monchiet and G. Bonnet. A polarization-based FFT iterative scheme for computing the effective properties of elastic composites with arbitrary contrast. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 89(11) :1419–1436, 2012.
- [63] V. Monchiet and G. Bonnet. A polarization-based fast numerical method for computing the effective conductivity of composites. *Int. J. Numer. Meth. Heat Fluid Flow*, 2013.
- [64] V. Monchiet, G. Bonnet, and G. Lauriat. A FFT-based method to compute the permeability induced by a stokes slip flow through a porous medium. *CR Mecanique*, 337(4) :192–197, 2009.
- [65] Bonnet G. Monchiet V. Numerical homogenization of non linear composites with a polarization-based fft iterative scheme. *Comput. Mater. Science*, 79 :276–283, 2013.
- [66] H Moulinec and P Suquet. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Comput. Method Appl. Mech. Eng.*, 157(1) :69–94, 1998.
- [67] Herve Moulinec and Pierre Suquet. A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites. *Comptes rendus de l’Académie des sciences. Série II, Mécanique, physique, chimie, astronomie*, 318(11) :1417–1423, 1994.
- [68] Silva F. Moulinec H. Comparison of three accelerated fft-based schemes for computing the mechanical response of composite materials. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 97(13) :960–985, 2014.
- [69] S. Nemat-Nasser and M. Hori. *Micromechanics : overall properties of heterogeneous materials*, volume 2. Elsevier Amsterdam, 1999.

-
- [70] S. Nemat-Nasser, T. Iwakuma, and M. Hejazi. On composites with periodic structure. *Mech. Mater.*, 1(3) :239–267, 1982.
- [71] Zahrouni H. Pottier-Ferry M. Nezamabadi S., Yvonnet J. A multilevel computational strategy for handling microscopic and macroscopic instabilities. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 198 :2099–2110, 2009.
- [72] Trung Kien Nguyen. *Homogénéisation numérique de structures périodiques par transformée de Fourier : matériaux composites et milieux poreux*. PhD thesis, Université Paris-Est ; Ecole Supérieure de Transport et de Communication de Hanoi, 2010.
- [73] L.S. Ornstein and F. Zernike. Accidental deviations of density and opalescence at the critical point of a single substance. *Proc. Acad. Sci. Amsterdam*, 17 :793–806, 1914.
- [74] J.K. Percus and G.J. Yevick. Analysis of classical statistical mechanics by means of collective coordinates. *Phys. Rev.*, 110(1) :1, 1958.
- [75] Trykozko A. Augustson K. Peszynska, M. Computational upscaling of inertia effects from porescale to mesoscale. *Computational Science - ICCS*, 5544 :695–704, 2009.
- [76] Siméon Denis Poisson. Second mémoire sur la théorie du magnétisme. *Mémoires de l'Académie royale des Sciences de l'Institut de France*, 5(488-533), 1826.
- [77] Auriault J.-L. Rasoloarijaona M. Non-linear seepage flow through a rigid porous medium. *ur. J. Mech. B Fluids*, 13(2) :177–195, 1994.
- [78] E. Sanchez-Palencia and A. Zaoui. *Homogenization techniques for composite media*, volume 272. Springer Verlag, 1987.
- [79] Enrique Sanchez-Palencia. *Non-homogeneous media and vibration theory*, volume 127. Springer-Verlag Berlin, 1980.
- [80] AS Sangani and A Acrivos. Slow flow past periodic arrays of cylinders with application to heat transfer. *Int. J. Multiphase Flow*, 8(3) :193–206, 1982.
- [81] E Skjetne and JL Auriault. New insights on steady, non-linear flow in porous media. *European Journal of Mechanics-B/Fluids*, 18(1) :131–145, 1999.
- [82] J.C. Slattery. Flow of viscoelastic fluids through porous media. *AIChE J.*, 13(6) :1066–1071, 1967.
- [83] EM Sparrow and AL Loeffler. Longitudinal laminar flow between cylinders arranged in regular array. *AIChE Journal*, 5(3) :325–330, 1959.
- [84] Daniel K Sunada. *Laminar and turbulent flow of water through homogeneous porous media*. PhD thesis, University of California, Berkeley, 1965.
- [85] Q.D. To, G. Bonnet, and V.T. To. Closed-form solutions for the effective conductivity of two-phase periodic composites with spherical inclusions. *Proc. R. Soc. A*, 469(2151), 2013.
- [86] V.T. To, Q.D. To, and V. Monchiet. Computation of thermal dispersion conductivity of porous periodic media with fast fourier transform. *submitted*, 2014.
- [87] S. Torquato. *Random heterogeneous materials : microstructure and macroscopic properties*. Springer, 2001.

- [88] V. Vinogradov and G.W. Milton. An accelerated fft algorithm for thermoelastic and non-linear composites. *Int. J. Num. Meth. Engrg.*, 76(11) :1678–1695, 2008.
- [89] L.J. Walpole. Elastic behavior of composite materials : theoretical foundations. *Adv. App. Mech.*, 21 :169–243, 1981.
- [90] L.J. Walpole. Fourth-rank tensors of the thirty-two crystal classes : multiplication table. *Proc. R. Soc. Lond. A.*, 391 :149–179, 1984.
- [91] CY Wang. Stokes flow through a rectangular array of circular cylinders. *Fluid Dynamics Research*, 29(2) :65–80, 2001.
- [92] M.S. Wertheim. Exact solution of the percus-yevick integral equation for hard spheres. *Phys. Rev. Lett.*, 10(8) :321–323, 1963.
- [93] S. Whitaker. Diffusion and dispersion in porous media. *AIChE J.*, 13(3) :420–427, 1967.
- [94] S. Whitaker. Flow in porous media i : A theoretical derivation of darcy’s law. *Transp. Porous Media.*, 1(1) :3–25, 1986.
- [95] J-C Wodie and Th Levy. Correction non linéaire de la loi de darcy. *Comptes rendus de l’Académie des sciences. Série 2, Mécanique, Physique, Chimie, Sciences de l’univers, Sciences de la Terre*, 312(3) :157–161, 1991.
- [96] Q-S Zheng. Two-dimensional tensor function representation for all kinds of material symmetry. *Proc. R. Soc. A*, 443(1917) :127–138, 1993.

Résumé : Ce travail est dédié au calcul des propriétés de transfert thermique et de transport dans les milieux hétérogènes périodiques. Les résultats sont établis dans le cadre de l'homogénéisation périodique pour lequel les propriétés macroscopiques sont obtenues par la résolution de problèmes élémentaires pour la cellule irréductible. Plusieurs contributions sont ainsi apportées, visant à établir de nouvelles estimations par des approches analytiques ou en développant des méthodes numériques adaptées. Ainsi dans une première partie, on s'intéresse à la modélisation des propriétés non linéaires de filtration dans les milieux poreux. A l'échelle microscopique l'écoulement est régi par l'équation de Navier-Stokes. En développant la solution en série, on obtient par homogénéisation, une loi de filtration polynomiale. Tous les coefficients constitutifs de cette loi sont alors obtenus en résolvant en cascade des problèmes élémentaires sur la cellule à l'aide de schémas itératifs utilisant sur la transformée de Fourier rapide. On propose ensuite de nouvelles expressions analytiques pour les propriétés de conductivité thermique de composites périodiques renforcés par des inclusions sphériques. On résout l'équation intégrale de Lippmann-Schwinger par des développements en série de Neumann et en choisissant une polarisation constante dans les inclusions. Des expressions analytiques sont alors obtenues pour diverses configurations spatiales : réseaux cubiques et répartitions aléatoires isotropes. Dans la dernière partie de ce travail, on détermine les propriétés de transfert thermique par conduction et convection dans les milieux poreux saturés par un fluide. A nouveau, on propose des schémas de résolution basés sur la transformée de Fourier rapide pour le calcul du tenseur de diffusivité de milieux poreux.

Mots clés : Homogénéisation, Milieux Périodiques, Matériaux Poreux, Composites, Transformée de Fourier Rapide.

Abstract : In this work, we determine the macroscopic properties of thermal transfer and mass transport in periodic heterogeneous materials. All the results are established in the framework of periodic homogenization, for which, the macroscopic properties are deduced by solving elementary problems for the irreducible cell. Various contributions are provided, leading to the derivation of new closed-form expressions for the effective properties or by developing numerical tools. In the first part, we determine the nonlinear filtration properties of porous media. At the microscopic scale, the fluid flow obeys to the Navier-Stokes equation. By expanding the solution into power series, we obtain, after homogenization, a polynomial type macroscopic filtration law. All the constitutive coefficients of are determined by solving a hierarchy of cell problems by means of a numerical approach based on the Fast Fourier Transform algorithm. The problem of conductivity of periodic composites reinforced by spherical inclusions is thereafter considered by an analytic approach. We solve the Lippmann-Schwinger integral equation using Neumann series and a constant polarization in the inclusion. Closed-form estimate of the macroscopic conductivity are then obtain for different spatial configurations : cubic lattice and isotropic distribution of inclusions. In the last part, we determine the thermal transfer properties by conduction and convection of porous media fulfilled by a viscous fluid. Again, numerical tools based on FFT are considered to solve the unit cell problems and to compute the diffusivity tensor.

Keywords : Homogenization, Periodic Media, Porous Materials, Fast Fourier Transform.