

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National Polytechnique de Toulouse (Toulouse INP)

Discipline ou spécialité :

Energétique et Transferts

Présentée et soutenue par :

M. TONY ZAOUTER

le vendredi 19 octobre 2018

Titre :

Etude des écoulements à l'interface joint-rugosité pour des applications de haute étanchéité

Ecole doctorale :

Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés (MEGeP)

Unité de recherche :

Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (I.M.F.T.)

Directeur(s) de Thèse :

M. MARC PRAT

M. DIDIER LASSEUX

Rapporteurs :

M. CHRISTIAN GEINDREAU, UNIVERSITE GRENOBLE ALPES

Mme IRINA GRAUR MARTIN, AIX-MARSEILLE UNIVERSITE

Membre(s) du jury :

M. BENOÎT NOETINGER, IFPEN, Président

M. DIDIER LASSEUX, CNRS AQUITAINE, Membre

M. FLORENT LEDRAPPIER, CEA PIERRELATTE, Membre

M. GUILLAUME KERMOUCHE, ECOLE NLE SUP DES MINES SAINT ETIENNE, Membre

M. KARL VULLIEZ, CEA PIERRELATTE, Membre

M. MARC PRAT, CNRS TOULOUSE, Membre

Remerciements

Mes remerciements s'adressent en premier lieu à mes deux directeurs de thèse, Marc Prat et Didier Lasseux, qui ont guidé mes travaux au long de ces trois années de thèse. Sachant répondre à mes interrogations et me faire part de leur rigueur scientifique, parfois malgré la distance, ils ont également su trouver matière à faire progresser le sujet de recherche. Je leur exprime ma reconnaissance et le plaisir que j'ai eu à travailler sous leur tutelle.

Je souhaiterais ensuite remercier l'ensemble des membres du jury pour avoir accepté d'évaluer mes travaux, et d'avoir pris part à la soutenance. M. Noetinger, en tant que président du jury, M. Geindreau et Mme. Graur Martin pour avoir accepté le rôle de rapporteur de ce manuscrit, MM. Kermouche, Ledrappier et Vulliez, examinateurs et enfin M. Joseph, invité.

J'aimerais également adresser mes remerciements du côté du Laboratoire d'Étanchéité maestral à Alain Béziat, Florent Ledrappier et Karl Vulliez pour leur encadrement, leur disponibilité et les encouragements qu'ils m'ont donnés durant ces trois années. Je n'oublie pas non plus les autres membres de l'équipe avec qui j'ai eu le plaisir d'interagir lors de mes multiples passages au laboratoire.

Ces travaux ont été l'occasion d'une collaboration avec le LAAS pour la réalisation des puces nanofluidiques. Je tiens de ce fait à remercier Pierre Joseph et Rémi Courson qui m'ont apporté leur aide et leurs conseils pour la conception des puces. Je les remercie également de m'avoir accueilli et fait découvrir le procédé de nanofabrication.

Par ailleurs, je suis reconnaissant au service CoSINus de l'IMFT qui m'a apporté une aide lors du développement des codes de calcul de ce travail.

Je remercie d'autre part mes collègues de l'IMFT, qui ont fait en sorte que ce travail se déroule dans des conditions favorables.

Pour finir, je remercie ma famille et mes parents pour leur soutien tout au long de ces années.

Tony Zaouter

Résumé

Certaines applications industrielles nécessitent des niveaux d'étanchéité exceptionnels pour permettre la réalisation d'un vide poussé ou pour répondre à des enjeux de sécurité radiologique par exemple. Ces niveaux de haute étanchéité statique sur des assemblages démontables sont obtenus à l'aide de joints entièrement métalliques. La fuite résultante de l'assemblage n'est due qu'à la persistance d'un champ des ouvertures à l'interface entre le joint d'étanchéité et la bride d'assemblage, conséquence d'un contact imparfait entre les deux surfaces rugueuses. Le champ des ouvertures à l'interface de contact est assimilable à une fracture rugueuse hétérogène, de nature multi-échelle, et peut en principe être obtenu par un calcul de déformations mécaniques préalable. Dans ce travail, on s'intéressera plus particulièrement à l'écoulement gazeux raréfié dans le régime glissant au sein de cette fracture. Pour les régimes modérément raréfiés, l'écoulement est modélisé par l'équation de Reynolds faiblement compressible avec correction de glissement de premier ordre aux parois que l'on développe. On effectue ensuite un changement d'échelle par la méthode de la prise de moyenne volumique, permettant d'établir un modèle macroscopique d'écoulement à l'échelle d'un élément représentatif, où le débit massique est relié au gradient de pression via le tenseur de transmissivité. Celui-ci, caractéristique de l'élément représentatif de fracture, est calculé par résolution d'un problème de fermeture et est dépendant de la microstructure ainsi que du libre parcours moyen représentatif sur l'élément. Pour remonter à l'écoulement dans l'ensemble de la fracture, hétérogène à cette échelle, celle-ci est subdivisée en pavés sur chacun desquels est calculé un tenseur de transmissivité local par la méthode sus-citée. Ensuite, l'écoulement dans ce champ de tenseurs est résolu par une méthode des éléments finis de frontière, donnant la transmissivité apparente glissante du joint dans son ensemble. Cette approche à deux échelles, vue comme outil d'aide à la conception, permet une réduction de la complexité de calcul par rapport à une simulation directe, rendant possible une analyse plus efficace du comportement d'un système d'étanchéité. Pour valider l'utilisation du modèle de glissement d'un point de vue macroscopique et s'affranchir des incertitudes sur le calcul de déformation mécanique, des puces nanofluidiques de type réseau hétérogène de canaux droits sont fabriquées par photolithographie par niveaux de gris. Des essais expérimentaux de mesure de fuite sont réalisés sur ces géométries modèles, représentant des joints idéalisés. Ces essais sont effectués en appliquant une forte différence de pression d'hélium par utilisation d'un spectromètre de masse mesurant la fuite, produisant une condition de vide en sortie de puce. Selon les puces, les régimes de raréfaction atteints vont alors du régime glissant au régime moléculaire. Le débit de fuite mesuré est alors supérieur à celui prédit par le modèle de premier ordre, l'écart restant inférieur à un ordre de grandeur quel que soit le régime.

Mots-clés : étanchéité ; contact rugueux ; écoulement glissant ; changement d'échelle ; méthode à deux échelles ; puces nanofluidiques.

Abstract

Some industrial applications require exceptional sealing levels to maintain ultra-high vacuum conditions or for radiological safety concerns for example. Such high performance static sealing conditions on mechanical assemblies are reached using entirely metallic gaskets. The resulting leak-rate is only due to the persistence of an aperture field at the seal-flange interface, consequence of a non-ideal contact between the two rough surfaces. This aperture field can be viewed as a rough and heterogeneous fracture, of multi-scale nature, and can be obtained by a prior contact mechanics computation. In this work, we are interested on the rarefied flow of a gas in this fracture, drawing our attention to the slip regime. For such moderately rarefied regime, the flow is described by the slightly compressible Reynolds equation with a first-order slip-flow correction at the walls, which we develop. Using the method of volume averaging, an upscaling procedure is performed to derive the macroscopic flow model at the scale of a representative element, and where the mass flow rate is related to the pressure gradient by the transmissivity tensor. This latter is characteristic of the representative fracture element and is obtained by solving an auxiliary closure problem which depends on the micro-structure as well as the representative mean free path on the element. To compute the flow in the whole fracture, heterogeneous at this scale, it is subdivided in tiles on which a transmissivity tensor is locally computed by the aforementioned method. Then, the flow problem in this tensor field is solved using a boundary element method, leading to the apparent slip-corrected transmissivity of the entire aperture field. This two-scale approach is a conception tool which reduces the overall complexity with respect to a direct numerical simulation, allowing a more efficient analysis of the behavior of a sealing assembly. To validate the use of slip models at the macroscopic level and to eliminate the uncertainties of the contact mechanics computation, nanofluidic chips composed of heterogeneous network of straight channels are fabricated using a grayscale photolithography technique. Experimental measurements of the leak-rate are performed on these idealized geometries that mimic a seal assembly. They are realized by applying a strong helium pressure difference on the chip using a mass spectrometer to measure the leak, which produces a near vacuum condition at the outlet. Depending of the chip, the rarefaction regime ranges from slip to free-molecular. The measured leak-rate is greater than predicted by the first order model, though being of the same order of magnitude whatever the regime.

Keywords : sealing ; rough contact ; slip-flow ; upscaling ; two-scale method ; nanofluidic chips.

Sommaire

Remerciements v

Résumé vii

Sommaire ix

Nomenclature xiii

Introduction 1

1 État de l'art lié aux problématiques d'étanchéité 7
1.1 Modélisation mécanique du contact entre surfaces rugueuses . . . 7
1.1.1 La théorie du contact de Hertz . . . 7
1.1.2 Les modèles de contact stochastiques . . . 8
1.1.2.1 Le modèle de Greenwood et Williamson . . . 8
1.1.2.2 La théorie du contact de Persson . . . 9
1.1.3 Les modèles de contact déterministes . . . 11
1.1.3.1 Les modèles élastiques . . . 11
1.1.3.2 Les modèles élasto-plastiques . . . 15
1.2 Approches expérimentales de l'étanchéité . . . 19
1.2.1 Les travaux de Marie . . . 19
1.2.2 Les travaux de Vallet . . . 20
1.2.3 Les travaux de Bourniquel . . . 21
1.2.4 Les travaux de Tlili . . . 22
1.2.5 Les travaux mixtes portant sur le contact mécanique et la fuite . . . 23
1.3 Modélisation des écoulements en lien avec l'étanchéité . . . 24
1.3.1 L'hypothèse des écoulements en film mince . . . 24
1.3.2 Modèles d'écoulements en fracture rugueuse . . . 25
1.3.2.1 Les méthodes de changement d'échelle et les méthodes locales 25
1.3.2.2 Modélisation par la création d'un réseau de percolation . . 31
1.3.2.3 Autres approches utilisant la théorie de la percolation . . . 33
1.4 Conclusions . . . 34

2 Écoulements gazeux raréfiés dans des puces nanofluidiques 37
2.1 Généralités sur les écoulements raréfiés . . . 37
2.2 État de l'art sur la modélisation des écoulements raréfiés . . . 39
2.2.1 Les conditions aux limites . . . 39
2.2.1.1 Modèle de glissement de premier ordre . . . 39
2.2.1.2 Modèle de glissement de second ordre . . . 40
2.2.1.3 Modèle de glissement d'ordre supérieur . . . 42
2.2.1.4 Le coefficient d'accommodation . . . 43
2.2.2 Les travaux de Knudsen . . . 44
2.2.3 Des modèles d'écoulement unifiés . . . 48
2.2.3.1 L'équation de la lubrification corrigée . . . 48

2.2.3.2 Extension dans le cas des écoulements en milieux poreux . 51
2.3 Les « joints sur puces » : des structures nanofluidiques modèles 54
2.3.1 Présentation et objectifs des dispositifs nanofluidiques 54
2.3.2 Fabrication de dispositifs nanofluidiques 55
2.3.2.1 Types de puces réalisées 55
2.3.2.2 Procédure de fabrication des puces 57
2.3.2.3 Caractérisation de la géométrie gravée 58
2.3.3 Essais expérimentaux d'écoulements gazeux 59
2.3.3.1 Description du montage et protocole expérimental 61
2.3.3.2 Résultats expérimentaux 63
2.3.4 Modélisation numérique des écoulements gazeux 64
2.3.4.1 Modélisation de type réseau de pores 66
2.3.4.2 Approximation des milieux effectifs 69
2.3.5 Confrontation des résultats numériques et expérimentaux 71
2.4 Conclusions 73

3 Application au problème de l'étanchéité 77
3.1 Modèle d'écoulement à l'échelle microscopique 77
3.1.1 Analyse en ordre de grandeur et simplification des équations 78
3.1.2 Traitement de la condition limite de glissement 81
3.1.3 Équation de Reynolds avec glissement 83
3.1.4 Aspects numériques 85
3.1.5 Exemple de problème résolu 86
3.2 Changement d'échelle – vers un modèle à l'échelle macroscopique 87
3.2.1 Prise de moyenne volumique et modèle macroscopique non-clos . . . 91
3.2.2 Fermeture du problème 93
3.2.3 Modèle macroscopique d'écoulement 95
3.2.4 Décomposition du problème 96
3.2.4.1 Développement en série du problème de fermeture 96
3.2.4.2 Développement en série du tenseur de transmissivité macroscopique 98
3.2.5 Aspects numériques 99
3.2.6 Exemples de problèmes résolus 99
3.2.6.1 Validation sur des géométries simples 99
3.2.6.2 Solution sur une fracture rugueuse gaussienne 103
3.3 Modélisation de la fuite à l'échelle du joint – une approche à deux échelles . 104
3.3.1 Développement d'une méthode à deux échelles 106
3.3.1.1 Équations régissant l'écoulement aux différentes échelles . . 107
3.3.1.2 Procédure générale de la méthode 108
3.3.2 Introduction sur la méthode des éléments finis de frontière 110
3.3.2.1 Discrétisation du problème par la méthode des éléments finis de frontière 113
3.3.2.2 Détermination des champs internes 114
3.3.3 Adaptation de la méthode des éléments finis de frontière pour un domaine aux propriétés hétérogènes et anisotropes 115
3.3.3.1 Transformation des domaines 116
3.3.3.2 Mise en œuvre de la méthode des éléments finis de frontière 120
3.3.4 Aspects numériques 122
3.3.5 Exemples de problèmes résolus 122
3.3.5.1 Validation numérique de la méthode à deux échelles 122
3.3.5.2 Exemple dans une fracture synthétique 127
3.4 Résumé des procédures de calcul et exemple applicatif 128
3.4.1 Organigramme de modélisation 128
3.4.2 Illustrations sur des surfaces modèles 130

3.4.2.1 Cas sans aspérités . . . 131
3.4.2.2 Cas avec aspérités . . . 135
3.4.2.3 Temps d'analyse . . . 139
3.5 Conclusions . . . 140

4 Confrontation de l'approche numérique avec des essais expérimentaux 141
4.1 Présentation de l'approche expérimentale des travaux de Tlili . . . 141
4.2 Procédure numérique et confrontation avec l'expérience . . . 143
4.2.1 Surface rugueuse, contact et écoulement . . . 143
4.2.2 Comparaison avec les résultats de Tlili . . . 145
4.3 Conclusions . . . 147

Conclusion générale et perspectives 149

Références bibliographiques 153

Annexes 161

A Compléments sur les réseaux de canaux droits 163

B Mesures de fuite dans les puces 167

C Discrétisation en volumes finis 175
C.1 Formulation pour le problème de fermeture complet . . . 175
C.1.1 Discrétisation en volumes finis du problème . . . 175
C.1.2 Détermination du gradient en milieu hétérogène . . . 179
C.2 Formulation pour le problème de fermeture décomposé . . . 181
C.2.1 Discrétisation en volumes finis du problème . . . 181
C.2.1.1 Discrétisation du sous-problème à l'ordre zéro . . . 182
C.2.1.2 Discrétisation du sous-problème à l'ordre un . . . 183
C.2.1.3 Discrétisation des sous-problèmes aux ordres supérieurs . . . 187
C.2.2 Détermination du gradient en milieu hétérogène . . . 192

D Génération de surfaces gaussiennes 195

E Expression des intégrales pour la méthode des éléments finis de frontière 197
E.1 Expression des éléments de matrice G_{ij} et H_{ij} . . . 197
E.1.1 Cas des coefficients diagonaux . . . 197
E.1.2 Cas des coefficients extra-diagonaux . . . 198
E.2 Expression des éléments de matrice E_{ij} et F_{ij} . . . 200
E.2.1 Cas de la direction $\boldsymbol{e}_d$ . . . 200
E.2.2 Cas de la direction $\boldsymbol{e}_l$ . . . 201

F Exemple supplémentaire de la méthode à deux échelles 203

G Modèle réduit de contact entre surfaces rugueuses 207
G.1 Généralités sur les surfaces rugueuses spiralées . . . 207
G.2 Modèle réduit de contact . . . 207
G.2.1 Pression de contact entre bride et joint . . . 208
G.2.2 Déformation du joint sous un profil . . . 209
G.2.2.1 Contribution élastique des rugosités . . . 209
G.2.2.2 Contribution plastique des zones de contact . . . 209
G.2.2.3 Contribution élastique de l'ondulation . . . 210
G.2.3 Exemple de problème résolu sur un profil . . . 212

Nomenclature

On donne ci-contre une liste non-exhaustive des principales grandeurs, symboles et notations utilisées dans ce manuscrit. Devant la multitude des grandeurs à décrire et la nature nécessairement restreinte des notations possibles, des conflits peuvent apparaître. Dans ce cas, il faudra se référer au contexte qui sera précisé localement dans le texte.

Symboles de type lettre (latines)

Symbole	Définition	Unité S.I.
$\mathcal{A}_\beta$	Domaine occupé par le fluide (2D)	
$\mathcal{A}_\sigma$	Domaine occupé par le solide (2D)	
$\mathcal{A}_{\sigma\beta}$	Interface fluide–solide (3D)	
b	Coefficient de Klinkenberg	Pa
b_i	Largeur d'un canal	m
$\boldsymbol{b}$	Vecteur de fermeture	m
$\boldsymbol{b_p}$	Vecteur de fermeture décomposé	$\mathrm{m}^{1-\mathrm{p}}$
$\boldsymbol{B}$	Tenseur de Klinkenberg	Pa
C	Conductance	$\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}$
C_i	Conductance d'un canal	$\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}$
$\mathcal{C}_{\sigma\beta}$	Contour des zones de contact (2D)	
d	Diamètre d'un tube	m
D	Nombre de raréfaction	
$\mathfrak{D}$	Matrice de dilatation	
E	Module de Young	Pa
h	Ouverture locale de l'interface joint–bride	m
h_i	Ouverture d'un canal	m
h_0	Ouverture intrinsèque caractéristique	m
$\mathcal{H}$	Dureté du matériau solide	Pa
$\boldsymbol{I}$	Tenseur identité	
k	Transmissivité locale	m^3
k_B	Constante de Boltzmann ($1{,}381\cdot10^{-23}$)	$\mathrm{J}\cdot\mathrm{K}^{-1}$
K	Transmissivité apparente	m^3
K_0	Transmissivité intrinsèque	m^3
K_s	Transmissivité sérielle	m^3
K_p	Transmissivité parallèle	m^3
$\boldsymbol{K}$	Tenseur de transmissivité apparent	m^3
$\boldsymbol{K_0}$	Tenseur de transmissivité intrinsèque	m^3
$\boldsymbol{K_p}$	Tenseur de correction de glissement ($p \geqslant 1$)	$\mathrm{m}^{3-\mathrm{p}}$
Kn	Nombre de Knudsen	
L_i	Longueur d'un canal	m
L_x	Dimension de la fracture selon x	m
L_y	Dimension de la fracture selon y	m
M	Masse molaire	$\mathrm{kg}\cdot\mathrm{mol}^{-1}$

$\boldsymbol{n}$	Vecteur normal à $\mathcal{A}_{\sigma\beta}$	
$\boldsymbol{n_{\sigma\beta}}$	Vecteur normal à $\mathcal{C}_{\sigma\beta}$	
$\mathcal{N}_\mathrm{A}$	Constante d'Avogadro ($6{,}022 \cdot 10^{23}$)	mol^{-1}
p	Pression du fluide	Pa
p_0	Pression d'entrée d'un canal	Pa
p_1	Pression de sortie d'un canal	Pa
P_a	Pression d'assise du contact	Pa
P_i	Pression interne du fluide vue par le joint	Pa
P_e	Pression externe du fluide vue par le joint	Pa
q	Débit massique par unité de largeur	$\mathrm{kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}}$
$\boldsymbol{q}$	Vecteur débit massique par unité de largeur	$\mathrm{kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}}$
Q	Débit massique	$\mathrm{kg \cdot s^{-1}}$
Q_i	Débit massique dans un canal	$\mathrm{kg \cdot s^{-1}}$
Q_p	Débit massique de Poiseuille	$\mathrm{kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}}$
Q^*	Facteur de correction du débit de Poiseuille	
$\mathcal{Q}$	Taux de fuite	$\mathrm{Pa \cdot m^3 \cdot s^{-1}}$
r	Rayon	m
r_e	Rayon externe de la bride	m
r_i	Rayon interne de la bride	m
R	Constante des gaz parfaits (8,314)	$\mathrm{J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}}$
R_a	Rugosité arithmétique	m
Re	Nombre de Reynolds	
R_t	Rugosité maximale	m
$\mathfrak{R}$	Matrice de rotation	
S	Surface occupée par $\mathcal{S}$	$\mathrm{m^2}$
S_β	Surface occupée par $\mathcal{S}_\beta$	$\mathrm{m^2}$
$\mathcal{S}$	Domaine de prise de moyenne volumique (2D)	
$\mathcal{S}_\beta$	Domaine fluide de prise de moyenne volumique (2D)	
t	Temps	s
$\boldsymbol{t}$	Vecteur tangentiel	
T	Température	K
u	Composante de la vitesse (ou déplacement) selon x	$\mathrm{m \cdot s^{-1}}$(ou m)
v	Composante de la vitesse (ou déplacement) selon y	$\mathrm{m \cdot s^{-1}}$(ou m)
$\boldsymbol{v}$	Vecteur vitesse (de composantes u, v et w)	$\mathrm{m \cdot s^{-1}}$
w	Composante de la vitesse (ou déplacement) selon z	$\mathrm{m \cdot s^{-1}}$(ou m)
x	Abscisse, dans le plan de la fracture	m
$\boldsymbol{x}$	Vecteur position	m
y	Ordonnée, dans le plan de la fracture	m
z	Cote, transversalement au plan de la fracture	m

Symboles de type lettre (grecques)

Symbole	Définition	Unité S.I.
β	Phase fluide	
δ	Diamètre de collision	m
$\delta(x)$	Distribution de Dirac	$[x]^{-1}$
ϵ	Écart relatif	
ε_β	Porosité (2D)	
ε_σ	Taux de portance (2D)	
γ	Fonction quelconque	Pa
Γ_1, Γ_2	Conductances principales de $\boldsymbol{\Gamma}$	$\mathrm{m \cdot s}$
$\boldsymbol{\Gamma}$	Tenseur de conductance	$\mathrm{m \cdot s}$

λ	Libre parcours moyen	m
μ	Viscosité dynamique	$\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s}$
μ_0	Viscosité dynamique usuelle	$\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s}$
ν	Coefficient de Poisson	
ω	Densité du maillage	m^{-1}
Ω_β	Domaine occupé par le fluide (3D)	
$\phi(r)$	Solution élémentaire de l'équation de Laplace	
$\varphi(p)$	Loi d'état du gaz	$\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^{-3}$
$\boldsymbol{\Pi_i}$	Vecteur de périodicité	m
ρ	Masse volumique	$\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^{-3}$
σ	Phase solide (zones de contact)	
$\boldsymbol{\varsigma}$	Position de la singularité	m
σ_v	Coefficient d'accommodation tangentielle	
σ_y	Limite d'élasticité du solide	Pa
τ	Temps caractéristique	s
θ	Orientation principale de $\boldsymbol{\Gamma}$	rad
ξ	Fonction d'accommodation	
ζ	Seconde viscosité	$\mathrm{Pa}\cdot\mathrm{s}$

Opérateurs et notations

Symbole	Signification
$\check{\psi}$	Déviation spatiale à la moyenne superficielle de ψ $(= \psi - \langle\psi\rangle)$
$\widetilde{\psi}$	Déviation spatiale à la moyenne intrinsèque de ψ $(= \psi - \langle\psi\rangle^\beta)$
$\overline{\psi}$	Valeur moyenne de ψ, au sens large (exemple : $(\psi_1 + \psi_2)/2$)
$\underline{\psi}$	Quantité ψ sous forme adimensionnelle
$\overline{\Delta}\psi$	Différence entre deux quantités (exemple : $\psi_1 - \psi_2$)
$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\psi}$	Divergence de $\boldsymbol{\psi}$
$\boldsymbol{\nabla}\psi$	Gradient de ψ
$\boldsymbol{\nabla}^2\psi$	Laplacien de ψ
$\langle\psi\rangle$	Moyenne superficielle de ψ
$\langle\psi\rangle^\beta$	Moyenne intrinsèque de ψ

Acronymes

AFM	Microscopie à force atomique (*Atomic Force Microscopy*)
BEM	Méthode des éléments finis de frontière (*Boundary Element Method*)
DNS	Simulation numérique directe (*Direct Numerical Simulation*)
DSMC	*Direct Simulation Monte Carlo*
EMA	Approximation des milieux effectifs (*Effective Medium Approximation*)
FEM	Méthode des éléments finis (*Finite Element Method*)
HR	Haute résolution
MR	Modèle réduit
PNM	Modèle de réseau de pores (*Pore-Network Modelling*)
SER	Surface élémentaire représentative
TMAC	Coefficient d'accommodation tangentielle de quantité de mouvement (*Tangential Momentum Accommodation Coefficient*)

Introduction

L'étanchéité d'un système industriel est un sujet d'intérêt majeur, que ce soit pour garantir le bon fonctionnement opérationnel du dit système ou encore pour des raisons de sûreté. À ce titre nous pouvons citer quelques exemples dans l'industrie nucléaire, qui fait usage de joints d'étanchéité pour éviter une contamination radiologique de l'environnement, au niveau des sas des bâtiments, mais aussi au niveau de la robinetterie des circuits hydrauliques et de la cuve du réacteur, où le fluide à étancher dans ces derniers cas est généralement de l'eau sous forte pression, à haute température et radioactive. D'autres applications telles que les accélérateurs de particules ou les réacteurs à fusion, pour ne mentionner qu'elles, nécessitent le maintien d'un vide extrêmement poussé pour assurer leur bonne marche. Il apparaît alors évident que selon les niveaux de fuite à atteindre, la nature du fluide à étancher, les matériaux mis en jeu ou encore les conditions physico-chimiques et thermodynamiques du processus industriel, le type de joint utilisé ne sera pas identique. La figure 1 présente trois grandes familles de joints d'étanchéité couramment utilisés : les joints graphites, élastomères et métalliques. Les joints métalliques, qui font l'objet de cette étude, sont employés notamment pour obtenir des hautes étanchéités, à très haute ou très basse température, dans des domaines et applications où les joints élastomères ne sont pas adaptés, sous réserve de disposer d'efforts de serrage importants.



(a) Joints graphites. (b) Joints élastomères. (c) Joints métalliques.

Figure 1 – Quelques types de joints d'étanchéité (source : TECHNETICS Group).

Les joints métalliques sont généralement montés entre deux brides boulonnées (qui peuvent correspondre aux extrémités de deux tuyaux que l'on assemble), assurant alors l'étanchéité de l'assemblage en s'opposant au passage du fluide (figure 2). Comme le montre la figure, les brides ne sont pas parfaitement lisses mais possèdent une certaine rugosité. Ces écarts à la géométrie idéale sont le résultat du processus de fabrication mécanique des brides, généralement du tournage. Cela occasionne des défauts à différentes échelles de longueurs, allant de l'ondulation (induite par les vibrations de la machine et le relâchement des contraintes) aux aspérités (correspondant à l'arrachement de la matière au niveau microscopique), en passant par la spirale d'usinage, résultat du passage de l'outil coupant dans la direction circonférentielle et donnant lieu à des motifs striés ayant la forme de l'outil. Le joint étant fait d'un revêtement métallique mou et ductile (exemple de l'HÉLICOFLEX®), il va se déformer lors du serrage contre la bride et combler en partie les anfractuosités de celle-ci. Le bouchage n'est alors que partiel, et « l'espace vide interconnecté » à l'interface entre le joint et la bride est appelé le champ des ouvertures et est assimilable à une fracture rugueuse. Dans le cas général, on distingue deux types de fuites possibles : une fuite passant directement par cette fracture (fuite interfaciale), et une fuite au travers du matériau du joint (par perméabilité ou diffusion). Pour les joints métalliques, cette dernière composante est négligeable devant la première, ce qui leur per-

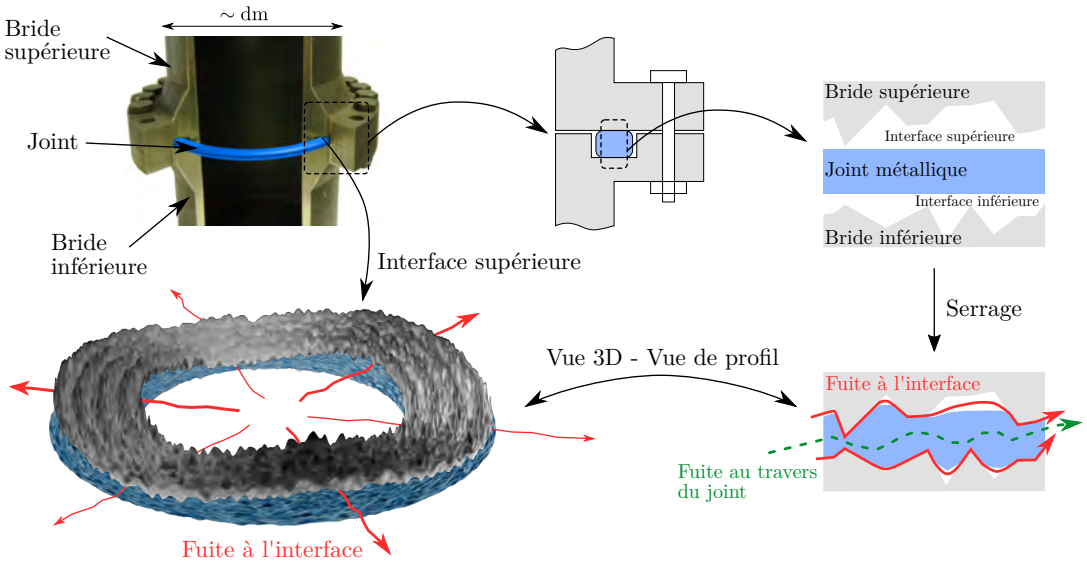


FIGURE 2 – Vue en coupe partielle d'un joint assemblé entre deux brides. L'interface de contact entre les deux surfaces rugueuse est schématisée.

met d'atteindre des hauts niveaux d'étanchéité en pratique. Le joint et les brides (elles aussi métalliques) sont alors considérés comme imperméables au fluide et la fuite totale de l'assemblage correspond à celle s'opérant à l'interface uniquement. Le niveau de fuite obtenu est dépendant des propriétés physiques du fluide, mais également de la connectivité de la fracture entre les deux zones à isoler. Cela peut être contrôlé par un motif de rugosité approprié et par application d'une pression nominale de contact importante, bouchant davantage les anfractuosités et réduisant d'autant la fuite *a priori*. Il faut toutefois imposer des efforts qui restent raisonnables pour des raisons techniques ou pour éviter la dégradation des joints, compromettant leur performance.

Problématiques et objectifs

Le problème posé par l'étanchéité statique d'assemblages par des joints métalliques revêt une certaine complexité de part son caractère multi-échelle et multi-physique. En effet, les surfaces rugueuses mises en jeu possèdent des dimensions pouvant aller de quelques dizaines de millimètres à plusieurs dizaines de centimètres (figure 2), tout en comportant des détails de rugosité jusqu'à quelques dizaines de nanomètres, et qui se révèlent influents sur le comportement global du système. Lors de la mise en contact par serrage de ces surfaces multi-échelle avec le joint d'étanchéité, celui-ci va se déformer mécaniquement selon un comportement généralement élasto-plastique non-linéaire. Le champ des ouvertures apparaît alors comme le résultat d'un processus multi-échelle complexe. L'écoulement de fluide dans ce champ des ouvertures, donnant lieu à la fuite, va donc également endosser un caractère multi-échelle. Selon les applications, d'autres aspects multi-physiques sont envisageables parmi lesquels de l'interaction fluide–structure (l'écoulement va provoquer une contre-déformation du champ des ouvertures), des phénomènes thermiques ou chimiques, un changement de phase du fluide (vaporisation lors d'un écoulement liquide, liquéfaction d'un gaz lors de l'écoulement) ou encore un mouvement relatif entre le joint et la bride, modifiant le champ des ouvertures (dilatation thermique différentielle de la bride et du joint, sollicitation mécanique externe sur la bride).

Lorsque l'on souhaite étancher un gaz, des phénomènes propres apparaissent comme de la compressibilité et de la raréfaction. Cette raréfaction de l'écoulement est due à l'étroitesse du champ des ouvertures combinée à une diminution de la densité du fluide. Le niveau de raréfaction est caractérisé par le nombre adimensionnel de KNUDSEN, de telle

sorte que lorsque celui-ci est grand, la raréfaction est importante. En pratique, il n'est pas rare de voir apparaître des raréfactions importantes dans des situations impliquant le maintien de vide d'un côté du joint. Outre certaines situations industrielles, c'est le cas par exemple lors des essais de qualification « usuels » des joints d'étanchéité réalisés au Laboratoire d'Étanchéité maestral (par exemple, selon la norme NF EN 13185). Pour cela, l'assemblage est soumis à une pression donnée d'hélium d'un côté, et le flux d'hélium est mesuré de l'autre par un spectromètre de masse, qui y maintient une condition de vide. Des essais expérimentaux ont été réalisés par cette méthode dans les travaux de Tlili (2013). Le nombre de Knudsen peut alors varier fortement entre l'entrée et la sortie du système (typiquement, passant du régime hydrodynamique au régime moléculaire), rendant complexe la modélisation de l'écoulement. À noter que le choix de l'hélium en détection de fuite est justifié par sa rareté, sa non-réactivité chimique et ses petites taille et masse atomique, qui lui permettent de se faufiler dans des anfractuosités de petites dimensions du champ des ouvertures.

La problématique qui émerge alors peut se formuler ainsi : comment est-il possible de prédire le niveau de fuite gazeuse de tels assemblages, en particulier pour des besoins en très haute étanchéité, pour lesquels les niveaux de fuite à atteindre sont très faibles ?

Avec la pluralité des phénomènes physiques à prendre en compte pour répondre à cette problématique, et les difficultés de modélisation que cela induit, il est nécessaire de définir un cadre d'étude plus précis pour accroître la compréhension des mécanismes qui régissent l'étanchéité des joints statiques métalliques. Pour cela, on s'intéresse à l'écoulement monophasique et isotherme d'un gaz faiblement compressible en régime raréfié dans un champ des ouvertures statique. L'objectif est alors de développer un modèle numérique d'écoulement multi-échelle, permettant de prédire la fuite d'un assemblage d'étanchéité dans son ensemble. Ce modèle constituera de fait un outil d'aide à la conception et à la qualification des systèmes d'étanchéité. À ce titre, il permettra de définir, de manière plus aisée et réactive, des critères de performances des joints en fonction de la topographie du champ des ouvertures, obtenue par la mise en contact de deux surfaces métalliques. Il s'insère dans un cadre de conception plus général des systèmes à joints d'étanchéité métalliques, où une conception optimale de ceux-ci est attendue à terme. Une autre vision de toute la chaîne de modélisation contact–écoulement est celle d'un jumeau numérique des essais expérimentaux. Typiquement, en partant de la mesure de l'état surfaces rugueuses, en déterminant numériquement le champ des ouvertures par contact mécanique, puis en y calculant l'écoulement, on doit être en mesure de reproduire les résultats expérimentaux réalisés au laboratoire. L'enjeu est donc à la fois prédictif et reproductif.

Approches proposées

Ce travail de thèse se propose de modéliser numériquement les écoulements de gaz dans le champ des ouvertures à l'interface entre la bride et le joint d'étanchéité, en utilisant une approche à deux échelles. Avant toute chose, il est cependant nécessaire d'obtenir la micro-géométrie de la fracture par modélisation du contact et de la déformation entre les surfaces rugueuses antagonistes. Pour cela, nous faisons l'hypothèse d'un découplage entre l'aspect contact et l'écoulement (pas d'interaction fluide–structure). Cela peut se justifier par le fait que les pressions de contact atteintes lors du serrage (plusieurs dizaines de mégapascals) et les déformations qu'elles entraînent sont bien supérieures aux pressions de fluide (de l'ordre de quelques bars). La modélisation du contact a fait l'objet de travaux antérieurs (Tlili, 2013; Zaouter, 2015) et est considérée comme une donnée préalable. Elle ne sera donc pas développée outre mesure dans le travail ci-après. On pourra toutefois en trouver une description succincte en annexe G. L'écoulement avec glissement dans ce champ des ouvertures est modélisé ensuite, le processus est donc séquentiel.

Comme le montre la figure 2, les champs des ouvertures étudiés sont généralement de forme annulaire ou équivalente topologiquement, de rayon interne r_i et externe r_e. De

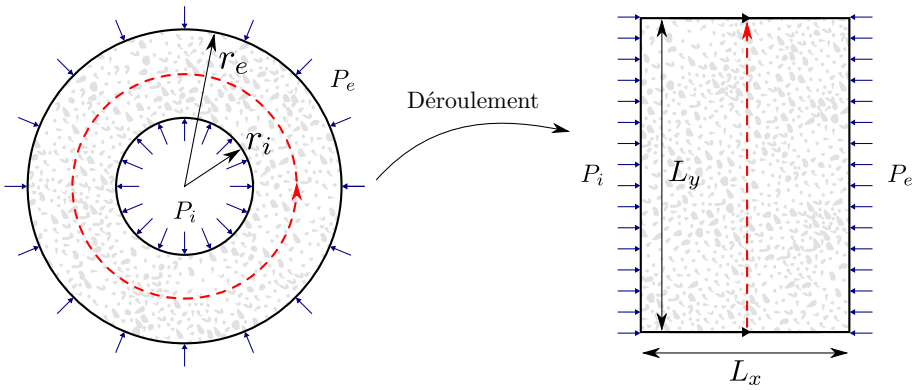


FIGURE 3 – Vue bidimensionnelle de la fracture sous forme annulaire (à gauche), et sa version « déroulée » selon le périmètre moyen (à droite).

plus, ces systèmes sont soumis à des pressions de fluide interne et externe, notées P_i et P_e respectivement. Nous choisissons cependant de ne pas traiter les problèmes directement sous cette forme polaire, mais on se ramènera plutôt à une géométrie cartésienne comme présenté sur la figure 3. Cette convention sera utilisée tout au long de ce mémoire (sauf précision particulière) et il est important de l'indiquer dès maintenant. Pour cela, la forme annulaire est « déroulée » selon son périmètre moyen pour obtenir la forme cartésienne. Une condition de périodicité est utilisée selon la direction de déroulement pour préserver le souvenir du caractère annulaire originel (symbolisé par les flèches sur les faces supérieures et inférieures). La nouvelle géométrie cartésienne est alors caractérisée par sa dimension $L_x = \Delta r = r_e - r_i$ selon la direction x, correspondant à la largeur de la portée annulaire. Selon la direction y du déroulement, sa dimension est $L_y = 2\pi\bar{r} = \pi(r_i + r_e)$, correspondant au périmètre moyen de l'anneau. Une telle transformation est justifiée lorsque $\Delta r \ll \bar{r}$, c'est-à-dire que la portée de la géométrie annulaire est petite devant le rayon moyen, rendant négligeable les effets de la courbure.

Ce manuscrit est organisé de la façon suivante :

Le chapitre 1 offre une revue bibliographique des travaux de la littérature pour ce qui a trait à l'étanchéité des joints métalliques. On présentera d'abord plusieurs approches au problème du contact entre surfaces rugueuses, tant stochastiques que déterministes. Les travaux sur les écoulements, essentiellement de liquide, seront ensuite exposés au travers de méthodes directes, stochastiques, par changement d'échelle ou encore par réseau de pores. Une part de ce chapitre concernera également la présentation de travaux portant sur des protocoles et résultats expérimentaux de mesure de fuite (liquide et gazeuse) sur des systèmes modèles d'étanchéité.

Le chapitre 2 est consacré aux écoulements gazeux raréfiés. Une première partie présente une revue de la littérature sur les gaz raréfiés, en particulier dans le régime glissant où l'on introduit l'accommodation et les conditions aux limites de glissement aux parois. Des résultats expérimentaux ainsi que des modèles numériques d'écoulement sont présentés pour des géométries idéales, de type tube ou canaux droits. Toujours en géométrie idéale, des modèles tentant de décrire l'écoulement au-delà du régime glissant (pour des raréfactions plus importantes, dans le régime transitoire par exemple) sont présentés. Afin de valider l'utilisation de tels modèles à forte raréfaction (typiquement dans des conditions de « qualification de joints d'étanchéité »), des géométries idéales sont gravées sur des puces en silicium au LAAS. Ces géométries sont notamment de types canaux droits ou encore réseaux hétérogènes de canaux droits, afin de mimer un champ des ouvertures de joint d'étanchéité. Leur géométrie connue et relativement bien maîtrisée permet l'étude de la fuite qui les traverse, tout en s'affranchissant de l'aspect obtention du champ des

ouvertures par calcul de contact et déformation. Des mesures de débit gazeux sont ensuite effectuées au Laboratoire d'Étanchéité maestral, puis comparées à des modèles numériques de type réseau de pores renfermant différents modèles de glissement.

Dans le chapitre 3, nous modélisons les écoulements en fracture rugueuse. Pour cela, l'équation de Reynolds est formellement développée en présence d'une condition limite de glissement de premier ordre aux parois. Afin de tenir compte de la nature multi-échelle de la fracture, un changement d'échelle de cette équation est ensuite effectué à l'échelle d'un élément représentatif de fracture en utilisant la méthode de la prise de moyenne volumique. Un modèle macroscopique d'écoulement est alors obtenu, faisant intervenir un tenseur de transmissivité caractéristique de l'élément considéré, et fonction de la microstructure locale ainsi que du libre parcours moyen représentatif. Comme la fracture reste hétérogène à large échelle de part la présence de stries ou encore d'ondulation, il est nécessaire de tenir compte de l'impact que cela induit sur le transport global. Une méthode à deux échelles est alors développée et procède par subdivision de la fracture entière en pavés, sur chacun desquels est calculé un tenseur de transmissivité par la méthode sus-citée. La fracture étant alors représentée par un champ de tenseurs hétérogène et anisotrope, l'écoulement dans ce dernier est résolu par une méthode d'éléments finis de frontière pour obtenir la transmissivité du contact dans son ensemble. Cette transmissivité apparente globale caractérise le comportement en étanchéité du champ des ouvertures et est fonction du niveau de raréfaction moyen appliqué sur celui-ci. Des illustrations sont données sur des fractures modèles, et les résultats obtenus par cette méthode à deux échelles sont comparés à ceux donnés par la simulation directe (résolution de l'équation de Reynolds microscopique sur l'ensemble de la fracture, à toutes les échelles). Cela permet de s'assurer du bien fondé de cette méthode élaborée et d'en exposer les gains obtenus en terme de réduction de temps de calcul notamment.

Enfin, le chapitre 4 se propose de confronter les résultats de ce « jumeau numérique d'étanchéité » à des résultats expérimentaux tirés d'une étude réalisée antérieurement par Tlili (2013). Ceci permet de convenir de la validité des modèles développés dans ce travail, d'en donner les limites ainsi que les perspectives d'amélioration pour offrir des résultats plus fidèles à l'expérience. Des pistes de perfectionnement du montage expérimental sont également évoquées à la lumière des travaux de Tlili (2013).

Chapitre 1

État de l'art lié aux problématiques d'étanchéité

Il est bien connu que la surface d'un matériau n'est pas parfaite et que sa géométrie réelle possède des écarts de formes par rapport à sa géométrie macroscopique idéale. Cela peut avoir de nombreuses conséquences dans des applications industrielles lorsque de telles surfaces rugueuses sont mises en contact. Ces conséquences peuvent être de diverses natures mais celle qui nous intéresse plus particulièrement ici est le transfert de matière s'opérant à l'interface de contact entre ces deux surfaces, pour des applications d'étanchéité. Ce chapitre propose une étude bibliographique des travaux réalisés autour des thématiques associées aux joints d'étanchéité statiques. Il présentera d'abord des modèles de contact mécanique entre deux surfaces rugueuses, permettant de déterminer notamment l'espace libre persistant à l'interface de contact ainsi que son évolution en fonction de l'effort de serrage appliqué. Dans la seconde partie, une revue de travaux expérimentaux portant sur l'étanchéité des assemblages à joints métalliques sera abordée. Ceci dans le but d'appréhender l'évolution globale de la fuite d'un tel assemblage ainsi que sa caractérisation phénoménologique. Enfin, l'aspect modélisation numérique des écoulements dans cet espace libre, appelé champ des ouvertures, sera exposé. Ces modèles ont pour but la prédiction de la fuite d'un assemblage mais aussi la compréhension des mécanismes qui peuvent y conduire.

1.1 Modélisation mécanique du contact entre surfaces rugueuses

L'étude du contact entre deux surfaces rugueuses permet d'obtenir des informations comme les déplacements locaux au voisinage des zones en contact. Ces informations sont d'une grande utilité pour des applications d'étanchéité puisqu'elles permettent de remonter au champ des ouvertures présent à l'interface de contact. Cette section recense donc différentes façons de modéliser le contact rugueux qu'il est possible de trouver dans la littérature.

1.1.1 La théorie du contact de Hertz

Les premiers travaux de mécanique du contact ont été initiés par Hertz en 1882 (Hertz, 1882) en vue d'étudier l'influence des déformations élastiques des surfaces sur le contact. La théorie de Hertz fournit notamment les expressions de la pression et de l'aire de contact qui règne entre les deux solides, ainsi que leur évolution en fonction de la charge appliquée et des caractéristiques géométriques et matérielles des solides en contact. Cette théorie est basée sur les hypothèses suivantes :

- Les solides en contact sont élastiques, homogènes et isotropes. Leur surface est considérée comme parfaitement lisse.
- Les déformations sont supposées petites.
- Chacun des deux solides est considéré comme un demi-espace élastique.

— Aucun frottement n'est présent, seuls des efforts normaux sont transmis par le contact.

Dans le cas d'un contact entre deux sphères de rayons R_1 et R_2, l'aire de contact sera un cercle de rayon a. En définissant le rayon de courbure relatif R par :

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \tag{1.1}$$

En définissant également le module de Young équivalent par la relation (1.2), dans laquelle ν_1, E_1 et ν_2, E_2 sont les coefficients de Poisson et les modules de Young des solides 1 et 2 respectivement.

$$\frac{1}{E} = \frac{1-{\nu_1}^2}{E_1} + \frac{1-{\nu_2}^2}{E_2} \tag{1.2}$$

On obtient les expressions de quelques grandeurs qui caractérisent le contact en fonction de l'effort normal F appliqué, par exemple :

— Le rayon de contact a.

$$a = \sqrt[3]{\frac{3FR}{4E}} \tag{1.3}$$

— L'enfoncement total δ.

$$\delta = \sqrt[3]{\frac{9F^2}{16RE^2}} \tag{1.4}$$

— La répartition de pression de contact en fonction du rayon $p(r)$ et la pression maximale p_0.

$$p(r) = p_0\sqrt{1-\left(\frac{r}{a}\right)^2} \quad , \quad p_0 = \sqrt[3]{\frac{6FE^2}{\pi^3R^2}} \tag{1.5}$$

La connaissance de ces quantités est d'une grande importance puisqu'elles permettent notamment de calculer les contraintes à l'intérieur des solides en contact, pour déterminer par exemple l'effort maximal avant atteinte de la limite d'élasticité du matériau (Johnson, 1987). Cette théorie de Hertz est également employée dans des modèles de contact entre surfaces rugueuses constituées de multiples aspérités.

1.1.2 Les modèles de contact stochastiques

1.1.2.1 Le modèle de Greenwood et Williamson

Pour décrire le contact élastique entre une surface rugueuse et un plan lisse, Greenwood et Williamson (1966) ont développé un modèle stochastique basé sur la théorie de Hertz. La rugosité du profil est pour cela supposée être constituée de multiples aspérités, toutes étant sphériques et de même rayon R proche de leur sommet. La hauteur des aspérités est supposée aléatoire et suit une distribution définie par une certaine densité de probabilité $\phi(z)$. Ainsi, lorsque l'on rapproche les deux plans de référence des deux surfaces à une distance d (voir figure 1.1), la probabilité d'avoir une aspérité d'altitude initiale supérieure à d qui vient en contact est donnée par :

$$\mathbb{P}(z > d) = \int_d^{+\infty} \phi(z)\,\mathrm{d}z \tag{1.6}$$

En définissant par N le nombre total d'aspérités dans le profil et par E le module d'élasticité effectif (d'expression identique à (1.2)), il est possible de donner une expression pour l'aire de contact S et la force de contact F de la façon suivante :

$$S = \pi NR\int_d^{+\infty} (z-d)\phi(z)\,\mathrm{d}z \tag{1.7}$$

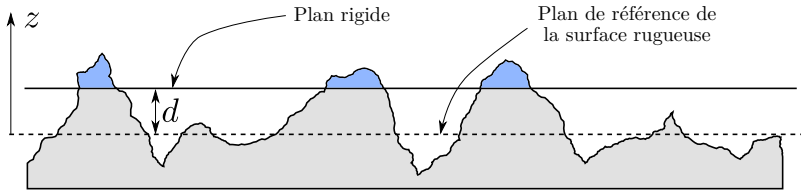


FIGURE 1.1 – Modélisation du contact selon Greenwood et Williamson (1966). La charge est supportée par les aspérités d'altitude supérieure à d (en bleu).

$$F = \frac{4}{3} N E \sqrt{R} \int_{d}^{+\infty} (z-d)^{3/2} \phi(z)\, \mathrm{d}z \tag{1.8}$$

Leurs travaux ont permis de montrer une relation linéaire entre l'aire de contact et l'effort normal (presque proportionnelle), tant que l'aire réelle de contact est faible devant l'aire de contact apparente.

GREENWOOD et WILLIAMSON ont étendu leurs travaux dans le cas où des aspérités deviendraient plastiques. L'introduction de l'indice de plasticité ψ, fonction notamment de la dureté $\mathcal{H}$ du matériau et de l'écart-type σ de la distribution des altitudes, donne une indication sur le mode de déformation des aspérités. Lorsque $\psi < 0{,}6$, le contact est considéré comme élastique. Au contraire, si $\psi > 1$, le contact est considéré comme purement plastique.

$$\psi = \frac{E}{\mathcal{H}} \sqrt{\frac{\sigma}{R}} \tag{1.9}$$

L'approche utilisée ici par GREENWOOD et WILLIAMSON considère cependant l'indépendance de chaque aspérité. En effet, aucune déformation élastique des aspérités n'est considérée par ce modèle, c'est-à-dire qu'une aspérité en contact ne provoquera pas d'affaissement global de la surface dans son voisinage, ne provoquant alors pas d'affaissement des aspérités voisines et par conséquent, ne modifiant pas la distribution $\phi(z)$ au cours du chargement. Ce modèle a été modifié par Ciavarella *et al.* (2008) pour prendre en compte les interactions de manière globale, en appliquant un déplacement vertical uniforme des aspérités en fonction de la charge. Le modèle de Chang *et al.* (1987) permet quant à lui de prendre en compte la variation d'aire de contact par rapport au modèle de HERTZ en régime plastique, en se basant sur une approche de conservation du volume de l'aspérité.

1.1.2.2 La théorie du contact de Persson

Dans les modèles de contact présentés précédemment, la rugosité est décrite par des aspérités sphériques de rayon de courbure identique. Cette description sous forme de sphère et la détermination de leur rayon est alors dépendante de la résolution utilisée pour mesurer la surface. Ces méthodes ne rendent alors pas compte du caractère multi-échelles des surfaces réelles. Elles ne considèrent pas non plus les interactions à longue distance entre les aspérités. Fort de ces constats, PERSSON a développé au début des années 2000 un modèle de contact pour les surfaces rugueuses aléatoires (Persson, 2001b), et plus particulièrement pour les surfaces fractales auto-affines. Ce modèle a initialement été développé pour étudier le contact d'un pneu (fait généralement d'un matériau élastomère) avec la route, qui tend à posséder ce caractère fractal.

Le modèle de PERSSON est un modèle stochastique qui n'exclut *a priori* aucune échelle de rugosité. Il est basé sur le principe selon lequel les propriétés du contact, comme l'aire réelle de contact notamment, dépendent de l'échelle à laquelle on étudie l'interface de contact. Cela se traduit par une dépendance à un facteur de grossissement ζ (qui se rapporte à une échelle de longueur caractéristique du domaine étudié). Ainsi, lorsque $\zeta = 1$, le contact apparaît comme complet et les surfaces en contact parfaitement lisses.

Plus le grossissement augmente et plus le contact apparaît comme partiel, de plus en plus de composantes de rugosité sont alors considérées (de plus haute fréquence, voir figure 1.2). Le grossissement est néanmoins borné à une valeur maximale qui correspond par exemple à la résolution maximale utilisée pour mesurer la surface rugueuse, ou encore à la distance atomique (Persson, 2001b).

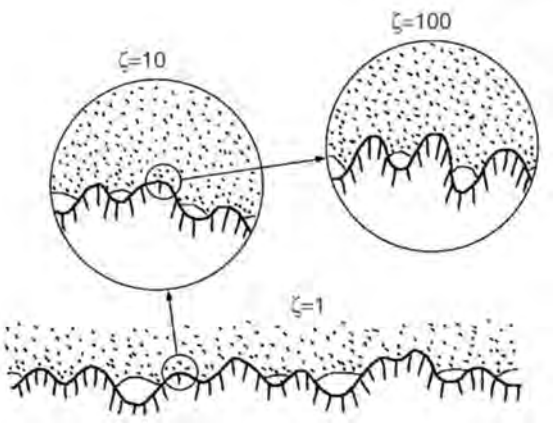


Figure 1.2 – Visualisation du contact entre un surface rigide rugueuse (traits) et une surface élastique déformable (points) à différents grossissements ζ. Plus le grossissement est augmenté, plus le contact devient partiel dans la théorie de Persson (fig. 9 de Persson (2006)).

Persson donne alors une expression de l'aire réelle de contact S par rapport à l'aire apparente du contact S_0 en fonction du grossissement (Persson, 2006) :

$$\frac{S(\zeta)}{S_0} = \operatorname{erf}\left(\frac{P_a}{2\sqrt{G(\zeta)}}\right) \tag{1.10}$$

avec

$$G(\zeta) = \frac{\pi}{4}\left(\frac{E}{1-\nu^2}\right)^2 \int_{q_0}^{\zeta q_0} q^3 C(q)\,\mathrm{d}q \tag{1.11}$$

Dans les deux équations ci-dessus, P_a représente la pression d'assise appliquée au contact, E est le module de Young, ν le coefficient de Poisson, q est le vecteur d'onde, q_0 représente le plus petit vecteur d'onde de la surface (c'est-à-dire à la plus grande longueur d'onde). Enfin, $C(q)$ représente le spectre de densité de puissance de la surface. Il est donc « aisé », à partir de la connaissance de la densité spectrale de puissance d'une surface de déterminer l'aire de contact réelle à un grossissement souhaité.

La figure 1.3 montre l'évolution de l'aire de contact relative obtenue par Persson pour un certaine surface rugueuse (les paramètres utilisés sont présentés dans Persson (2006)). À faible charge et faible aire relative de contact, la variation de l'aire relative de contact avec l'effort est linéaire, ce qui est un résultat semblable à celui de Greenwood et Williamson (1966). Proche du contact complet, ce comportement n'est plus linéaire. D'autre part, plus le grossissement est important, plus l'aire de contact réelle diminue et tendra vers une valeur nulle s'il n'existe pas de valeur limite au grossissement (Persson, 2006)

Persson note que sa théorie tient compte des interactions élastiques entre les aspérités (approximativement) et est valable pour tous les grossissements (approximativement) (Persson, 2006). L'approche employée par Persson a été étendue, entre autres, au cas d'un contact élasto-plastique parfait (Persson, 2001a) et en présence d'adhésion (Persson, 2006).

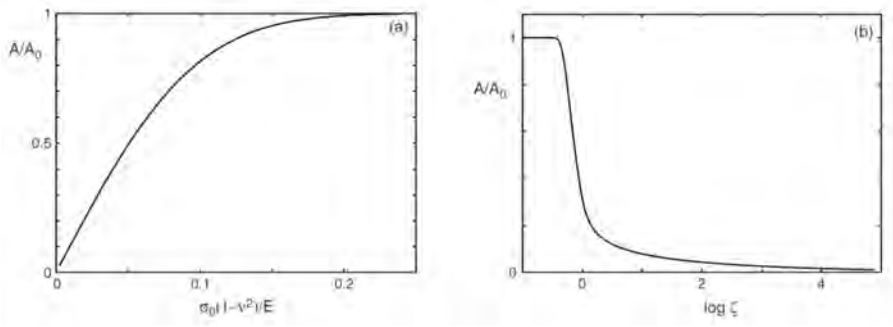


FIGURE 1.3 – Évolution de l'aire de contact relative obtenue par PERSSON (voir Persson (2006) pour les paramètres utilisés). La figure de gauche (a) présente l'évolution en fonction de la charge (au grossissement maximal) tandis que celle de droite (b) présente l'évolution en fonction du grossissement pour une charge donnée (fig. 10 de Persson (2006)).

1.1.3 Les modèles de contact déterministes

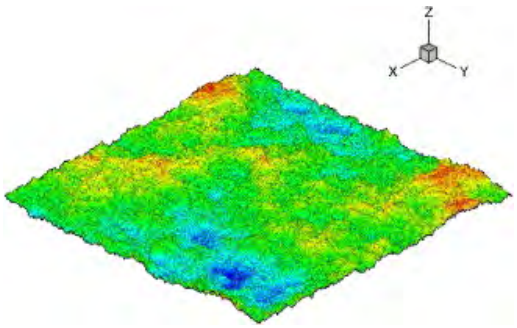
Les modèles de contact stochastiques présentés dans la section précédente permettent de déterminer l'évolution d'une grandeur globale du contact avec la charge appliquée. Il s'agit généralement de l'aire réelle de contact entre deux surfaces, et de son évolution en fonction des grandeurs statistiques qui caractérisent les surfaces rugueuses. Ces approches font intervenir des hypothèses qui peuvent se montrer restrictives comme la manière de modéliser les surfaces rugueuses ou la négligence des interactions entre les aspérités en contact. Par construction, ces modèles ne permettent pas de déterminer des grandeurs locales telles que la déformation des surfaces, la pression de contact ou l'ouverture, ce qui est d'importance lorsque l'on s'intéresse à l'étanchéité d'un contact.

L'usage de méthodes déterministes permet d'avoir accès aux grandeurs locales du contact (pression de contact, déformations, contraintes, etc.), de ne pas avoir à faire d'hypothèses supplémentaires sur la géométrie des surfaces en contact mais également de prendre en compte toutes les interactions entre aspérités (élastiques et plastiques entre autres). Avec l'évolution croissante des performances des moyens de calcul de ces dernières années sont apparues des méthodes numériques permettant la modélisation d'un contact rugueux. Parmi ces méthodes numériques, on retrouve la méthode des éléments finis. Les travaux de Megalingam et Mayuram (2012) ont par exemple permis l'étude dans le régime élasto-plastique du contact entre une surface rugueuse gaussienne et un plan lisse et rigide. Les travaux de Pei *et al.* (2005), Sahoo et Ghosh (2007) ou ceux de Durand (2012) traitent quant à eux du contact entre une surface fractale et un plan lisse. L'utilisation de cette méthode est cependant très vite limitée, en raison de la taille du système à résoudre. En effet, la surface rugueuse doit être discrétisée avec une densité de points importante afin de représenter la rugosité aux petites longueurs d'ondes, mais il faut aussi que la longueur d'échantillonnage soit suffisamment grande pour prendre en compte les défauts de grande longueur d'onde, comme l'ondulation. De plus, il est nécessaire de mailler le volume sous-jacent à la surface de contact (voir figure 1.4).

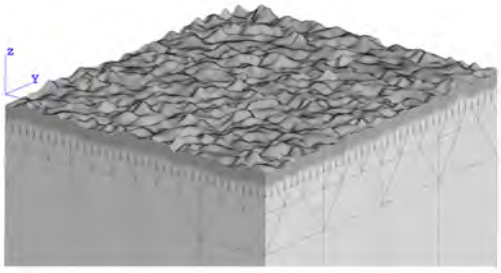
Pour pallier ces inconvénients et diminuer la taille du système à résoudre, des modèles « réduits » ont été développés. Quelques-uns de ces modèles, basés sur des approches analytiques ou encore phénoménologiques, sont présentés dans les sections ci-après.

1.1.3.1 Les modèles élastiques

Dans l'hypothèse où l'épaisseur des corps en contact est grande (hypothèse de massif semi-infini), les équations de l'élasticité linéaire permettent de mettre en relation le déplacement vertical d'un point de la surface $w(x, y)$ situé aux coordonnées (x, y) en fonction d'une pression de contact $p(\xi, \eta)$ ponctuelle appliquée aux coordonnées (ξ, η). La relation qui lie ces deux grandeurs a été obtenue par BOUSSINESQ et CERRUTI (Boussinesq, 1885),



(a) Surface fractale auto-affine (Pei *et al.*, 2005).



(b) Maillage du solide rugueux. Le maillage est raffiné au niveau du contact sur la surface supérieure (Durand, 2012).

FIGURE 1.4 – Exemples d'une surface rugueuse et du maillage d'un corps tridimensionnel en vue d'une analyse par éléments finis d'un contact.

en utilisant la théorie des potentiels. Lorsque plusieurs contacts ponctuels agissent sur une surface Ω, le déplacement total est obtenu par superposition et s'écrit :

$$w(x,y) = \frac{1-\nu^2}{\pi E} \iint_{\Omega} \frac{p(\xi,\eta)}{\sqrt{(x-\xi)^2+(y-\eta)^2}} \mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta \tag{1.12}$$

Dans l'équation 1.12, E est le module de YOUNG du matériau et ν son coefficient de POISSON. Cette équation présente l'avantage de donner uniquement le champ de déplacement vertical en surface, qui est une grandeur d'intérêt majeur lorsqu'il s'agit d'étudier l'étanchéité d'un contact. Ainsi, le maillage du corps complet n'est plus nécessaire, seul le maillage de sa surface l'est. Cette équation ne prend cependant pas en compte le frottement entre les surfaces à l'interface de contact, ni la plasticité.

Un cas particulier de l'équation 1.12 advient lorsque la pression de contact est uniforme sur Ω et vaut p, on obtient alors :

$$w(x,y) = M(x,y)p \tag{1.13}$$

avec $M(x,y)$ le coefficient d'influence qui relie linéairement le déplacement w en (x,y) à la pression de contact en Ω.

$$M(x,y) = \frac{1-\nu^2}{\pi E} \iint_{\Omega} \frac{\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta}{\sqrt{(x-\xi)^2+(y-\eta)^2}} \tag{1.14}$$

Pour un domaine Ω, rectangulaire de dimensions $(2a, 2b)$, les travaux de LOVE (Love, 1929) permettent de donner l'expression analytique du coefficient d'influence.

$$\begin{aligned} M(x,y) = \frac{1-\nu^2}{\pi E} \Bigg\{ & (x+a)\ln\left(\frac{y+b+\sqrt{(y+b)^2+(x+a)^2}}{y-b+\sqrt{(y-b)^2+(x+a)^2}}\right) \\ & + (x-a)\ln\left(\frac{y-b+\sqrt{(y-b)^2+(x-a)^2}}{y+b+\sqrt{(y+b)^2+(x-a)^2}}\right) \\ & + (y+b)\ln\left(\frac{x+a+\sqrt{(y+b)^2+(x+a)^2}}{x-a+\sqrt{(y+b)^2+(x-a)^2}}\right) \\ & + (y-b)\ln\left(\frac{x-a+\sqrt{(y-b)^2+(x-a)^2}}{x+a+\sqrt{(y-b)^2+(x+a)^2}}\right) \Bigg\} \end{aligned} \tag{1.15}$$

Dans le cas d'un contact multi-aspérités où les pentes des surfaces sont faibles et où l'aire réelle de contact reste faible devant l'aire apparente, l'hypothèse de massif semi-infini reste valide (Mayeur, 1995). Pour la résolution numérique du problème, le domaine

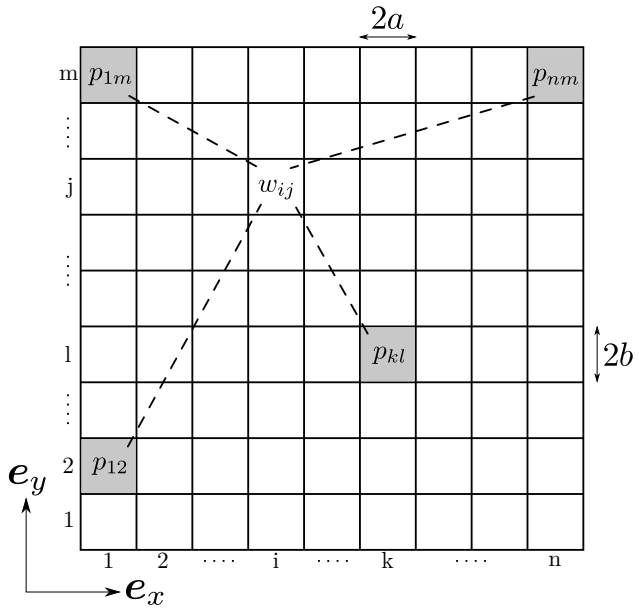


FIGURE 1.5 – Vue de dessus d'une grille de discrétisation du contact, avec quatre éléments en contact (c'est-à-dire ayant une pression de contact non-nulle ; en gris).

complet est discrétisé en (n, m) éléments de largeur $(2a, 2b)$ comme présenté sur la figure 1.5. Si la taille des éléments est suffisamment petite, la pression peut y être considérée comme constante (Bhushan, 1998). Le déplacement total sur l'élément d'indices (i, j) dû au champ de pression est déterminé par superposition de l'influence de tous les efforts (Zahouani *et al.*, 2009), et s'écrit :

$$w_{ij} = \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{m} M_{ijkl} p_{kl} \tag{1.16}$$

Si l'on définit δ comme étant le déplacement de corps rigide (rapprochement des surfaces), $h(x, y)$ la distance locale entre les deux surfaces en contact avant déformation et Ω_c les zones où les deux surfaces sont en contact, on peut écrire (Johnson, 1987) :

$$w(x, y) + h(x, y) - \delta \begin{cases} = 0 & \text{si } (x, y) \in \Omega_c \\ > 0 & \text{si } (x, y) \notin \Omega_c \end{cases} \tag{1.17}$$

D'après Johnson (1987), le problème est alors de déterminer un champ de pressions de contact (ou dit de manière équivalente, un ensemble de zones de contact), qui satisfasse au mieux les conditions limites, en imposant un déplacement δ. Le problème de contact est alors décrit par le système d'équations suivant :

$$w_{ij} = \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{m} M_{ijkl} p_{kl} \tag{1.18a}$$

$$w_{ij} + h_{ij} - \delta = 0 \qquad \text{si } (i, j) \in \Omega_c \tag{1.18b}$$

$$w_{ij} + h_{ij} - \delta > 0 \qquad \text{si } (i, j) \notin \Omega_c \tag{1.18c}$$

$$p_{ij} > 0 \qquad \text{si } (i, j) \in \Omega_c \tag{1.18d}$$

$$p_{ij} = 0 \qquad \text{si } (i, j) \notin \Omega_c \tag{1.18e}$$

JOHNSON souligne que dans les applications pratiques, le déplacement δ est en général inconnu et c'est un effort qui est prescrit (ici, une pression d'assise P_a). Il faut alors ajouter une équation d'équilibre des pressions au problème qui est la suivante, où S_0 est l'aire nominale de contact :

$$P_a = \frac{1}{S_0} \int_{\mathcal{S}_0} p(x,y)\,\mathrm{d}S \tag{1.19}$$

Ainsi, lorsqu'une pression d'assise P_a est spécifiée, le problème (1.18) se réécrit de la manière suivante pour un maillage rectangulaire uniforme (Polonsky et Keer, 1999) :

$$w_{ij} = \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{m} M_{ijkl} p_{kl} \tag{1.20a}$$

$$\frac{1}{nm}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} p_{ij} = P_a \tag{1.20b}$$

$$w_{ij} + h_{ij} - \delta = 0 \qquad \text{si } (i,j) \in \Omega_c \tag{1.20c}$$

$$w_{ij} + h_{ij} - \delta > 0 \qquad \text{si } (i,j) \notin \Omega_c \tag{1.20d}$$

$$p_{ij} > 0 \qquad \text{si } (i,j) \in \Omega_c \tag{1.20e}$$

$$p_{ij} = 0 \qquad \text{si } (i,j) \notin \Omega_c \tag{1.20f}$$

Deux méthodes de résolution de ce type de problème sont présentées dans Johnson (1987). La première, appelée méthode d'inversion matricielle, est basée sur la résolution itérative du système et peut se résumer selon la procédure suivante (présentée ici pour le problème (1.18) en imposant un déplacement, il en serait cependant de même pour une pression imposée) :

1. On impose un déplacement de corps rigide δ.
2. Une première estimation doit être faite pour $w(x,y)$. La valeur de l'interpénétration des surfaces donne selon Johnson (1987) un bon point de départ.
3. La pression $p(x,y)$ est ensuite résolue directement, par inversion du système.
4. S'il existe, suite à la résolution, des endroits où les pressions de contact sont négatives (cela implique la présence de contrainte de traction entre les surfaces, ce qui n'est pas permis), ces endroits sont retirés de la zone de contact présumée pour l'itération suivante et la pression de contact y est alors mise à zéro.
5. On recommence le processus à partir de l'étape 2 en actualisant les données du problème, jusqu'à ce qu'aucune pression de contact ne soit négative. La convergence est alors atteinte.

L'aire réelle de contact est alors celle où la pression de contact est positive. L'effort peut être déterminé en conséquence.

La seconde méthode de résolution, appelée méthode variationnelle, permet de trouver la solution qui minimise une certaine fonction d'énergie. Cette méthode permet généralement de mettre en œuvre un problème d'optimisation quadratique (Tian et Bhushan, 1996), qui peut être résolu itérativement avec l'algorithme du gradient conjugué par exemple (Polonsky et Keer, 1999). Le problème d'optimisation en imposant le déplacement est le suivant (en utilisant la convention de sommation d'Einstein) :

$$\begin{cases} \inf \dfrac{1}{2} p_{ji} M_{ijkl} p_{kl} + (h_{ij} - \delta) p_{ij} \\ p_{ij} \geqslant 0,\ i = 1,\dots,n,\ j = 1,\dots,m \end{cases} \tag{1.21}$$

Lorsque la taille du système devient importante, la matrice d'influence peut être grande et devenir mal conditionnée, son inversion directe peut alors poser des problèmes de non-convergence. Bhushan (1998) souligne alors qu'il est préférable dans ce cas d'utiliser la méthode de variationnelle plutôt que la méthode d'inversion présentée au paragraphe précédent.

Si N désigne le nombre total de points de la surface, le calcul des déplacements de tous les nœuds du problème à l'aide de l'équation (1.16) engendre un nombre d'opérations de l'ordre de $\mathcal{O}\left(N^2\right)$, ce qui représente un coût important lorsque le nombre de points devient grand. Cependant, l'équation discrète (1.16) et son équation équivalente (1.12) dans le domaine continu correspondent à un produit de convolution. L'utilisation de la transformée de Fourier permet alors de transformer ce produit de convolution en une simple multiplication dans le domaine fréquentiel (Polonsky et Keer, 1999). La résolution numérique du problème en utilisant la transformée de Fourier rapide (FFT) permet alors de ramener le nombre total d'opérations nécessaires de l'ordre de $\mathcal{O}\left(N\ln(N)\right)$, ce qui est bien plus commode pour des systèmes de grande taille. Cela nécessite toutefois de considérer le domaine comme périodique.

La méthode élastique présentée jusqu'ici est basée sur l'hypothèse d'un contact avec un massif semi-infini. Cependant, lorsque l'aire réelle de contact est proche de l'aire apparente, l'hypothèse de massif semi-infini n'est alors plus valable (Johnson, 1987). Il faut alors modifier le coefficient d'influence de l'équation (1.14), voire l'équation (1.12) elle-même pour tenir compte de l'épaisseur finie du massif. Bentall et Johnson (1968) ont donné l'expression de la relation liant pression et déplacement en déformations planes pour un massif d'épaisseur finie H :

$$w(x) = \frac{4}{\pi}\frac{1-\nu^2}{E}\int_0^{+\infty}\frac{\cosh(2H\xi)-1}{\sinh(2H\xi)+2H\xi}\frac{\cos(x\xi)}{\xi}\widehat{p}(\xi)\,\mathrm{d}\xi \tag{1.22}$$

où $\widehat{p}(\xi)$ est la transformée de Fourier en cosinus de la distribution de pression $p(x)$ paire telle que :

$$\widehat{p}(\xi) = \int_0^{+\infty} p(x)\cos(x\xi)\,\mathrm{d}x \tag{1.23}$$

Par exemple, pour une pression p uniformément distribuée sur l'intervalle $[-a;a]$, on obtient :

$$\widehat{p}(\xi) = \frac{p}{\xi}\sin(a\xi) \tag{1.24}$$

Cela permet donc de retrouver un déplacement proportionnel à la pression de contact via un coefficient d'influence M comme $w(x) = M(x)p$. Dans le cas d'une pression uniforme sur $[-a;a]$, le coefficient M s'exprime de la manière ci-dessous. L'évaluation de cette expression pose tout de même une certaine difficulté, et se limite au cas d'un matériau élastique.

$$M(x) = \frac{4}{\pi}\frac{1-\nu^2}{E}\int_0^{+\infty}\frac{\cosh(2H\xi)-1}{\sinh(2H\xi)+2H\xi}\frac{\cos(x\xi)\sin(a\xi)}{\xi^2}\,\mathrm{d}\xi \tag{1.25}$$

1.1.3.2 Les modèles élasto-plastiques

L'obtention de l'étanchéité d'un assemblage par la mise en contact de deux surfaces rugueuses nécessite généralement des efforts importants. Lorsque des matériaux métalliques sont utilisés, le contact ne reste pas purement élastique et de la déformation plastique apparaît. Il est alors nécessaire de tenir compte de la plastification et de ses effets sur le déplacement de la surface dans le modèle de contact rugueux.

En utilisant le théorème de réciprocité, Jacq *et al.* (2002) ont développé un modèle de contact élasto-plastique semi-analytique utilisant une relation entre le déplacement vertical de la surface, la pression de contact et la déformation plastique. Ce modèle se place dans l'hypothèse d'un massif semi-infini, en petites déformations et pour un matériau à

écrouissage isotrope suivant le critère de plasticité de Von-Mises. La loi de comportement du matériau reste cependant une donnée d'entrée du problème, permettant au modèle de rester général. En raison de la présence de déformation plastique, il y aura une déformation permanente de la surface de contact, cela a pour conséquence l'introduction d'une nouvelle composante de déplacement permanent plastique de la surface dans l'expression de l'ouverture qui s'écrit donc :

$$w^e(x,y) + w^p(x,y) + h(x,y) - \delta \begin{cases} = 0 & \text{si } (x,y) \in \Omega_c \\ > 0 & \text{si } (x,y) \notin \Omega_c \end{cases} \tag{1.26}$$

Dans l'expression (1.26), $h(x,y)$ est l'ouverture entre les deux surfaces avant déformation, δ est le déplacement vertical de corps rigide, $w^e(x,y)$ est le déplacement vertical élastique de la surface, $w^p(x,y)$ est le déplacement vertical permanent de la surface et Ω_c désigne l'ensemble des zones de contact. Selon Jacq *et al.* (2002), le déplacement permanent est lié à la déformation plastique. Pour le déterminer, le domaine plastique sous la surface de contact est divisé en plusieurs petits cubes dans lesquels la déformation plastique est considérée constante. En supposant que la déformation plastique dans chaque cube apporte une certaine déformation en surface, le déplacement permanent est alors déterminé en effectuant la somme des contributions de chaque cube. Le déplacement permanent w^p est alors lié via un coefficient d'influence D (dont l'expression est donnée dans Jacq *et al.* (2002)) à la déformation plastique ε^p.

$$w^p_{ij} = \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{m} D_{ijkl} \varepsilon^p_{kl} \tag{1.27}$$

Outre l'évolution élasto-plastique du déplacement total de la surface de contact au cours du chargement, le déplacement permanent de la surface permet également de déterminer l'ouverture du contact lors de la décharge.

La structure de l'algorithme utilisé pour ce modèle de contact élasto-plastique semi-analytique incrémental est résumée ci-dessous, plus de détails sont donnés par les figures 4 et 5 de Jacq *et al.* (2002).

1. On dispose d'un jeu de paramètres initiaux que sont la charge totale, la géométrie initiale, la déformation plastique existante et son déplacement permanent associé, le champ de pression de contact et les paramètres d'écrouissage du matériau.
2. Le problème de contact élastique est résolu en prenant en compte l'incrément de chargement appliqué et les paramètres initiaux.
3. L'incrément de déformation plastique est ensuite calculé.
4. Le calcul se poursuit par la détermination de l'incrément de déplacement permanent à partir de l'incrément de déformation plastique jusqu'à convergence. Si la convergence n'est pas atteinte, le calcul élastique est réeffectué en actualisant l'incrément de déplacement permanent.
5. Une fois que la valeur de l'incrément de déplacement permanent a convergé, la charge, le champ de pression de contact, les déformations plastiques, les déplacements résiduels ainsi que les paramètres d'écrouissage sont actualisés en leur ajoutant la valeur de leurs incréments respectifs. Ces nouvelles valeurs servent de condition initiale pour l'étape de chargement suivante.

Comme la déformation plastique doit être calculée avec ce modèle de contact semi-analytique, le volume sous-jacent au contact doit être maillé dans les zones plastifiées. De plus, le nombre d'itérations permettant de résoudre le problème complet est plus important que dans le cas élastique car, en plus de la résolution élastique, un second processus itératif est requis pour déterminer les contraintes et les déformations plastiques dans une partie du massif. Les temps de calculs s'en trouvent alors augmentés par rapport au modèle de contact purement élastique, tout en étant plus faible qu'avec un code de calcul par éléments

finis. D'autres modèles à la philosophie similaire tels que ceux de Wang *et al.* (2010a,b) mettent en œuvre des schémas numériques différents pour la résolution des contraintes et des déformations plastiques.

Une modèle de contact élasto-plastique parfait simplifié est utilisé par Vallet (Vallet, 2008; Vallet *et al.*, 2009) dans le cas de surfaces fractales. Le critère de plasticité n'est plus appliqué sur les contraintes mais directement sur les pressions de contact, cela permet de ne discrétiser que la surface du massif. Dans ce cas, la pression de contact est supposée bornée par une pression maximale égale à la dureté $\mathcal{H}$ du matériau le plus mou. Cela vient donc ajouter une inégalité supplémentaire au problème (1.20) qui peut alors se réécrire de la façon ci-dessous. Les mêmes méthodes de résolution que celles présentées précédemment peuvent être employées.

$$w_{ij} = \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{m} M_{ijkl} p_{kl} \tag{1.28a}$$

$$\frac{1}{nm}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} p_{ij} = P_a \tag{1.28b}$$

$$w_{ij} + h_{ij} - \delta = 0 \qquad \text{si } (i,j) \in \Omega_c \tag{1.28c}$$

$$w_{ij} + h_{ij} - \delta > 0 \qquad \text{si } (i,j) \notin \Omega_c \tag{1.28d}$$

$$0 < p_{ij} \leqslant \mathcal{H} \qquad \text{si } (i,j) \in \Omega_c \tag{1.28e}$$

$$p_{ij} = 0 \qquad \text{si } (i,j) \notin \Omega_c \tag{1.28f}$$

Un modèle similaire bornant la pression de contact par la dureté est également appliqué par Sahlin (Sahlin, 2008) pour l'étude d'un contact rugueux. Ce modèle introduit un déplacement permanent de la surface, visible sur la figure 1.6.

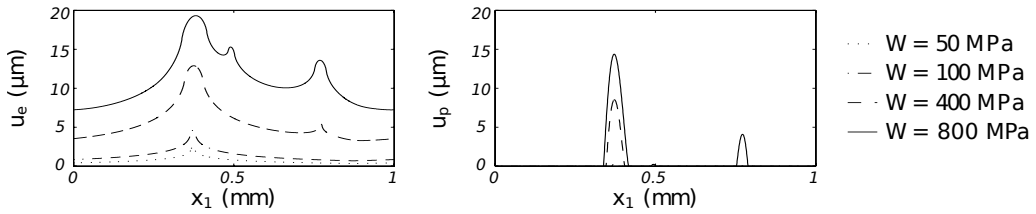


Figure 1.6 – Composante élastique (à gauche) et plastique (à droite) du déplacement de la surface pour différentes charges le long d'un contact (portion de la figure E.4 de Sahlin (2008)). Le déplacement plastique permanent augmente avec la charge.

Pour modéliser le contact élasto-plastique entre un plan lisse rigide et une surface rugueuse, Durand (Durand, 2012) a employé une approche phénoménologique. Ce modèle phénoménologique, appelé « modèle réduit », est basé sur la représentation de la surface rugueuse par une multitude d'aspérités de formes sinusoïdales et permet de réduire considérablement le temps de calcul. Afin de prendre en compte les interactions élasto-plastiques entre aspérités (comportement généralement non-linéaire et complexe) au cours de l'écrasement, Durand a étudié l'écrasement d'une aspérité sinusoïdale isolée et a décrit le déplacement vertical de la surface au voisinage de cette dernière par un ajustement avec une relation du type suivant :

$$w(r) = a w_0 \sqrt{\frac{2r}{L}} \exp\left(-\frac{2br}{L}\right) \tag{1.29}$$

avec L le diamètre de l'aspérité à la base, w_0 le déplacement vertical au sommet de l'aspérité et r la distance horizontale au centre de l'aspérité. Cette relation fait également intervenir deux paramètres d'ajustement a et b, que Durand considère comme constants quelle que soit la géométrie de l'aspérité. Cette expression (1.29) ne prend cependant

pas en compte la présence d'un bourrelet de matière proche de la zone de contact et ne considère pas le déplacement horizontal de la matière. Une fois ceci acquis, le modèle réduit de contact développé par Durand procède de la manière suivante :

1. Localisation et caractérisation des aspérités sinusoïdales représentant la surface rugueuse.
2. Déplacement vertical progressif du plan lisse et rigide.
3. Lorsqu'une aspérité est détectée comme étant en contact (présence d'interférence entre l'aspérité et le plan), la loi d'interaction entre aspérités (1.29) est appliquée pour chacune des aspérités en contact. L'influence de chaque aspérité est supposée additive.
4. L'effort normal, l'aire réelle de contact et le champ des ouvertures peuvent être déterminés.

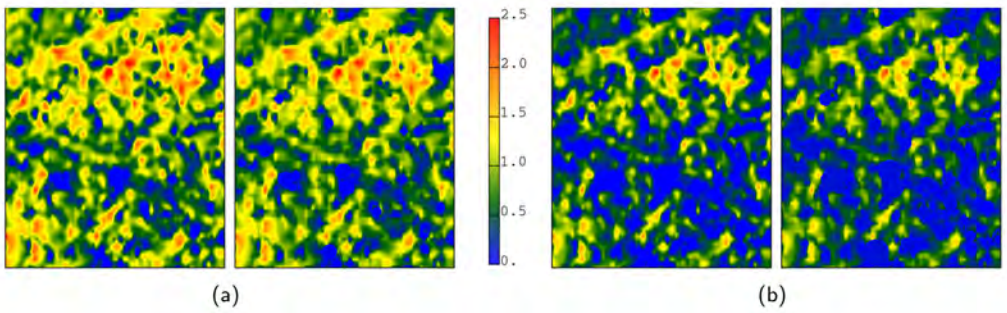


Figure 1.7 – Comparaison du champ des ouvertures entre un calcul par éléments finis (à gauche) et le modèle réduit (à droite) pour deux valeurs de déplacement imposé (0,89 µm en (a) et 1,35 µm en (b)). Les zones bleues sont les zones de contact (fig. 4.12 de Durand (2012)).

Ce modèle réduit a été testé sur plusieurs surfaces rugueuses et comparé avec d'autres résultats obtenus par éléments finis. La figure 1.7 montre par exemple le champ des ouvertures obtenu pour deux écrasements distincts. Il s'avère que le modèle réduit fournit des résultats en très bon accord avec les simulations par éléments finis, tant en termes de réponses globales que de topologies locales, tout en offrant un temps de calcul fortement réduit. On peut néanmoins soulever la question de la représentation d'une surface rugueuse quelconque par un type d'aspérités donné.

Les modèles de contact présentés dans cette section s'intéressent majoritairement à la déformation des aspérités rugueuses par un plan lisse, ce qui est l'exact opposé de ce qui sera abordé dans ce travail. En effet, l'étude du bouchage des aspérités est dans notre cas celle d'une surface rugueuse rigide déformant un plan lisse et ductile, situation se rapprochant le plus du cas réel d'un contact entre une bride (généralement usinée en acier) et d'un joint d'étanchéité (fait d'un métal ductile plus mou). D'autre part, nos travaux s'intéressent au cas de surfaces à la géométrie anisotrope ce qui n'est pas le cas de ceux présentés dans cette section. Bien que cet aspect ne revêt aucune importance pour les modèles « complets » (de type élastique, élasto-plastique, etc.), cela est crucial pour un modèle réduit basé sur une approche phénoménologique car la loi phénoménologique de déformation est justement déterminée à partir de cas de référence pour un type de surface donné. L'aspect temps de calcul proposé par ces modèles est également d'une grande importance lorsqu'il s'agit de déterminer l'ouverture sur des surfaces de grandes dimensions à des échelles de détails très fines. En ce sens, les modèles réduits apparaîssent plus compétitifs.

1.2 Approches expérimentales de l'étanchéité

L'approche expérimentale a été employée par bon nombre d'auteurs afin de caractériser la performance en étanchéité d'un contact rugueux et d'en donner une loi d'évolution phénoménologique. Après avoir présenté quelques résultats de mécanique du contact des surfaces rugueuses dans la section 1.1, il est bien de pouvoir en appréhender leur comportement réel en étanchéité. C'est alors le but de cette section qui présente quelques travaux menés au cours de ces dernières années, qui se placent dans le cadre plus spécifique de l'étanchéité d'assemblages par des joints métalliques.

1.2.1 Les travaux de Marie

Durant sa thèse s'insérant dans le cadre d'un Groupement De Recherche [1], Marie a développé un montage expérimental destiné à la mesure du débit de fuite au travers de deux surfaces en contact (Marie, 2002). Ce montage utilise la technique de chromatographie en phase gazeuse permettant de mesurer des débits de fuite liquides et gazeux au travers d'un contact. Cependant, seules les mesures de débits liquides ont été effectuées. À l'aide de ce montage, Marie a étudié la fuite monophasique de butanol pour un contact entre un plan en saphir rigide et différentes surfaces modèles obtenues par un procédé de tournage. Ces surfaces métalliques usinées, faites d'acier inoxydable 316L, sont réparties en deux familles selon la valeur de leur rugosité arithmétique R_a :

— La famille A, ayant une rugosité arithmétique de 0,5 µm (noté $R_a0{,}5$).
— La famille B, ayant une rugosité arithmétique de 1,1 µm (noté $R_a1{,}1$).

Lors de ses expériences, Marie a joué sur la variation de deux paramètres du montage que sont la pression d'assise appliquée (rapport de l'effort vertical de serrage par la section nominale de contact) et la différence de pression du fluide de part et d'autre du contact. Ses observations montrent, dans chaque cas traité, une proportionnalité entre la masse de butanol passant au travers du contact et le temps, signe d'un débit de fuite constant. Il note également l'absence de régime transitoire visible, justifiant le caractère monophasique de la fuite. En traçant le débit mesuré en fonction de la différence de pression, il observe également une proportionnalité entre ces grandeurs.

À partir du modèle de Reynolds exprimant le débit liquide dans une fracture mince d'ouverture constante, Marie exprime une relation entre le débit et la différence de pression de fluide pour une géométrie de contact annulaire. Cette relation doit permettre d'identifier le coefficient de proportionnalité entre le débit et la différence de pression observé expérimentalement.

$$\frac{Q}{2\pi} = \frac{K}{\mu} \frac{\Delta p}{\ln\left(\frac{r_e}{r_i}\right)} \tag{1.30}$$

Dans cette relation, Q désigne le débit volumique de fuite, Δp est la différence de pression de part et d'autre du contact, μ est la viscosité dynamique du fluide, r_i et r_e sont respectivement les rayons interne et externe du contact annulaire et K qualifie la transmissivité du contact. Lorsque la largeur de contact est faible devant le rayon interne (lorsque $r_e - r_i \ll r_i$), un développement au premier ordre de l'équation (1.30) permet d'obtenir une expression analogue à une loi de Darcy dans un milieu poreux bidimensionnel.

$$\frac{Q}{2\pi r_i} = \frac{K}{\mu} \frac{\Delta p}{r_e - r_i} \tag{1.31}$$

Pour une géométrie de contact et un fluide donné, la transmissivité K du contact est alors déduite des résultats expérimentaux (pour un serrage donné). Cette transmissivité est liée au coefficient de proportionnalité observé expérimentalement entre le débit et la

1. GDR 2345 : « Étanchéité statique par joints métalliques sous conditions extrêmes ».

différence de pression. Elle est, de plus, intrinsèque au champ des ouvertures à l'interface de contact (Marie et Lasseux, 2007). L'évolution de la transmissivité obtenue pour chacune des trois éprouvettes testées en fonction de la pression d'assise est présentée sur la figure 1.8.

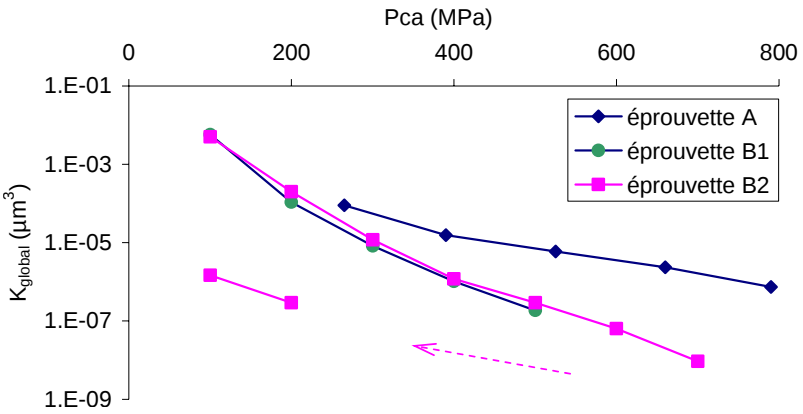


FIGURE 1.8 – Résultats expérimentaux donnant la transmissivité du contact en fonction de la pression d'assise pour trois éprouvettes (fig. 3.12 de Marie (2002)). La flèche indique des mesures faites lors de la décharge du contact.

MARIE souligne la très forte variation de la transmissivité avec la pression d'assise. La figure 1.8 montre en effet des variations pouvant atteindre six ordres de grandeur. Sur la plage de mesures réalisée, MARIE propose alors une loi d'évolution de la transmissivité en fonction de la pression d'assise par une relation de type puissance, et ce pour les deux familles de surfaces explorées.

$$K \propto {P_a}^{-\omega} \tag{1.32}$$

Les travaux réalisés par MARIE ont également permis de mettre en évidence l'existence d'un flux diffusif à l'interface de contact, dû à la différence de concentration des espèces de part et d'autre du contact. Il note néanmoins que ce débit diffusif agit dans des proportions moindres par rapport au débit visqueux présenté dans les paragraphes précédents (Marie et Lasseux, 2007).

1.2.2 Les travaux de Vallet

Les travaux de thèse de VALLET (Vallet, 2008) se situent dans la continuité de ceux de MARIE. Les mesures expérimentales de débits de fuite sont déterminées en utilisant le même dispositif que dans Marie (2002), cependant, les surfaces métalliques placées en contact avec le saphir ne sont plus de même nature. En effet, VALLET s'est intéressé à des éprouvettes de robinetterie nucléaire en acier de construction, rodées afin d'obtenir une rugosité arithmétique de R_a0,4. Ces surfaces ont alors une apparence plutôt isotrope, en comparaison avec les surfaces anisotropes de MARIE, obtenues par tournage (Marie, 2002). Un traitement de surface ou un revêtement ont été appliqués sur les éprouvettes afin d'obtenir une dureté identique pour chacune d'entre elles :

— Éprouvettes 1 et 2, faites d'acier inoxydable 42CD4 et traitées par cémentation.
— Éprouvette 3, faite d'acier inoxydable Z2CND18-12 et revêtue de Stellite.

Les résultats expérimentaux obtenus par VALLET montrent, comme dans le cas de MARIE, une proportionnalité entre le débit de fuite et la différence de pression. Ces résultats sont présentés en termes de transmissivité sur la figure 1.9. VALLET a également étudié le comportement de la fuite lors de la décharge de l'éprouvette, cela se traduit par un effet d'hystérésis visible sur la figure 1.9. Il note que la transmissivité du contact à la décharge est moins importante que lors de la charge, signe selon lui de la déformation plastique de la surface rugueuse.

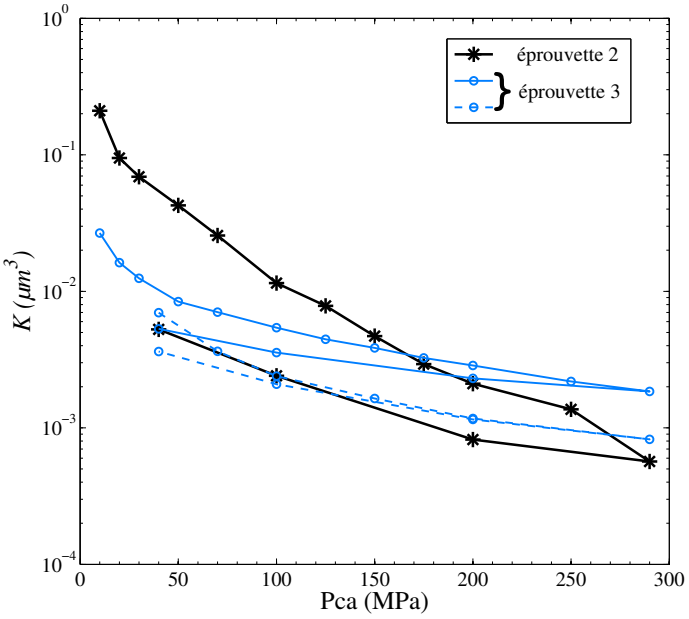


FIGURE 1.9 – Résultats expérimentaux donnant la transmissivité du contact en fonction de la pression d'assise pour deux éprouvettes (fig. 4.13 de Vallet (2008)). La courbe en traits pointillés pour l'éprouvette 3 correspond à l'évolution de la transmissivité du contact pour un second essai (après avoir fait subir un cycle de charge-décharge au contact).

Dans une autre registre, VALLET note que, lors de la charge, l'évolution de la transmissivité des surfaces isotropes en fonction de la pression d'assise semble évoluer de manière plus complexe qu'une loi de type puissance comme évoqué par l'équation (1.32) dans le cas des surfaces tournées (Marie, 2002).

1.2.3 Les travaux de Bourniquel

Dans ses travaux de thèse, BOURNIQUEL (Bourniquel, 2017) s'est intéressé à l'étanchéité en eau de surfaces annulaires présentant un défaut d'ondulation circonférentielle important. Pour cela, des surfaces modèles à défaut d'ondulation contrôlé sont fabriquées en acier 316L revêtu de matériau NOREM en plaçant la pièce à usiner dans un mandrin à trois mors. La variation de l'effort de serrage des mors permet de déformer élastiquement la surface, qui est ensuite dressée et rodée. Lors du desserrage des mors, le retour élastique permet d'obtenir une surface rugueuse rodée avec un défaut d'ondulation circonférentielle ayant trois lobes. Trois éprouvettes sont ainsi usinées, avec une amplitude crête-à-crête du défaut d'ondulation allant de 30 µm à 50 µm. De plus, l'une de ces surfaces n'a pas été rodée et possède donc un aspect strié en plus du défaut d'ondulation.

Des mesures expérimentales de fuite en eau sont ensuite réalisées sur ces éprouvettes. Après mise en contact de la surface avec un plan en saphir rigide, un débit de fuite est imposé au travers du contact par le dispositif expérimental, fonctionnant par un système de pompe à pistons. L'effet de fond est également compensé. La mesure des pressions interne et externe au contact générées par ce débit imposé permet alors d'en déduire la transmissivité du contact. L'évolution de cette transmissivité en fonction de la pression de serrage imposée est présentée en figure 1.10. Là encore, une variation de type loi puissance est observable. Les trois éprouvettes à l'amplitude différente présentent un comportement bien distinct, avec une transmissivité plus importante à amplitude de défaut plus grande. En revanche, BOURNIQUEL n'observe pas d'effet sur la transmissivité lors de la décharge du contact, ni d'effet d'hystérésis, contrairement aux travaux de Vallet (2008). Ceci est potentiellement dû au fait que le contact reste majoritairement élastique compte tenu des charges modérées appliquées (ne dépassant pas 40 MPa), à la différence de Vallet (2008).

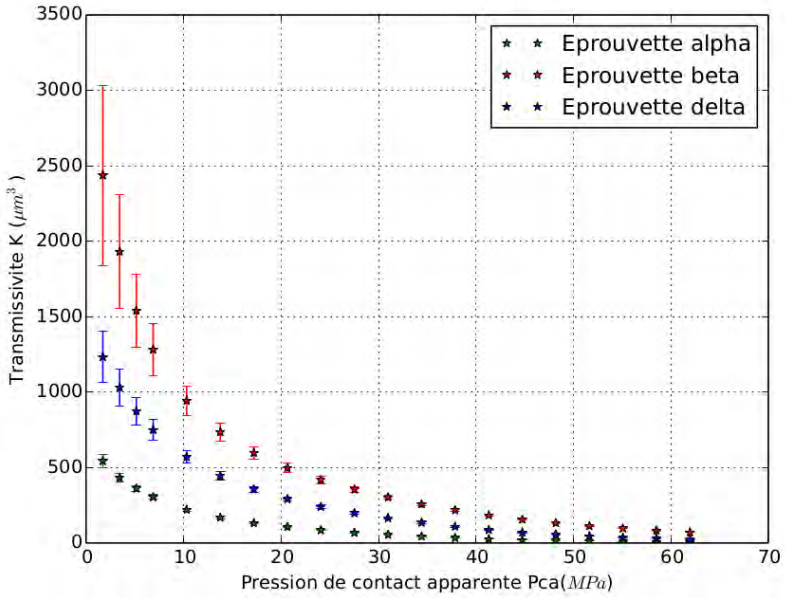


FIGURE 1.10 – Résultats expérimentaux donnant la transmissivité en fonction de la pression d'assise pour trois éprouvettes (fig. 2.25 de Bourniquel (2017)).

1.2.4 Les travaux de Tlili

Dans le cadre de ses travaux de thèse, TLILI a mis au point un montage expérimental destiné à la mesure de taux de fuite en hélium gazeux au travers de deux surfaces en contact (Tlili, 2013). Dans cette manipulation, il s'agit de mettre en contact une portée annulaire obtenue par tournage avec une pastille faite d'un matériau utilisé pour le revêtement des joints d'étanchéité employés par l'industrie (ici, de l'aluminium 1050). Deux portées annulaires aux rugosités arithmétiques contrôlées ont été étudiées par TLILI :

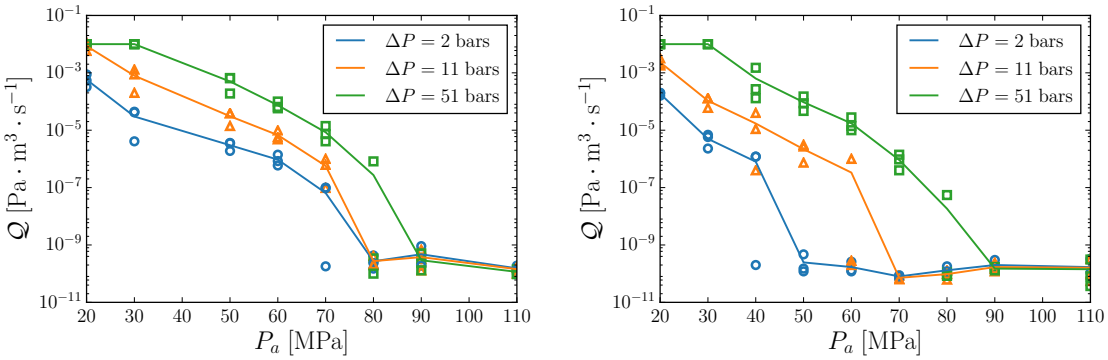
— Une portée en acier, de rugosité arithmétique R_a1,6.
— Une portée en acier, de rugosité arithmétique R_a0,4.

Pour l'interprétation de ses résultats expérimentaux, TLILI considère de plus la portée rugueuse en acier comme bien plus rigide que la pastille, considérée quant à elle comme lisse et ductile. Une fois ces surfaces mises en contact sous une certaine pression d'assise, de l'hélium sous pression est envoyé à l'intérieur du montage. Le débit de fuite au travers du contact est alors mesuré directement par spectroscopie de masse, l'extérieur étant sous vide.

Les résultats expérimentaux de TLILI sont présentés en figure 1.11, qui donnent le taux de fuite du contact en fonction de la pression d'assise pour trois différences de pressions en hélium. Il est à noter que sur ces courbes, les taux de fuite [2] mesurés ne sont jamais inférieurs à 10^{-10} Pa $\cdot$ m^3 $\cdot$ s^{-1}, valeur qui correspond au seuil de détection du spectromètre de masse utilisé (signal résiduel).

De ces résultats, TLILI fait plusieurs observations. Tout d'abord, il remarque que dans la gamme de pressions d'assises parcourue, le taux de fuite varie très fortement, jusqu'à huit ordres de grandeur, et ce quelle que soit la différence de pression d'hélium. D'autre part, il constate qu'en fonction de la différence de pression, l'atteinte de l'étanchéité se fait pour des pressions d'assises groupées pour la portée de rugosité R_a1,6 (autour de 80 MPa pour les différences de pression de 2 bar et 11 bar, et de 90 MPa pour la différence de pression de 51 bar). Pour la portée de rugosité R_a0,4, il note au contraire que l'atteinte de l'étanchéité s'établit pour des pressions d'assises plus dispersées (autour de 50 MPa, 70 MPa et 90 MPa pour les différences de pressions respectives de 2 bar, 11 bar et 51 bar).

2. Grandeur donnant la quantité de gaz s'écoulant par unité de temps. Elle correspond à la variation temporelle du produit de la pression et du volume. Il s'agit alors d'un flux énergétique, homogène à une puissance, et d'unité S.I. légale le Pa $\cdot$ m^3 $\cdot$ s^{-1}.



(a) Portée de rugosité R_a1,6.

(b) Portée de rugosité R_a0,4.

FIGURE 1.11 – Débits de fuite expérimentaux en fonction de la pression d'assise pour des pastilles en aluminium 1050 (d'après Tlili (2013)). Les points sont les mesures expérimentales, les courbes en traits pleins représentent la moyenne géométrique de ces mesures.

1.2.5 Les travaux mixtes portant sur le contact mécanique et la fuite

NITTA et MATSUZAKI (Nitta et Matsuzaki, 2010) ont étudié la fuite en diazote par chromatographie en phase gazeuse sur un assemblage constitué d'une bride en acier obtenue par tournage et de forte rugosité avec un joint métallique en cuivre. Les résultats obtenus présentés sur la figure 1.12 montrent (pour un joint de 5 mm de largeur de portée) une réduction rapide de la fuite avant 50 MPa. Au-delà, cette vitesse de réduction est plus faible. La même tendance est observable pour des joints moins larges, avec des valeurs de pressions différentes cependant.

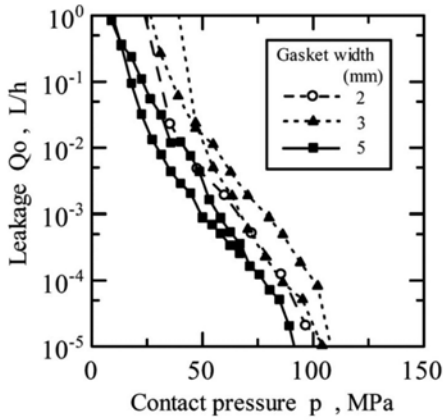


FIGURE 1.12 – Débits de fuite expérimentaux en fonction de la pression d'assise pour des joints en cuivre de différentes largeurs (fig. 4 de Nitta et Matsuzaki (2010)).

D'autre part, la mesure de l'aire réelle de contact a été effectuée pour différentes charges par l'insertion, avant écrasement, d'un film polymère entre le joint et la bride. Le film, d'une épaisseur de 1 µm, est serré pendant une minute afin de laisser les marques du contact s'y établir. Les résultats de cette expérience (deux exemples sont donnés en figure 1.13) montrent qu'à faible charge (ici 12 MPa), le contact n'est pas parfait et qu'il existe des raccourcis radiaux entre les spires. Au contraire, à forte charge (ici 75 MPa), le contact est plus uniforme sur toute la portée, il n'existe plus de raccourcis radiaux et le chemin de fuite est alors la spirale elle-même. NITTA et MATSUZAKI cessent d'observer la présence de raccourcis radiaux pour une pression supérieure à 50 MPa (pour un joint de 5 mm de largeur). Cette valeur de transition est à corréler avec les mesures de fuites expérimentales présentées précédemment. Aucune explication supplémentaire sur le lien entre fuite et ouverture n'est cependant donnée (Nitta et Matsuzaki, 2010).

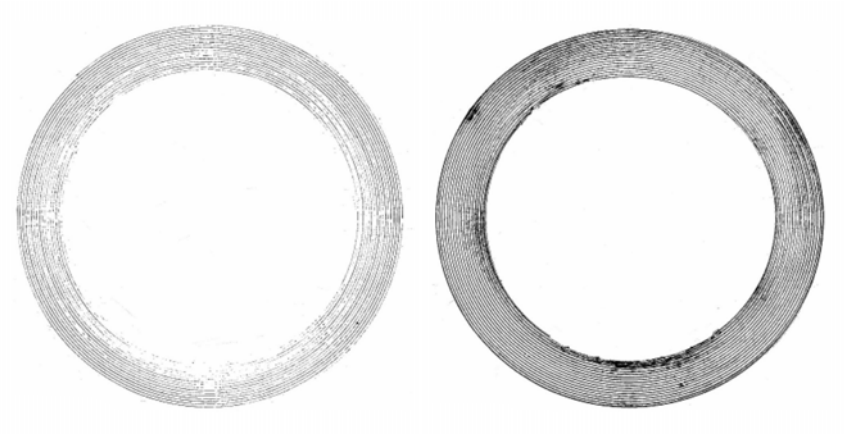


FIGURE 1.13 – Aire de contact (noire) mesurée à l'aide d'un film polymère de 1 µm d'épaisseur sur un joint en cuivre de 5 mm de largeur pour une pression d'assise de 12 MPa (à gauche) et 75 MPa (à droite) (fig. 6 de Nitta et Matsuzaki (2010)).

Au cours d'une autre étude (Nitta *et al.*, 2013), la surface déformée du joint est observée après écrasement par un procédé de microscopie LASER, cela en raison de l'influence supposée de la technique du film polymère sur le contact (modification du frottement, influence de l'épaisseur du film, etc.). Cette méthode de microscopie optique permet d'obtenir uniquement la déformation permanente du joint, l'information élastique, présente lors du contact, est perdue. Dans ce cas, la pression d'assise de transition est observée à 30 MPa.

Ces deux méthodes permettent d'obtenir une image du contact de l'interface entre le joint et la bride. Cependant, elles ne donnent pas directement le champ des ouvertures de cette interface. L'obtention expérimentale de ce champ des ouvertures constituerait pourtant un apport supplémentaire en vue de juger de la justesse des modèles de contact numériques présentés en section 1.1, qui restent largement tributaires de certaines hypothèses.

1.3 Modélisation des écoulements en lien avec l'étanchéité

La section 1.2 précédente traite de la caractérisation expérimentale des joints et plus généralement d'assemblages de surfaces rugueuses. Les résultats, tels qu'ils sont présentés, donnent une idée du comportement d'un assemblage mais ne permettent toutefois pas de modéliser la performance d'un contact ayant un profil bien particulier. La section ci-dessous présente alors différents travaux de la littérature s'intéressant à la modélisation des écoulements en milieu fracturé rugueux. Dans le cas des joints d'étanchéité, cette modélisation permet la prédiction du débit de fuite au travers du champ des ouvertures résultant de la mise en contact du joint avec la bride.

1.3.1 L'hypothèse des écoulements en film mince

L'étude des écoulements de fluides newtoniens dans l'approximation des milieux continus est généralement réalisée à partir des équations de NAVIER-STOKES, qui décrivent la conservation de la quantité de mouvement. La résolution de ce système d'équations aux dérivées partielles non-linéaires est généralement une tâche ardue. Il est alors préférable de trouver des moyens de simplifier ces équations. Lorsque l'écoulement est tel que les forces visqueuses prédominent sur les forces inertielles (le nombre adimensionnel de REYNOLDS est petit), il est possible de négliger l'effet du terme d'advection apportant la non-linéarité des équations de NAVIER-STOKES. L'équation devient alors linéaire et est connue sous le nom d'équation de STOKES et l'écoulement est dit rampant. L'étude de l'écoulement d'un

fluide fortement confiné entre deux surfaces, c'est-à-dire lorsque l'épaisseur du liquide est faible devant les dimensions transversales des surfaces, donne lieu à l'approximation de la lubrification développée historiquement pour l'étude de la lubrification hydrodynamique d'où elle tire son nom (Szeri, 1998). Cette approximation permet d'obtenir l'équation de Reynolds, qui décrit en deux dimensions le mouvement du fluide en milieu confiné.

Dans le cadre de l'étanchéité statique, le problème de l'étude des écoulements est apparenté à celui dans un milieu fracturé fortement confiné. L'équation de Reynolds est alors généralement utilisée dans bon nombre d'études pour décrire l'écoulement dans de tels milieux. La présentation non-exhaustive de quelques travaux sur l'écoulement en milieu confiné (pour des applications d'étanchéité ou non) fait alors l'objet de la section suivante.

1.3.2 Modèles d'écoulements en fracture rugueuse

1.3.2.1 Les méthodes de changement d'échelle et les méthodes locales

L'étude des effets de la rugosité des surfaces sur l'écoulement est un problème généralement difficile à traiter, en raison notamment de la complexité géométrique de cette dernière. Compte-tenu du fait que l'échelle de longueur caractéristique des rugosités est la plupart du temps bien plus petite que la dimension globale de la surface étudiée, il peut être judicieux de vouloir obtenir un modèle moyen d'écoulement ainsi que des paramètres macroscopiques effectifs décrivant ce milieu.

Dans le cadre de travaux sur la lubrification de paliers hydrodynamiques, Christensen (1970) a développé un modèle d'écoulement moyen pour des rugosités orientées longitudinalement ou transversalement. Ce modèle est basé sur l'utilisation d'un processus stochastique sur l'équation de Reynolds, ce qui lui a permis d'obtenir une nouvelle équation semblable à cette dernière pour une surface lisse, mais incluant des paramètres statistiques du champ des ouvertures. Pour des profils de rugosité plus généraux et en présence possible de contact, Patir et Cheng (1978) ont introduit des facteurs d'écoulement (*flow factors*) dans l'équation de Reynolds pour obtenir un modèle moyen décrivant l'écoulement. Cette équation est la suivante :

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\Phi_x \frac{\bar{h}^3}{12\mu}\frac{\partial \bar{p}}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Phi_y \frac{\bar{h}^3}{12\mu}\frac{\partial \bar{p}}{\partial y}\right) = \frac{U_1+U_2}{2}\frac{\partial \langle h\rangle}{\partial x} + \sigma\frac{U_1-U_2}{2}\frac{\partial \Phi_s}{\partial x} + \frac{\partial \langle h\rangle}{\partial t} \tag{1.33}$$

Dans l'équation (1.33), $\bar{h}$ est la séparation nominale entre les surfaces, $\langle h\rangle$ est l'ouverture moyenne, $\bar{p}$ est la pression moyenne du fluide, U_1 et U_2 sont les vitesses des deux surfaces, σ est l'écart-type de la rugosité des surfaces. Les facteurs Φ_x et Φ_y représentent l'effet de l'écoulement de Poiseuille tandis que Φ_s donne l'effet de l'écoulement de Couette sur l'écoulement moyen. Les facteurs d'écoulement sont obtenus en faisant la moyenne sur plusieurs réalisations des valeurs calculées par résolution complète de l'équation de Reynolds sur des surfaces statistiquement identiques. Tripp (Tripp, 1983) a étendu le modèle de Patir et Cheng en développant une formulation tensorielle du modèle d'écoulement moyen, permettant d'introduire par exemple le fait qu'un gradient de pression appliqué selon la direction x puisse produire un écoulement selon la direction y lorsque les rugosités sont orientées obliquement, ce qui n'est pas le cas avec le modèle de Patir et Cheng dont les facteurs d'écoulement sont des scalaires. Lorsque les termes non-diagonaux du tenseur sont négligeables devant les termes diagonaux, le modèle de Tripp (1983) est réduit à celui de Patir et Cheng (1978). Une variante du modèle de Patir et Cheng est réalisée pour des surfaces sinusoïdale par Letalleur *et al.* (2002). Cette approche donne une expression analytique des facteurs d'écoulement, en particulier dans des situations proches du seuil de percolation. D'autres modèles, tels que la méthode d'homogénéisation développée par

exemple dans Bayada et Faure (1989) permettent de prendre en compte l'impact d'une rugosité au motif périodique sur l'écoulement.

Par analogie avec la modélisation des écoulements dans un milieu poreux, la méthode de prise de moyenne volumique (Whitaker, 1999) a été utilisée par Prat *et al.* (2002) pour extraire le modèle d'écoulement moyen d'un fluide incompressible entre deux surfaces rugueuses, chacune pouvant se déplacer à une certaine vitesse. La rugosité est supposée avoir une variation spatiale lente de telle sorte que l'équation de Reynolds est utilisée, la formulation locale du problème est alors la suivante :

$$\boldsymbol{q} = -\frac{h^3}{12\mu}\boldsymbol{\nabla} p + \frac{\boldsymbol{U_1}+\boldsymbol{U_2}}{2}h \qquad \text{dans } \beta \tag{1.34a}$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{q} = 0 \qquad \text{dans } \beta \tag{1.34b}$$

$$\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n} = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \tag{1.34c}$$

Dans l'équation (1.34), $\boldsymbol{q}$ désigne le débit volumique par unité de largeur, h est l'ouverture locale entre les deux surfaces, p est la pression du fluide, μ la viscosité dynamique, $\boldsymbol{n}$ est le vecteur normal au niveau des zones de contact, $\boldsymbol{U_1}$ et $\boldsymbol{U_2}$ sont les vecteurs vitesse des deux parois. β désigne la région occupée par le fluide tandis que $\mathcal{C}_{\sigma\beta}$ est la frontière des zones de contact. Par application de la méthode de prise de moyenne volumique sur une surface représentative, le modèle d'écoulement moyen est déduit :

$$\langle\boldsymbol{q}\rangle = -\frac{\boldsymbol{K}}{12\mu}\cdot\boldsymbol{\nabla}\langle p\rangle^{\beta} + \boldsymbol{C}\cdot\frac{\boldsymbol{U_2}-\boldsymbol{U_1}}{2} + \frac{\boldsymbol{U_1}+\boldsymbol{U_2}}{2}\langle h\rangle \tag{1.35a}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\langle\boldsymbol{q}\rangle = \boldsymbol{U_2}\cdot\langle\boldsymbol{\nabla}h_2\rangle - \boldsymbol{U_1}\cdot\langle\boldsymbol{\nabla}h_1\rangle \tag{1.35b}$$

avec les tenseurs $\boldsymbol{K}$ et $\boldsymbol{C}$ définis par

$$\boldsymbol{K} = \langle k\rangle\,\boldsymbol{I} + \langle k\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{b}\rangle \quad , \quad \boldsymbol{C} = \langle k\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{c}\rangle \tag{1.36}$$

Dans ces équations, $\langle\rangle$ désigne une valeur moyenne, $\langle p\rangle^{\beta}$ est la pression moyenne dans la phase fluide, $k = h^3$ fait office de transmissivité locale, enfin, les vecteurs $\boldsymbol{b}$ et $\boldsymbol{c}$ sont les vecteurs de fermeture du problème, définis de la façon suivante, avec $\check{k}$ la déviation de k par rapport à sa moyenne, $\boldsymbol{\Pi_i}$ le vecteur de périodicité spatiale du problème et h_+ est la surface moyenne.

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\check{k}\boldsymbol{I} + k\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{b}\right) = 0 \qquad \text{dans } \beta \tag{1.37a}$$

$$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\Pi_i}) = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) \tag{1.37b}$$

$$\langle\boldsymbol{b}\rangle^{\beta} = 0 \tag{1.37c}$$

et

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot(k\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{c}) = 2\boldsymbol{\nabla}h_+ \qquad \text{dans } \beta \tag{1.38a}$$

$$\boldsymbol{c}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\Pi_i}) = \boldsymbol{c}(\boldsymbol{x}) \tag{1.38b}$$

$$\langle\boldsymbol{c}\rangle^{\beta} = 0 \tag{1.38c}$$

Ainsi dans le cas d'une fracture statique, il suffit de résoudre $\boldsymbol{b}$ par le problème (1.37) pour obtenir le modèle macroscopique de l'écoulement mu par un gradient de pression. Sans considération de la moyenne temporelle, le modèle macroscopique (1.35) constitue une généralisation du modèle de Patir et Cheng avec des coefficients tensoriels et non-plus scalaires ainsi qu'avec des vitesses des surfaces pas nécessairement colinéaires (Prat

et al., 2002). Ce modèle assume cependant la validité de l'équation de Reynolds partout à l'échelle de la rugosité, y compris proche des zones de contact.

Dans le cadre de l'étude de l'étanchéité statique des portées métalliques Marie (Marie, 2002) et Vallet (Vallet, 2008; Vallet *et al.*, 2008, 2009) ont développé des modèles numériques d'écoulement (les résultats de leurs études expérimentales sont présentés en section 1.2). Ces modèles sont développés pour l'écoulement de fluides newtoniens incompressibles, à faible nombre de Reynolds et soumis à un gradient de pression. L'équation de Reynolds est alors employée. Le travail réalisé (similaire dans les deux études) s'appuie sur la définition d'une surface représentative de la portée d'étanchéité. L'extraction des propriétés macroscopiques de cette surface représentative (par des techniques de changement d'échelle utilisant la méthode de la prise de moyenne volumique) permettent de déduire les propriétés de la portée complète. La technique suppose l'absence de défauts accidentels (rayures, etc.) et de grande échelle (ondulation, etc.). Elle suppose également que le contact est suffisamment loin du seuil de percolation afin que la surface extraite puisse être représentative.

L'estimation de la transmissivité représentative de la géométrie de l'ouverture du contact, intervenant par exemple dans l'expression (1.30) n'est pas immédiate. Pour un champ des ouvertures hétérogène avec $h(x, y)$ donné, il serait commode de définir la transmissivité du contact à l'aide d'une simple moyenne arithmétique dans l'équation de Reynolds :

$$K = \frac{\langle h \rangle^3}{12} \tag{1.39}$$

Une telle formulation donnée par l'équation (1.39) est généralement erronée, en particulier dans le cas d'une fracture anisotrope (Marie, 2002; Vallet, 2008). En effet, pour une ouverture rugueuse, le fluide va avoir tendance à suivre des chemins de fuite préférentiels, là où les ouvertures sont plus importantes, l'utilisation d'une telle moyenne ne permet alors pas de prendre en compte cet effet. Un développement formel de la transmissivité du contact est alors nécessaire. La formulation locale du problème est régie par l'équation de Reynolds :

$$\boldsymbol{q} = -\frac{h^3}{12\mu}\boldsymbol{\nabla} p \qquad \text{dans } \beta \tag{1.40a}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{q} = 0 \qquad \text{dans } \beta \tag{1.40b}$$

$$\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{n} = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \tag{1.40c}$$

L'utilisation de la méthode de la prise de moyenne volumique pour effectuer le changement d'échelle permet d'obtenir le modèle macroscopique suivant :

$$\langle \boldsymbol{q} \rangle = -\frac{\boldsymbol{K}}{\mu} \cdot \boldsymbol{\nabla} \langle p \rangle^\beta \tag{1.41a}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \langle \boldsymbol{q} \rangle = 0 \tag{1.41b}$$

avec le tenseur de transmissivité $\boldsymbol{K}$ défini de la manière suivante, en posant $k = h^3/12$:

$$\boldsymbol{K} = \langle k \rangle \, \boldsymbol{I} + \langle k \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b} \rangle \tag{1.42}$$

Le vecteur de fermeture $\boldsymbol{b}$, spatialement périodique, est solution du problème de fer-

meture ci-dessous. $\boldsymbol{n}$ représente la normale aux contours des zones de contact.

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\check{k} \boldsymbol{I} + k \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b} \right) = 0 \qquad \text{dans } \beta \tag{1.43a}$$

$$-\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b} = \boldsymbol{n} \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \tag{1.43b}$$

$$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\Pi_i}) = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) \tag{1.43c}$$

$$\langle \boldsymbol{b} \rangle^{\beta} = 0 \tag{1.43d}$$

La tenseur de transmissivité macroscopique est alors intrinsèque car il ne dépend que de l'ouverture du contact, via k et $\boldsymbol{b}$. Ces équations sont établies dans le cas d'une ouverture variant continûment. Néanmoins, Marie (2002) et Vallet (2008) ont donné le problème discrétisé sur une grille rectangulaire dont chaque élément possède une ouverture uniforme. Sur chaque élément, k est donc considéré uniforme (ainsi, $\check{k} = 0$). La continuité à l'interface entre deux éléments ainsi que la périodicité à l'échelle du pavé doivent être respectées. On obtient alors :

$$\boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{b_i} = 0 \qquad \text{sur l'élément } i \tag{1.44a}$$

$$\boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{b_j} = 0 \qquad \text{sur l'élément } j \tag{1.44b}$$

$$\boldsymbol{n} \cdot k_i \left(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_i} \right) = \boldsymbol{n} \cdot k_j \left(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_j} \right) \qquad \text{à l'interface } i - j \tag{1.44c}$$

$$\boldsymbol{b_i} = \boldsymbol{b_j} \qquad \text{à l'interface } i - j \tag{1.44d}$$

$$\sum_i \boldsymbol{b_i} = 0 \tag{1.44e}$$

Marie a d'abord résolu le problème de fermeture sur un pavé représentatif d'une surface tournée. Pour comparer les résultats du modèle avec ses expériences, il a utilisé le terme K_{yy} du tenseur $\boldsymbol{K}$ donnant la transmissivité dans la direction des stries d'usinage. Les résultats obtenus présentés sur la figure 1.14 montrent un écart de plusieurs ordres de grandeurs à faible charge et un meilleur accord aux fortes charges. L'estimation à petite échelle ne suffit donc pas pour déterminer l'étanchéité globale du contact. Marie attribue cette différence par la non prise en compte des défauts de grande échelle (constatés sur le dispositif expérimental) et de défauts ponctuels dans la surface représentative. Pour intégrer ces défauts de grande échelle, un contact complet incluant la spirale est réalisé par Marie. Pour le calcul, des conditions périodiques sont imposées dans la direction y. Dans la direction x, ce sont des conditions de Dirichlet en pression qui sont imposées. La résolution est ici celle du problème (1.40) par un schéma de volumes finis, il s'agit donc d'une simulation numérique directe. La comparaison avec l'expérience se fait cette fois-ci à l'aide du terme K_{xx} du tenseur $\boldsymbol{K}$. L'accord du modèle avec l'expérience est meilleur avec l'utilisation d'un contact complet comme le montre la figure 1.15. Marie impute l'écart aux pressions voisines de 300 MPa par la transition entre l'écoulement radial et l'écoulement circonférentiel, mais également aux approximations du modèle de contact (modèle purement plastique d'érosion).

D'un autre côté, les résultats de Vallet (2008) pour des surfaces fractales auto-affines montrent une surestimation d'un ordre de grandeur de la transmissivité par rapport à l'expérience. Après une étude des diverses causes pouvant influencer cet écart, il en conclut que la prise en compte de l'hétérogénéité du matériau dans le modèle de déformation est une piste d'amélioration prometteuse. Les travaux de Durand (2012) ont cependant contredit cette piste par la réalisation de simulations numériques de l'écrasement d'une surface rugueuse en tenant compte de différents comportements matériaux (couplage thermomécanique, gradient de propriétés mécaniques, plasticité cristalline). Aucun effet notoire n'a été constaté par rapport à un matériau au comportement homogène et isotrope.

Afin d'étudier l'influence des défauts de surface sur la transmissivité du contact (en particulier les défauts de grande longueur d'onde comme souligné dans Marie (2002)),

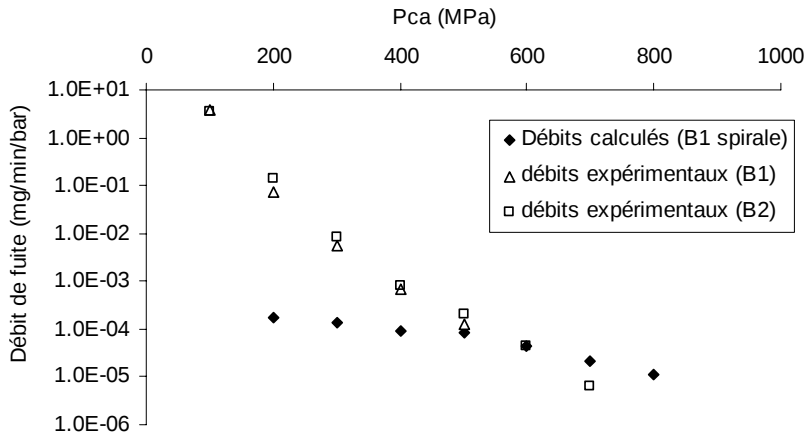


FIGURE 1.14 – Comparaison du débit de fuite calculé (en spirale) et du débit mesuré expérimentalement en fonction de la pression d'assise (fig. 4.36 de Marie (2002)).

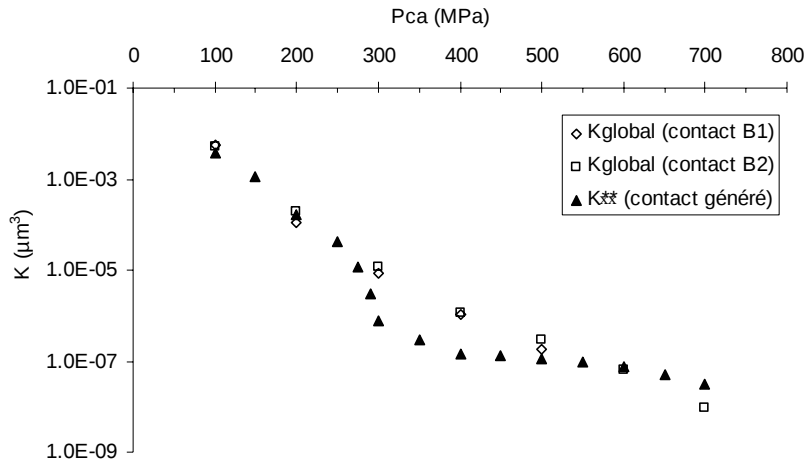


FIGURE 1.15 – Comparaison du débit de fuite calculé sur un contact complet avec le débit mesuré expérimentalement en fonction de la pression d'assise (fig. 4.48 de Marie (2002)).

Ledoux *et al.* (2011) ont effectué une décomposition modale d'une surface tournée pour déterminer statistiquement l'effet de chaque mode sur la fuite du joint. Le calcul de l'écoulement est réalisé par une simulation numérique directe. Les résultats obtenus montrent qu'aux fortes charges, ce sont les modes élevés qui ont un effet prépondérant (qui correspondent à une forme de surface plus complexe). Au contraire, aux faibles charges, seuls les premiers modes sont influents, correspondant à des défauts de grande échelle. Les auteurs soulignent de plus que la variabilité de la transmissivité du contact peut être contrôlée par un choix approprié des modes présents sur la surface (ce qui reste tout de même délicat à réaliser en pratique).

Ces conclusions sont similaires à celles présentées par Geoffroy et Prat (2004) pour une étude analytique de la fuite sur une surface sinusoïdale dans les directions radiale et circonférentielle. GEOFFROY et PRAT montrent que l'ondulation circonférentielle produit un effet néfaste aux faibles charges. Aux fortes charges, sa présence peut en revanche avoir un effet bénéfique en contribuant à la constriction de la spirale, si son amplitude est du même ordre de grandeur que celle des stries.

Récemment Pérez-Ràfols (2016); Pérez-Ràfols *et al.* (2016a) a étudié la fuite radiale d'un fluide incompressible sur une portion de surface tournée en résolvant localement l'équation de REYNOLDS. Des conditions de périodicité sont appliquées selon la direction des stries, mais l'effet de spirale n'est pas pris en compte, du fait de la faible taille de la surface extraite. Dans la direction radiale, des conditions limites de DIRICHLET sont appliquées. Ce modèle correspond à l'étude d'une surface rugueuse constituée de stries

concentriques et non pas d'une spirale. Des calculs réalisés, la transmissivité du contact est obtenue par intégration du résultat sur la surface. Les résultats obtenus par Pérez-Ràfols montrent que la fuite radiale est gouvernée par les constrictions au niveau des zones de contact, ce qui va gouverner le passage du fluide d'une strie à l'autre. De ce fait, la performance du joint est sensible au moindre défaut dans cette direction. Néanmoins, ces résultats ne permettent pas de prédire les petites fuites sur un contact complet du fait de la trop petite taille de la surface utilisée, les « méandres » qui peuvent se former ne sont pas pris en considération.

Dans Pérez-Ràfols *et al.* (2016b), un modèle stochastique multi-échelle d'écoulement a été développé, toujours dans le cas d'une fuite uniquement radiale. Pour cela, le modèle considère la surface du joint comme constituée de multiples pavés sur chacun desquels est affecté un tenseur de transmissivité (calculé préalablement) fonction de l'ouverture moyenne ou de la pression de contact moyenne (grandeurs qui sont issues du problème de mécanique du contact). Les différents tenseurs sont cependant supposés diagonaux. La distribution des transmissivités est alors ajustée selon une loi log-normale. La transmissivité globale du contact est ensuite calculée par un schéma de type volumes finis. En effectuant plusieurs tirages sur les valeurs des transmissivités locales (selon la loi log-normale précédemment ajustée sur la surface de référence) puis en calculant la fuite globale, une bonne représentativité statistique est atteinte. Ce modèle permet d'obtenir une bonne estimation de la performance du joint en comparaison avec les simulations directes, il arrive également à capturer les chemins de fuite tortueux qu'emprunte le fluide comme le montre la figure 1.16.

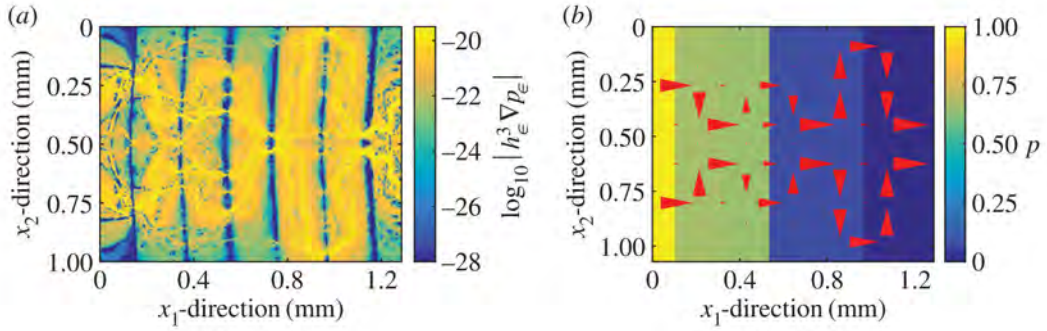


Figure 1.16 – Comparaison du flux calculé avec le modèle « complet » en (a) et avec le modèle stochastique en (b). Les flèches rouges sur la figure (b) donnent la direction et l'intensité du flux (fig. 6 de Pérez-Ràfols *et al.* (2016b)).

Pour calculer la fuite liquide à l'échelle d'un joint d'étanchéité dans son ensemble, Bourniquel (2017) a d'abord déterminé le champ des ouvertures par modélisation du contact. Les surfaces considérées contiennent majoritairement des défauts de forme de grande longueur d'onde, tels que de l'ondulation circonférentielle, les défauts de petit longueur d'onde étant filtrés. Cela permet de conserver une discrétisation relativement grossière de la surface. Le calcul de contact mécanique est réalisé par la méthode des éléments finis avec `Code_Aster`, en utilisant une loi de comportement élasto-plastique à écrouissage isotrope pour la surface rugueuse. La surface antagoniste est supposée rigide et parfaitement plane. La fuite est ensuite calculée à l'aide d'une simulation directe de l'équation de Reynolds et comparée à des résultats expérimentaux présentés dans la section 1.2. Il est exposé que la fuite calculée est surestimée par rapport à celle obtenue expérimentalement, l'écart relatif entre les deux augmentant au fur et à mesure que la pression d'assise sur le contact augmente. Bourniquel suggère que cet effet est dû à une déformation du matériau plus importante que celle prédite par la simulation, plutôt qu'à la rigidité finie de l'antagoniste ou à la raideur différente du revêtement. En prenant en compte le défaut de forme de la face inférieure de l'éprouvette sur ce montage expérimental, une meilleure corrélation est

obtenue ce qui suggère que ce caractère doit être traité avec attention dans les simulations.

Afin de prendre en compte l'effet des défauts de fréquence plus élevée, comme des stries, un modèle de calcul de fuite à deux échelles est développé par Bourniquel (2017). Le calcul de contact est inchangé et ne tient compte que du défaut d'ondulation circonférentielle. Les stries sont ensuite modélisées par des motifs sinusoïdaux sans effet de spirale (stries concentriques), et leur impact supplémentaire sur la transmissivité locale du contact est introduite par un tenseur de transmissivité diagonal (et non plus par le seul scalaire valant $h^3/12$). Les composantes de ce tenseur sont calculées à partir du motif d'une surface représentative de la portée. Le problème d'écoulement résultant est alors résolu par la méthode des éléments finis de frontière. Les résultats obtenus montrent une amélioration substantielle de la prédiction de la fuite du contact complet lorsque ce caractère anisotrope est introduit, même de manière approximative comme c'est le cas ici.

Les modèles présentés jusqu'ici étudient l'écoulement dans le contact en se basant sur l'équation de Reynolds, qui néglige les effets d'inertie et suppose des variations lentes de la géométrie de l'ouverture. Néanmoins, il reste difficile d'estimer la validité de cette équation dans une fracture rugueuse hétérogène. Parmi les premiers travaux de validation de l'utilisation de l'équation de Reynolds en fracture rugueuse, nous pouvons citer Mourzenko *et al.* (1995) qui ont résolu numériquement les équations de Reynolds et de Stokes dans des fractures gaussiennes et fractales auto-affines. Les comparaisons effectuées montrent une surestimation systématique de la transmissivité du contact avec l'équation de Reynolds par rapport à l'équation de Stokes, définie comme la valeur de référence. Cette surestimation peut atteindre un facteur supérieur à deux lorsque l'ouverture moyenne et la longueur de corrélation diminuent. L'étude réalisée montre également en certains endroits de la fracture des déviations du profil de vitesse par rapport au profil parabolique de l'équation de Reynolds.

Les travaux numériques de Brown *et al.* (1995) pour des surfaces sinusoïdales ont permis de comparer cette fois-ci l'équation de Reynolds à celle de Navier-Stokes. Les résultats obtenus montrent encore une surestimation des flux par l'équation de Reynolds. Cette surestimation augmente lorsque l'ouverture diminue relativement à l'amplitude et au désalignement des sinusoïdes. L'emploi de l'équation de Navier-Stokes a permis aux auteurs d'étudier les effets inertiels sur l'écoulement. Ils observent notamment qu'une augmentation du nombre de Reynolds conduit à une diminution du flux de par la présence de zones de recirculation, dissipant de l'énergie. Les auteurs notent cependant qu'en pratique, les nombres de Reynolds des écoulements liquides en fractures restent inférieurs à l'unité, en émettant toutefois des réserves pour les gaz.

D'autres travaux comme ceux de Marie (2002) sur une surface tournée mettent aussi en évidence une surestimation de la transmissivité du contact par l'équation de Reynolds, tandis que ceux de Durand (2012) permettent d'obtenir une estimation tout à fait comparable entre l'approche Reynolds et l'approche Stokes, pour une surface isotrope. Ces derniers résultats laissent envisager l'utilisation de l'équation de Reynolds (bidimensionnelle) pour obtenir une bonne estimation de la transmissivité du contact en un temps modéré par rapport à l'équation tridimensionnelle de Stokes.

1.3.2.2 Modélisation par la création d'un réseau de percolation

Le calcul direct de l'écoulement dans un champ des ouvertures hétérogène est généralement très coûteux. Le transport du fluide dans le contact est en général contrôlé par des zones critiques que sont les constrictions d'ouverture (Plouraboué *et al.*, 2006). Ces constrictions génèrent alors une perte de potentiel (ici la pression) importante dans l'écoulement du fluide.

Basé sur ce constat, Fluckiger (Fluckiger, 2005) a développé un modèle d'écoulement dans un contact par construction d'un réseau de percolation dans ce dernier. Chaque lien de ce réseau relie deux maximas d'ouverture (occasionnant une perte de potentiel limitée)

et passe par une constriction, qui est supposée occasionner la totalité de la perte de potentiel dans le travail de Fluckiger. Le réseau de percolation total est alors constitué d'une multitude de liens plus ou moins bien connectés les uns avec les autres, formant ainsi l'équivalent d'un réseau de conductances. Ce réseau, constituant alors un squelette topologique, permet de déterminer des chemins de fuite préférentiels pour le fluide. Un exemple de réseau construit est donné sur la figure 1.17. Le problème d'écoulement complet dans le contact est alors ramené à un problème discret, permettant une résolution plus abordable, ce qui laisse entrevoir notamment l'étude du comportement du contact proche du seuil de percolation.

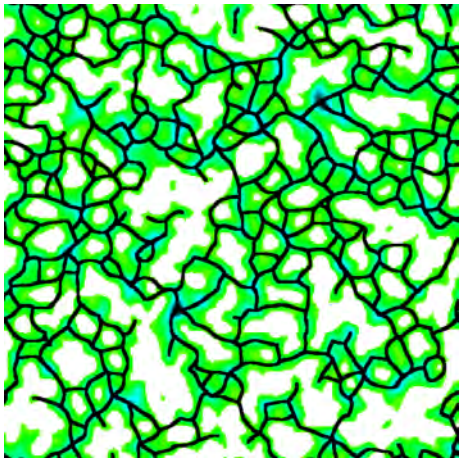


Figure 1.17 – Isovaleurs du champ des ouvertures avec les liens du réseau de percolation (en noir). Les zones blanches représentent les zones de contact (fig. 2.10 de Fluckiger (2005)).

Dans ses travaux, Fluckiger s'intéresse au cas de l'écoulement d'un fluide incompressible dans un contact entre une surface gaussienne isotrope, corrélée à courte portée et un plan lisse. La détection des points critiques (maximas et constrictions) est obtenue par une méthode de Newton. Le lien est la géodésique entre deux maximas et passant par un col, cela est réalisé en suivant la plus grande pente à partir des points cols (constrictions). Un col appartient alors à un unique lien. La conductance de chaque lien k est déterminée au niveau du col par une analyse asymptotique (Plouraboué *et al.*, 2004). L'hypothèse principale de ce développement est que l'ouverture au niveau du col doit être significativement plus petite que l'ouverture moyenne dans les vallées voisines. Cette conductance est alors donnée par la relation suivante, avec h_0 l'ouverture au niveau du col.

$$k = \frac{1}{14} {h_0}^3 \sqrt{-\frac{h_{xx}}{h_{yy}}} \quad , \quad h_{xx} = \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \quad , \quad h_{yy} = \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \tag{1.45}$$

Une évolution de la conductance au niveau d'un col proche du seuil de percolation est donnée comme une loi puissance de la charge dans une autre étude (Dapp et Müser, 2015).

La portée d'étanchéité complète n'est pas modélisée, seule une petite portion de taille représentative est utilisée et une étude statistique est réalisée. Les résultats obtenus à l'échelle du pavé représentatif (avec un modèle de contact purement plastique de type érosion) montrent que la conductance évolue selon une loi puissance décroissante proche du seuil de percolation (en fonction des variables telles que le taux de liens actifs du réseau par rapport au seuil, ou de l'aire relative de contact par rapport au seuil). Cet exposant trouvé par le modèle est différent de ceux présents dans la littérature, indiquant un changement de classe d'universalité du système étudié. La diminution de la conductivité du pavé proche du seuil est imputable à l'évolution structurelle du réseau lui-même, mais aussi à l'évolution de la conductance des liens en fonction de l'écrasement.

L'introduction de déformation élastique dans le contact mène à des observations différentes. Proche du seuil de percolation, la conductance semble peu varier tandis que loin de ce seuil, elle semble suivre à nouveau une loi puissance. Selon Fluckiger, ces résultats sont à pondérer par le fait qu'il est plus difficile de déterminer le seuil de percolation en présence de déformations élastiques car ce n'est plus un paramètre contrôlable (le taux de liens actifs du réseau n'est plus un paramètre contrôlable mais induit, par la charge appliquée par exemple, en raison des interactions élastiques). Un second résultat obtenu est que la conductance obtenue avec le modèle d'érosion est plus importante qu'en présence de déformations élastiques.

1.3.2.3 Autres approches utilisant la théorie de la percolation

La percolation définit la possibilité de transmission d'une information au travers d'un réseau. Comme présenté dans la section précédente, l'étude de l'écoulement en fracture rugueuse présente une analogie avec le phénomène de percolation.

Un certain nombre d'auteurs ont donc étudié la fuite d'un joint d'étanchéité en adoptant une approche basée sur des résultats issus de la théorie de la percolation, combinés avec un modèle de contact développé par Persson (présenté dans la section 1.1). L'idée développée par Persson et Yang (2008) et Bottiglione *et al.* (2009b) pour la détermination du chemin de percolation peut être représentée schématiquement par la figure 1.18. L'interface entre le joint et la bride est en effet modélisée en un ensemble de carrés représentant soit une zone de contact (noir), soit une ouverture (blanc). Ce pavage est modifié en fonction du grossissement ζ et à partir d'une valeur critique ζ_c de ce grossissement, des zones d'ouverture fusionnent, créant ainsi un chemin de fuite entre les deux côtés du joint. La valeur critique du grossissement est déterminée selon la théorie de la percolation lorsque $S(\zeta_c) \approx 0{,}4S_0$. Les auteurs considèrent alors que l'ensemble de la fuite du joint passe par cette constriction critique de section rectangulaire, et dont les dimensions sont déterminées par la théorie de Persson. Le débit volumique de fluide traversant le joint est alors estimé par la relation de Reynolds suivante, où $h(\zeta_c)$ est l'ouverture de la constriction critique et Δp la différence de pression vue par le joint (la largeur et la longueur de la constriction sont prises égales).

$$Q = \frac{h^3(\zeta_c)}{12\mu}\Delta p \tag{1.46}$$

Ce modèle a été confronté à l'expérience sur un montage constitué d'un joint élastomère au contact d'une surface rugueuse par Lorenz et Persson (2009). Un bon accord est trouvé par les auteurs mais cela résulte de l'ajout d'un préfacteur d'ajustement à la relation (1.46), que les auteurs fixent à 0,2 pour leur expérience.

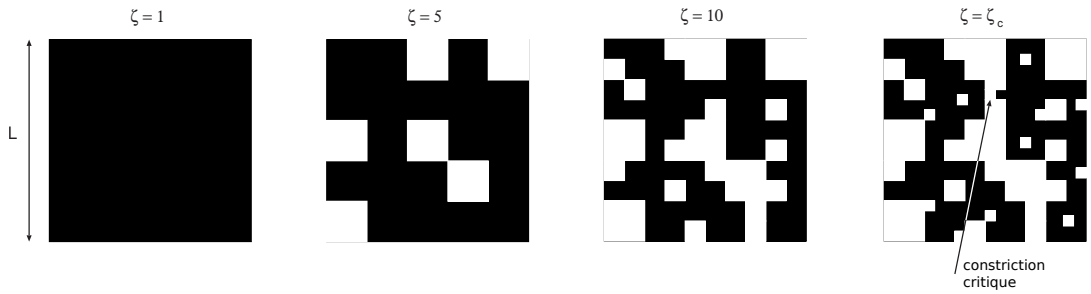


Figure 1.18 – Schéma montrant les zones de contact (en noir) et leur évolution avec le grossissement selon la théorie du contact de Persson (fig. 4 de Persson et Yang (2008)).

Les modèles précédents ne considèrent qu'une constriction dont les dimensions sont calculées au grossissement critique. Bottiglione *et al.* (2009a) ont développé un modèle qui tient compte des constrictions qui peuvent apparaître aux grossissements supérieurs au

grossissement critique. Ces constrictions supplémentaires auront toutefois des dimensions plus faibles, et donc une conductance plus faible. Leurs travaux ont alors permis de montrer qu'avec ce modèle, il existe un grossissement supérieur à ζ_c pour lequel la conductance du joint est maximale. Cependant, ce modèle fait intervenir deux paramètres ajustables arbitrairement, ce qui rend la comparaison avec les approches utilisant une unique constriction critique délicate.

D'une part Dapp et Müser (2015) et Dapp et Müser (2016) notent que les modèles présentés dans cette section risquent probablement de ne pas être corrects proche du seuil de percolation du joint, en raison de l'utilisation de la théorie du contact de Persson. D'autre part car le ratio de la longueur par la largeur de la constriction varie avec la charge, alors qu'il est considéré comme constant dans ces modèles.

En utilisant un modèle de contact issu de la dynamique moléculaire entre un solide élastique et une surface rugueuse fractale, Dapp et Müser (Dapp et Müser, 2016) ont effectué une résolution directe de l'équation de Reynolds dans le champ des ouvertures et ont étudié plus particulièrement le comportement du joint proche du seuil de percolation. Une partie de leurs résultats est illustrée sur la figure 1.19. Sur la planche A, il existe plusieurs chemins de fuite du fluide et la pression varie sur tout le pavé (présence de nuances allant du bleu au vert). Sur la planche D en revanche, il n'existe plus qu'un seul chemin possible et toute la variation de pression se fait au niveau de la constriction. Les propriétés locales de la constriction déterminent le comportement du joint dans son ensemble. Les auteurs mentionnent qu'il n'est pas possible d'assigner une unique classe d'universalité au problème d'étanchéité du fait que celui-ci devienne local. La planche E de la figure 1.19 montre que pour des faibles charges loin du seuil de percolation, le flux décroit selon une loi exponentielle. Aux plus fortes charges proche du seuil de percolation, la décroissance se fait selon une loi puissance.

1.4 Conclusions

Ce chapitre a présenté dans un premier temps diverses méthodes de modélisation du contact mécanique entre surfaces rugueuses. Les premières méthodes exposées, de nature stochastique, permettent d'obtenir l'évolution de grandeurs globales caractérisant le contact (généralement l'aire réelle de contact) en fonction de la charge appliquée. Ces méthodes ne permettent cependant pas d'accéder à des grandeurs locales du contact comme l'ouverture, qui est d'intérêt crucial en étanchéité car l'écoulement dans le champ des ouvertures peut se produire dans des chemins de fuite privilégiés.

Pour pallier à cela, des modèles de contact déterministes ont été introduits. Une méthode numérique de choix est celle des éléments finis, cependant le caractère multi-échelle présenté par les surfaces rugueuses (vaste plage de longueur d'onde s'étendant de l'ordre du centimètre pour les défauts d'ondulation jusqu'au micromètre et moins pour les aspérités) mène nécessairement à une discrétisation très fine du problème (en surface mais aussi dans le volume), donnant lieu à des systèmes de très grande taille et dont la résolution est rédhibitoire.

Des modèles de contact simplifiés sont alors employés, permettant de ne mailler que la surface de contact des solides. Parmi ces modèles simplifiés, les modèles élastiques disposent de par leur caractère linéaire de nombreuses méthodes de résolution. Ces modèles sous-estiment généralement très fortement l'aire réelle de contact (et surestiment donc l'ouverture) et leur usage est critiquable dans le cadre d'un contact métal contre métal, où de la plastification peut apparaître en proportion importante avec l'accroissement de la charge. Les modèles de contact élasto-plastiques simplifiés présentés dans ce chapitre introduisent la plasticité du matériau via une hypothèse supplémentaire par rapport au cas élastique (pression de contact au maximum égale à la dureté du matériau) permettant d'éviter la discrétisation du volume, ou alors par détermination des déformations

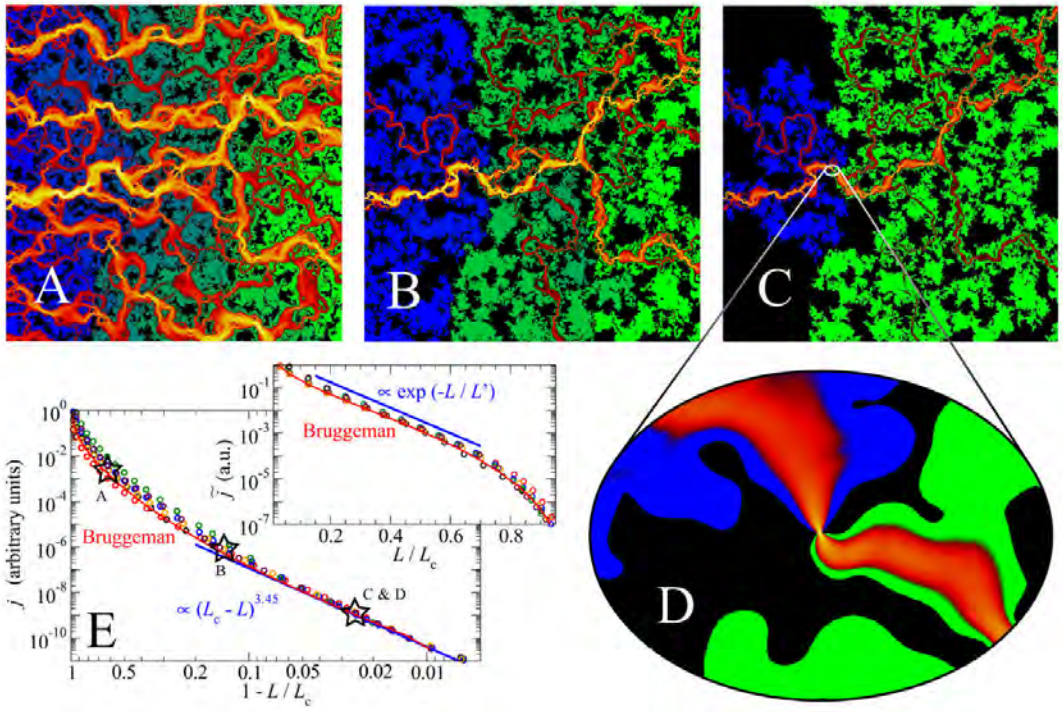


FIGURE 1.19 – Les figures A à D montrent l'évolution de l'écoulement (les nuances de jaune et rouge donnent la densité du flux) dans la fracture rugueuse (zones de contact en noir) en fonction de la charge L appliquée. Le bleu correspond à la pression interne et le vert à la pression externe au joint. La position des figures A à D est donnée sur la figure E qui donne l'évolution du flux au travers du pavé en fonction de la charge appliquée. Les résultats sont donnés pour plusieurs surfaces de paramètres statistiques identiques. Enfin, L_c est la charge critique correspondant au seuil de percolation du pavé (fig. 1 de Dapp et Müser (2016)).

plastiques, nécessitant un maillage dans le volume subissant de la déformation plastique. De plus l'hypothèse de massif semi-infini est utilisée dans ces modèles, ce qui limite leur utilisation au cas d'un contact suffisamment partiel. Cette hypothèse parait également restrictive dans le cadre des joints d'étanchéité, où les efforts de serrage peuvent être élevés et les épaisseurs des matériaux en contact faibles. Il est de plus difficile d'évaluer le degré d'exactitude de ces modèles élasto-plastiques simplifiés, aucune comparaison avec un modèle de contact non simplifié n'est reportée dans cette étude bibliographique. Une troisième catégorie de modèle de contact est celle des modèles phénoménologiques, donnant une approximation du déplacement au voisinage d'une aspérité en contact. La comparaison avec un modèle complet semble donner de bons résultats, la difficulté réside dans la façon d'approximer la surface rugueuse réelle par une multitude d'aspérités à la géométrie bien particulière.

D'un point de vue expérimental, cette étude bibliographique montre que la fuite d'un fluide incompressible au travers d'un contact est caractérisée par la transmissivité, qui est une grandeur intrinsèque au champ des ouvertures. L'évolution de cette grandeur suit une loi puissance décroissante avec l'augmentation de la charge dans le cas d'une surface tournée. Pour une surface rodée, le comportement semble plus complexe. Pour un écoulement gazeux, la fuite n'est pas déterminée par un seul paramètre et dépend de la pression de fluide appliquée. Dans les deux cas, une variation de la fuite de plusieurs ordres de grandeur est observée sur la gamme de pressions d'assises examinée.

L'analyse de l'état de l'art sur la modélisation des écoulements fluides à l'interface de contact entre le joint d'étanchéité et la bride montre que des modèles existent pour des fluides incompressibles. Ces modèles sont basés sur l'utilisation de l'équation de REY-

NOLDS dans des fractures rugueuses, dont certaines études soulignent néanmoins une surestimation systématique de la fuite par rapport à l'utilisation de l'équation de STOKES. Les méthodes de changement d'échelle permettent de déterminer un modèle d'écoulement moyenné sur une portion de surface suffisamment grande pour englober les défauts de rugosité de la fracture, mais suffisamment petite devant les dimensions globales de la portée du contact, pour s'affranchir des conditions limites globales. La transmissivité macroscopique du pavé représentatif de la portée est alors exprimée à l'aide d'un tenseur. La difficulté dans la résolution du problème est cependant identique au problème de base, qui est la résolution locale de l'équation de REYNOLDS. D'autre part, l'utilisation de cette méthode est discutable sur une portée d'étanchéité tournée, dont l'anisotropie est fortement marquée.

Les méthodes de construction de réseau de percolation permettent de déterminer un squelette topographique, constituant les chemins de fuite préférentiels du fluide. Chaque lien de ce réseau est affecté d'une conductance, qui est cependant déterminée proche du seuil de percolation au niveau des constrictions par une analyse asymptotique. Cela suppose donc que la chute de pression dans le lien se fasse uniquement au niveau de la constriction. Cette méthode permet donc une discrétisation du problème complet, facilitant ainsi sa résolution et laissant envisager une étude plus aisée proche du seuil de percolation.

Cette étude bibliographique révèle donc que dans le cadre des joints d'étanchéité, rares sont les modèles d'écoulements gazeux en milieux fracturés. L'écoulement d'un gaz en milieu confiné comme c'est le cas pour de telles fractures possède, en plus de l'aspect compressibilité, un aspect de raréfaction dont l'impact sur l'écoulement peut être important. À ce titre, la littérature sur la perméabilité gazeuse des milieux poreux peut fournir un certain nombre de pistes pour la suite de ce travail.

Chapitre 2

Écoulements gazeux raréfiés dans des puces nanofluidiques

Ce chapitre présente tout d'abord un état de l'art sur la modélisation des écoulements gazeux raréfiés, en particulier dans le régime glissant. Ensuite, la fabrication de puces nanofluidiques, formant des structures modèles, est présentée. Ces dernières sont destinées à la réalisation de mesures d'écoulement en condition de forte raréfaction, proche des conditions réelles de l'étanchéité. La comparaison de ces mesures à des modèles numériques de type « glissant » est développée, permettant d'en déterminer la validité macroscopique lorsque la raréfaction est importante.

2.1 Généralités sur les écoulements raréfiés

La vision communément admise d'un gaz est celle le décrivant comme composé d'un ensemble de particules (atomes ou molécules) pouvant se déplacer de manière relativement libre tout en pouvant interagir les unes avec les autres. D'un point de vue macroscopique, un gaz peut être appréhendé comme un milieu continu aux propriétés variant graduellement dans l'espace. Sous certaines conditions particulières d'écoulement, telles qu'une diminution importante de la densité du fluide ou encore une réduction de la taille du domaine offerte à ce dernier, les effets discrets deviennent observables et l'hypothèse de milieu continu pour décrire le gaz n'est alors plus valable. Ceci intervient lorsque l'échelle de longueur caractéristique de variation de quantités macroscopiques devient comparable au libre parcours moyen, distance moyenne que parcourt une molécule de gaz entre deux collisions successives (Shen, 2005). L'écoulement est alors dit raréfié et le degré de raréfaction est caractérisé par un nombre adimensionnel, le nombre de Knudsen, noté Kn. Il est défini comme le rapport du libre parcours moyen, λ, et d'une longueur caractéristique du problème, L, pouvant être par exemple le diamètre pour le cas d'un écoulement dans un tube, ou bien la longueur caractéristique du gradient d'une quantité macroscopique telle que la masse volumique (Shen, 2005).

$$\mathrm{Kn} = \frac{\lambda}{L} \tag{2.1}$$

Les effets de raréfaction deviennent alors de plus en plus importants au fur et à mesure que le nombre de Knudsen augmente. Une classification du régime d'écoulement est alors généralement effectuée de la façon suivante (Karniadakis *et al.*, 2005) :

- Si $\mathrm{Kn} \lesssim 10^{-2}$: le régime est qualifié de *continu*. L'écoulement est bien modélisé par les équations de Navier-Stokes avec une condition limite en vitesse nulle aux parois. Certains auteurs considèrent cependant que cette limite doit être restreinte à 10^{-3} (Gad-el Hak, 2006).
- Si $10^{-2} \lesssim \mathrm{Kn} \lesssim 10^{-1}$: le régime est qualifié de *glissant*. Une couche de l'ordre de grandeur du libre parcours moyen se forme au niveau des parois dans laquelle l'écoulement ne peut pas être modélisé par les équations de Navier-Stokes. Cependant, cette couche couvrant une portion encore faible de la dimension caractéristique du problème, l'écoulement reste modélisé par les équations de Navier-Stokes avec

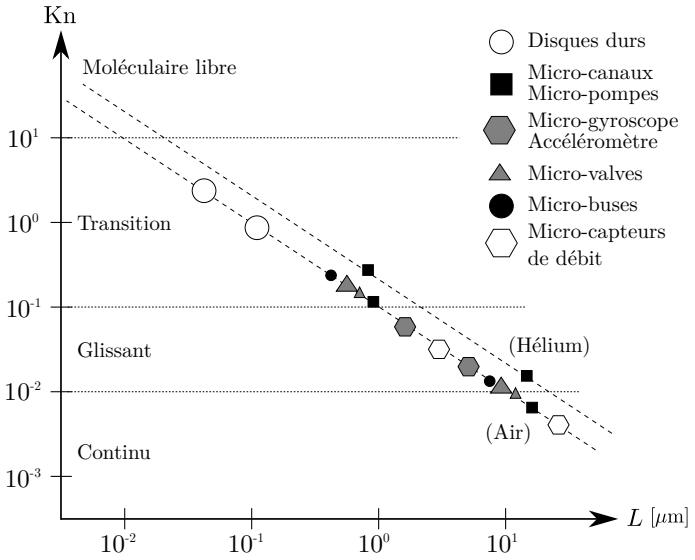


FIGURE 2.1 – Longueur caractéristique et régime de fonctionnement typique de quelques systèmes microfluidiques en conditions atmosphériques standards (adapté de Karniadakis *et al.* (2005)).

cette fois une condition limite glissante aux parois ainsi qu'un saut de température, modélisant les effets de raréfaction.

— Si $10^{-1} \lesssim \mathrm{Kn} \lesssim 10^{1}$: le régime est appelé régime de *transition*. Dans ce régime, l'approche continue n'est plus pertinente bien que les collisions intermoléculaires ne soient pas encore tout à fait négligeables. L'utilisation des équations de BURNETT, d'une méthode de Monte Carlo (DSMC) ou encore de l'équation de BOLTZMANN est alors de mise.

— Si $\mathrm{Kn} \gtrsim 10^{1}$: le régime est dit *moléculaire libre*. Dans ce régime, les collisions intermoléculaires deviennent négligeables par rapport aux collisions entre les particules et les parois.

Cette classification reste toutefois qualitative dans le sens où les limites ne doivent pas être considérées comme absolues mais comme pouvant varier selon la spécificité du problème étudié (géométrie, nature du gaz et des surfaces). La figure 2.1 offre une représentation schématique des longueurs caractéristiques ainsi que des régimes d'écoulements rencontrés dans des dispositifs de microfluidique. Une large gamme de nombre de KNUDSEN est balayée, la plupart des dispositifs opérant dans le régime glissant et transitionnel proche pour le cas des têtes de lecture des disques durs. Il est alors nécessaire de pouvoir décrire l'écoulement raréfié du gaz de manière la plus juste possible, tant au niveau du débit global, du frottement aux parois ou encore du profil de vitesse dans l'écoulement.

La détermination du nombre de KNUDSEN (2.1) requiert l'expression du libre parcours moyen du gaz. Sous l'hypothèse que les collisions intermoléculaires sont celles entre des sphères dures, il s'exprime de la façon ci-dessous (Loeb, 2004) :

$$\lambda = \frac{M}{\pi\sqrt{2}\delta^2 \mathcal{N}_\mathrm{A} \rho} \tag{2.2}$$

Dans l'équation (2.2), M est la masse molaire, δ est le diamètre de collision, $\mathcal{N}_\mathrm{A}$ est la constante d'AVOGADRO et ρ est la masse volumique. Le libre parcours moyen est donc inversement proportionnel à la masse volumique du gaz considéré. Le tableau 2.1 donne les propriétés de quelques gaz dans les conditions standards, notamment la masse moléculaire $m = M/\mathcal{N}_\mathrm{A}$ ou encore le diamètre de collision δ. Le libre parcours moyen peut être exprimé en fonction de quantités macroscopiques de la manière suivante d'après la théorie cinétique des gaz (Shen, 2005) :

Gaz	m [kg]	μ [Pa · s]	δ [m]
N_2	$4{,}65 \cdot 10^{-26}$	$1{,}656 \cdot 10^{-5}$	$4{,}128 \cdot 10^{-10}$
O_2	$5{,}31 \cdot 10^{-26}$	$1{,}919 \cdot 10^{-5}$	$3{,}948 \cdot 10^{-10}$
He	$6{,}65 \cdot 10^{-27}$	$1{,}865 \cdot 10^{-5}$	$2{,}365 \cdot 10^{-10}$
Ar	$6{,}63 \cdot 10^{-26}$	$2{,}117 \cdot 10^{-5}$	$3{,}963 \cdot 10^{-10}$

TABLEAU 2.1 – Propriétés de quelques gaz en conditions standards (d'après Shen (2005)). m est la masse moléculaire, μ la viscosité dynamique et δ le diamètre de collision (sphères dures).

$$\lambda = \frac{2\mu}{\rho\bar{c}} \tag{2.3}$$

avec μ la viscosité dynamique du gaz et $\bar{c}$ la vitesse arithmétique moyenne des molécules de gaz selon la loi de distribution des vitesses de MAXWELL, donnée par Loeb (2004) :

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}} \tag{2.4}$$

Dans l'équation (2.4), R est la constante des gaz parfaits et T la température. L'insertion de cette expression dans l'équation (2.3) mène à l'expression fréquemment employée du libre parcours moyen écrite en fonction de la masse volumique (Cercignani, 1988) :

$$\lambda = \frac{\mu}{\rho}\sqrt{\frac{\pi M}{2RT}} \tag{2.5}$$

Dans l'hypothèse des gaz parfaits, (2.5) peut s'exprimer en fonction de la pression :

$$\lambda = \frac{\mu}{p}\sqrt{\frac{\pi RT}{2M}} \tag{2.6}$$

où la loi des gaz parfaits s'écrit comme :

$$\frac{\rho}{p} = \frac{M}{RT} \tag{2.7}$$

2.2 État de l'art sur la modélisation des écoulements raréfiés

Cette section est dédiée à la présentation bibliographique des écoulements gazeux raréfiés, plus particulièrement du régime glissant. Dans ce régime, des effets non-continus apparaissent (glissement, accommodation incomplète) (Gad-el Hak, 2006), qui peuvent être traités par l'introduction de conditions aux limites appropriées. Des résultats expérimentaux d'écoulement dans des géométries simples, ainsi que des modèles phénoménologiques d'écoulement tentant d'étendre la description au-delà du régime glissant sont introduits.

2.2.1 Les conditions aux limites

2.2.1.1 Modèle de glissement de premier ordre

Au travers les siècles, de nombreuses études se sont attachées à la détermination des conditions aux limites d'un écoulement, en particulier à la validité de la condition de non glissement aux parois dans le régime continu (voir Lauga *et al.* (2007) et les références incluses). Comme il a été énoncé dans la section 2.1, dans le régime glissant, la condition limite de glissement aux parois doit être introduite pour tenir compte des effets de raréfaction de l'écoulement. Cette condition exprime la différence de vitesse relative entre le

fluide et la paroi (cette différence sera notée dans la suite de cette section $u_g = u_f - u_m$ avec u_g, la vitesse de glissement à la paroi, u_f la vitesse absolue du fluide à la paroi et u_m la vitesse de la paroi). Navier a été le premier à proposer que la vitesse de glissement à la paroi soit proportionnelle au taux de cisaillement en celle-ci (Navier, 1823). Ce concept a été étendu plus tard pour un gaz par Maxwell, pour conduire à l'expression de la vitesse de glissement dite de premier ordre (Maxwell, 1879). Maxwell a en effet considéré le comportement d'une surface rugueuse de manière simplifiée en la traitant comme intermédiaire entre une surface au comportement purement diffus et une surface au comportement purement spéculaire. En considérant qu'une fraction σ_v de la surface absorbe les molécules incidentes et les réémet avec une vitesse égale à celle du gaz au repos et à la température de la paroi, tandis qu'une fraction $1 - \sigma_v$ est réfléchie de façon spéculaire, il aboutit à l'expression suivante pour la vitesse de glissement :

$$u_g = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial n} - \frac{3}{2} \frac{\mu}{\rho T} \frac{\partial^2 T}{\partial s \partial n} \right) \Bigg|_m + \frac{3}{4} \left(\frac{\mu}{\rho T} \frac{\partial T}{\partial s} \right) \Bigg|_m \tag{2.8}$$

Dans l'équation (2.8), n désigne la direction normale à la paroi et s la direction tangentielle, σ_v est le coefficient d'accommodation de quantité de mouvement tangentielle, égal à un pour une réflexion diffuse et à zéro pour une réflexion purement spéculaire. La notation $\psi|_m$ dénote une évaluation de la grandeur ψ au niveau de la paroi. Lorsque la température de la paroi est considérée comme uniforme, les termes faisant intervenir les dérivées de la température disparaissent de l'expression (2.8), conduisant à une vitesse de glissement à la paroi proportionnelle à sa dérivée normale via le coefficient $(2 - \sigma_v)\lambda/\sigma_v$. Ce dernier représente une longueur de glissement, fictive et orientée vers l'intérieur de la paroi, et pour laquelle la vitesse de glissement u_g est nulle. Par la suite, nous dénoterons le coefficient ξ comme :

$$\xi = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \tag{2.9}$$

En négligeant les effets de la température, le modèle d'ordre un peut donc s'écrire de manière plus générale sous la forme ci-dessous :

$$u_g = C_1 \lambda \left. \frac{\partial u}{\partial n} \right|_m \tag{2.10}$$

avec C_1 un coefficient incluant les effets de σ_v. Selon cette formulation, plusieurs auteurs ont déterminé la valeur numérique de ce coefficient par diverses approches telles qu'une résolution numérique de l'équation de Boltzmann ou encore par analyse théorique. Un tableau récapitulatif des valeurs obtenues ainsi que des méthodes employées est proposé par Zhang *et al.* (2012), montrant des valeurs de C_1 de l'ordre de l'unité. Une plage de validité de ce modèle en terme de nombre de Knudsen est également proposée et montre que majoritairement, Kn doit être de l'ordre de grandeur de 10^{-1} ou inférieur ($\mathrm{Kn} \lesssim 10^{-1}$).

2.2.1.2 Modèle de glissement de second ordre

Suite aux travaux de Maxwell et dans le but d'accroître la validité du modèle glissant à des nombres de Knudsen plus élevés, des modèles de glissement de second ordre ont été introduits dans la littérature, ayant la forme générale suivante :

$$u_g = C_1 \lambda \left. \frac{\partial u}{\partial n} \right|_m - C_2 \lambda^2 \left. \frac{\partial^2 u}{\partial n^2} \right|_m \tag{2.11}$$

Dans l'équation (2.11), C_1 est le coefficient de glissement de premier ordre et C_2 celui de second ordre. Les valeurs numériques de ces coefficients sont proposées dans le tableau 2.2 pour quelques modèles de la littérature, d'autres références supplémentaires sont disponibles par exemple dans (Colin, 2005) ou (Zhang *et al.*, 2012).

Référence	C_1	C_2
Hsia et Domoto (1983)	1	1/2
Mitsuya (1993)	1	2/9
Maurer *et al.* (2003) (He)	$1{,}2 \pm 0{,}05$	$0{,}23 \pm 0{,}1$
Maurer *et al.* (2003) (N_2)	$1{,}3 \pm 0{,}05$	$0{,}26 \pm 0{,}1$
Hadjiconstantinou (2003)	1,11	0,61(0,31)

TABLEAU 2.2 – Quelques valeurs des coefficients C_1 et C_2 proposées dans la littérature. Le gaz est précisé lorsque le modèle en est dépendant.

Parmi ces modèles, on peut citer Hsia et Domoto (1983) qui ont développé un modèle glissant de second ordre dans le but de corriger l'équation de REYNOLDS dans le contexte de l'étude d'un patin glissant. Les auteurs s'intéressent particulièrement à la capacité de charge (portance) du patin en régime raréfié glissant en réalisant une étude expérimentale employant de l'hélium ou de l'air comme gaz de travail. Leurs résultats expérimentaux sont comparables avec leur modèle analytique pour un nombre de KNUDSEN allant jusqu'à 2,5 (correspondant au maximum dans le système, mais pas nécessairement représentatif sur celui-ci comme noté dans leur article). Ils observent également des résultats en meilleur accord lorsque le gaz utilisé est de l'hélium, phénomène qu'ils attribuent au caractère monoatomique de ce dernier (au contraire de l'air), pour laquelle la théorie du glissement est établie. Toujours dans le cadre de l'étude d'un patin glissant, Mitsuya (1993) a développé un modèle glissant dit d'ordre 1,5, bien qu'il s'agisse en réalité d'un second ordre. Les coefficients sont tels que ce nouveau modèle donne des résultats (débit, portance) qui se situent entre le modèle de premier ordre de Maxwell (1879); Burgdorfer (1959) et celui de second ordre de Hsia et Domoto (1983). Dans le contexte des écoulements gazeux en microcanaux unidimensionnels, Maurer *et al.* (2003) ont mesuré le débit massique de gaz (avec de l'hélium ou du diazote) au travers d'un microcanal fait de silicium et de verre, et de section rectangulaire à fort rapport d'aspect (section de hauteur 1,14 µm et de largeur 200 µm). Les auteurs déterminent ensuite les deux coefficients du modèle de glissement par ajustement de leurs observations expérimentales. Un bon accord polynomial d'ordre deux est trouvé sur toute la gamme de nombre de KNUDSEN étudiée (jusqu'aux valeurs moyennes $\mathrm{Kn} \approx 0{,}8$ pour l'hélium et $\mathrm{Kn} \approx 0{,}59$ pour le diazote). Dans le cadre de leur expérience, ils estiment également le domaine de validité du régime glissant comme se situant à $\mathrm{Kn} \approx 0{,}3$. Enfin, Hadjiconstantinou (2003) a déterminé les coefficients du modèle glissant pour obtenir un débit et un coefficient de friction en accord avec ceux obtenus par résolution de l'équation de BOLTZMANN pour un gaz de sphères dures dans un microcanal. Un bon accord entre le modèle et la simulation est trouvé jusqu'à $\mathrm{Kn} \approx 0{,}4$ mais le modèle repose sur l'utilisation d'un coefficient C_2 différent selon la grandeur étudiée (0,61 pour le débit et 0,31 pour la friction).

Comme on peut le remarquer dans le tableau 2.2 ainsi que dans les références supplémentaires (cf. (Colin, 2005) ou encore (Zhang *et al.*, 2012)), il n'y a pas de consensus général sur la valeur du coefficient de glissement de second ordre C_2, rendant alors délicate l'extension des prédictions de la théorie du glissement aux régimes d'écoulements plus raréfiés. Lorsque le nombre de KNUDSEN, Kn, est petit, un bon accord entre les différents modèles est observable. En revanche, des écarts importants sont constatés lorsque $\mathrm{Kn} \gtrsim 10^{-1}$, c'est-à-dire lorsque le terme du second ordre domine. Ainsi, pour $C_2 > 0$, le modèle surestime le débit par rapport à un modèle de premier ordre (pour Kn suffisamment grand). Le phénomène inverse se produit pour $C_2 < 0$. Un autre désavantage des modèles de second ordre est leur mise en œuvre numérique, qui peut s'avérer délicate lorsqu'il s'agit d'évaluer la dérivée seconde de la vitesse dans l'équation (2.11).

2.2.1.3 Modèle de glissement d'ordre supérieur

Pour éviter le calcul de la dérivée seconde dans l'expression (2.11), un nouveau modèle de glissement est proposé par Beskok et Karniadakis (1999), appelé modèle d'ordre élevé et qui est supposément valable dans tout le régime de Knudsen. Ce modèle possède l'expression suivante sous forme adimensionnelle (une grandeur quelconque ψ écrite sous forme adimensionnelle est identifiée comme $\underline{\psi}$) :

$$\underline{u_g} = \xi \frac{\mathrm{Kn}}{1 - B(\mathrm{Kn})\mathrm{Kn}} \left.\frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{n}}\right|_m \tag{2.12}$$

L'équation (2.12) ne fait intervenir que la première dérivée de la vitesse, de plus, $B(\mathrm{Kn})$ est une fonction du nombre de Knudsen. Une manière proposée pour déterminer cette fonction est d'effectuer un ajustement des résultats avec des données de simulations de l'équation de Boltzmann. Une autre approche possible est de d'abord l'écrire sous forme de série comme $B(\mathrm{Kn}) = b + c\mathrm{Kn} + \cdots$ puis, en insérant cette représentation dans l'équation (2.12) et en effectuant un développement de Taylor, l'expression obtenue est comparée terme à terme avec la représentation générale sous forme de série de la vitesse de glissement, donnée par l'équation (2.13) :

$$\underline{u_g} = \xi \left(\mathrm{Kn} \left.\frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{n}}\right|_m + \frac{1}{2}\mathrm{Kn}^2 \left.\frac{\partial^2 \underline{u}}{\partial \underline{n}^2}\right|_m + \cdots \right) \tag{2.13}$$

Les auteurs montrent qu'en choisissant b de la façon ci-dessous, les modèles (2.12) et (2.13) coïncident jusqu'au second ordre en Kn :

$$b = \frac{1}{2} \left(\left.\frac{\partial^2 \underline{u}}{\partial \underline{n}^2}\right|_m \Big/ \left.\frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{n}}\right|_m \right) \tag{2.14}$$

Le modèle (2.12) devient alors :

$$\underline{u_g} = \xi \frac{\mathrm{Kn}}{1 - b\mathrm{Kn}} \left.\frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{n}}\right|_m \tag{2.15}$$

En choisissant $b = 0$, on retrouve le modèle glissant de premier ordre de Maxwell. D'autre part, pour l'écoulement dans un tube ou une fente, la valeur de $b = -1$ peut être déterminée analytiquement. Une comparaison du profil de vitesse avec des simulations DSMC montre que le modèle (2.15) est en bon accord sur une large gamme de Kn, le plus gros écart (environ 10%) se situant au voisinage de $\mathrm{Kn} \approx 1$. Leurs résultats sont sensiblement dégradés lorsqu'ils s'intéressent au débit (Beskok et Karniadakis, 1999).

Un autre modèle d'ordre élevé a été proposé par Xue et Fan (2000) qui ont proposé de modéliser le glissement à l'aide d'une tangente hyperbolique. L'utilisation d'une telle fonction est motivée par l'obtention d'une approximation de la fonction de distribution des vitesses au-delà du régime glissant. De plus, lorsque Kn est grand, la vitesse de glissement tend vers une valeur finie. La vitesse de glissement possède est alors donnée par :

$$\underline{u_g} = \xi \tanh(\mathrm{Kn}) \left.\frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{n}}\right|_m \tag{2.16}$$

Les auteurs ont validé leur modèle de glissement à l'aide de simulation par la méthode DSMC dans une micro-fente en comparant les profils de vitesse et de pression. Un bon accord est trouvé jusqu'à $\mathrm{Kn} \approx 3{,}4$, là où un modèle de premier ordre (présenté dans leurs comparaisons) présente des écarts importants. Leur modèle semble alors bien modéliser l'écoulement dans le régime transitoire, il n'a toutefois pas été validé pour des nombres de Knudsen plus importants. Les différents modèles de condition limite de glissement de premier ordre, second ordre et d'ordre élevé présentés dans les paragraphes précédents donnent un aperçu limité de tout ce qui peut exister dans la littérature. Encore une fois, une revue plus ample des différents modèles de la littérature est proposée par Zhang *et al.* (2012).

2.2.1.4 Le coefficient d'accommodation

Un des paramètres importants intervenant dans les modèles présentés précédemment est le coefficient d'accommodation de quantité de mouvement tangentielle σ_v (abrégé TMAC dans la littérature anglophone). Ce coefficient peut être défini comme la quantité de mouvement tangentielle échangée par les molécules de gaz lors de l'impact avec la surface et permet de quantifier leur degré d'accommodation avec cette dernière (Karniadakis *et al.*, 2005).

$$\sigma_v = \frac{\tau_i - \tau_r}{\tau_i - \tau_m} \tag{2.17}$$

Dans l'équation précédente, τ_i et τ_r sont la quantité de mouvement tangentielle incidente et réfléchie respectivement, τ_m est celle de la surface ($\tau_m = 0$ pour une paroi immobile). Le cas $\sigma_v = 0$ correspond à de la réflexion spéculaire (pas de quantité de mouvement tangentielle échangée, friction nulle avec les parois) tandis que le cas $\sigma_v = 1$ équivaut à de la réflexion purement diffuse (échange complet de quantité de mouvement tangentielle avec la paroi).

La mesure ou le calcul direct du coefficient d'accommodation tangentielle sont difficiles à obtenir. Il est alors généralement déterminé par analyse inverse à partir de mesures de débit massique, sa valeur dépend alors du modèle de glissement utilisé. Dans leurs travaux expérimentaux, Arkilic *et al.* (2001) ont déterminé la valeur de ce coefficient pour plusieurs gaz à l'aide d'un modèle glissant de premier ordre, ainsi que sa variation en fonction du nombre de Knudsen dans des canaux de section quasi-rectangulaire en silicium. Une partie de leurs résultats sont présentés en figure 2.2 pour de l'argon et de l'azote. Dans la plage de Knudsen étudiée (régime glissant et transitoire proche), σ_v s'avère proche d'une valeur de 0,8 et relativement indépendant de Kn. En utilisant comparativement un modèle glissant de premier et de second ordre, Ewart *et al.* (2007) ont déterminé la valeur du coefficient d'accommodation pour différents gaz dans un tube de verre. La valeur trouvée dépend du modèle de glissement employé ainsi que du gaz utilisé pour la mesure. Dans un long canal droit en silicium de 9,39 mm, de section rectangulaire 9,38 µm × 492 µm, Graur *et al.* (2009) ont conduit des essais expérimentaux d'écoulements gazeux pour de l'argon et du diazote. Le régime de raréfaction s'étend de l'hydrodynamique au transitoire (jusqu'à Kn ≈ 30) avec des rapports entre pression amont et aval relativement faibles (jusqu'à 3). Les coefficients d'accommodation sont déduits dans le régime glissant par ajustement avec un modèle de premier ou second ordre. Dans les deux cas, les auteurs observent une accommodation incomplète des molécules ($\sigma_v < 1$), ainsi qu'une augmentation de celle-ci avec la diminution de la masse molaire du gaz. Ces quelques valeurs présentées dans ce paragraphe sont résumées dans le tableau 2.3, d'autres résultats supplémentaires de la littérature sont présentés dans (Ewart *et al.*, 2007) ou encore (Zhang *et al.*, 2012).

Il est attendu que le coefficient d'accommodation soit, entre autres, une fonction du gaz, du matériau de la surface tout comme de sa rugosité (voir (Zhang *et al.*, 2012) et les références incluses). Ainsi, il n'est pas rare que pour des questions pratiques, σ_v soit alors parfois pris empiriquement comme égal à l'unité (et par conséquent, on a aussi $\xi = 1$). L'effet de la rugosité a notamment été étudié par Pham *et al.* (2012) à l'aide de simulation de dynamique moléculaire pour de l'argon impactant une surface en platine. Ils observent que σ_v augmente avec la rugosité (cette dernière est modélisée par des structures pyramidales hautes de quelques dizaines d'ångström), ce qu'ils expliquent par un temps de séjour plus long des molécules de gaz dans les « creux » de la rugosité, qui ont alors plus de temps pour transférer leur quantité de mouvement tangentielle initiale à la surface. Une valeur maximale de $\sigma_v = 0{,}87$ est obtenue pour la rugosité maximale étudiée. D'autre part, pour une structure totalement lisse à l'échelle atomique, ils obtiennent $\sigma_v = 0{,}7$, toujours pour le même couple gaz–surface. À noter que les auteurs observent une diminution des valeurs avec l'augmentation de la température. Expérimentalement, des résultats similaires sont

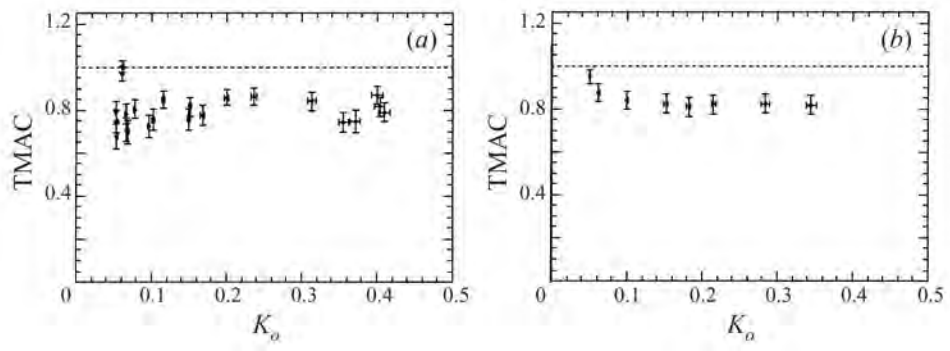


FIGURE 2.2 – Évolution expérimentale du coefficient d'accommodation σ_v (TMAC) avec le nombre de KNUDSEN en sortie (K_o) selon Arkilic *et al.* (2001) pour (a) de l'argon ; (b) de l'azote.

observés par Porodnov *et al.* (1974) qui ont mesuré le débit dans une fente rugueuse en verre pour plusieurs gaz (hélium, argon, krypton, etc.), sur une large plage de nombres de KNUDSEN (s'étalant d'environ 10^{-3} à 10^3 dans leurs expériences). Ils en déduisent alors le coefficient d'accommodation tangentiel qui, pour de l'hélium, varie de 0,87 à 0,96 lorsque la rugosité moyenne de la surface passe de 0,05 µm à une valeur comprise entre 1 et 5 µm respectivement. Cette tendance est conservée pour tous les gaz étudiés. Dans le cadre de ses travaux de thèse, Hadj Nacer (2012) a mesuré des débits massiques de gaz dans des microcanaux recouverts d'or ou d'oxyde de silicium, et ce du régime glissant au régime moléculaire libre. Pour un écoulement d'hélium dans les canaux de faible rugosité recouverts d'or, il obtient une valeur de σ_v variant dans la plage 0,885 – 0,986 tandis que pour les canaux recouverts d'oxyde de silicium, cette plage est de 0,894 – 0,944. De plus, à l'aide de simulations numériques de résolution de l'équation de BOLTZMANN (méthode BGK), l'auteur montre qu'un coefficient d'accommodation unique peut être utilisé pour tous les régimes d'écoulement (en prenant celui déterminé en régime glissant par exemple). De manière générale, il observe que si la rugosité de la surface est faible, σ_v est indépendant du gaz étudié. En revanche, plus la rugosité augmente et plus l'accommodation est importante pour les gaz légers (σ_v augmente). D'autres auteurs observent un comportement inverse. Blanchard et Ligrani (2007) ont étudié expérimentalement l'évolution du coefficient d'accommodation avec la rugosité et ont montré que celui-ci diminue très fortement avec l'augmentation de la rugosité de la surface. Cependant, ils remarquent que cette observation dépend de la hauteur qui est utilisée pour désigner le profil de rugosité ; si on choisit la hauteur maximale des pics, le coefficient d'accommodation diminue avec l'augmentation de la rugosité, au contraire lorsqu'on choisit la hauteur moyenne, aucune variation de σ_v avec la rugosité n'est observée.

2.2.2 Les travaux de Knudsen

Il a été présenté dans les paragraphes précédents que selon le degré de raréfaction de l'écoulement, différentes façons de le modéliser devaient être employées (cf. section 2.1). Par exemple, lors de la transition entre le régime continu et le régime glissant, l'observation d'un débit massique apparent plus important qu'il ne le devrait s'explique par l'apparition d'une vitesse de glissement non nulle aux parois, ce qui ne peut être modélisé correctement avec une condition limite de non glissement comme en régime continu, entraînant l'invalidité de la modélisation employée en régime continu dans le régime glissant.

Dans ses travaux pionniers, KNUDSEN s'est intéressé à l'écoulement de gaz à basse pression dans des tubes (Knudsen, 1909)[1]. Il a observé que pour une pression suffisam-

1. Le manuscrit original est en allemand cependant, un résumé des principaux résultats est donné en anglais dans (Loeb, 2004).

Référence	Ordre	Gaz	σ_v	Plage Kn
Arkilic *et al.* (2001)	1	Ar	0,670 – 0,980	0,050 – 0,410
	1	N_2	0,810 – 0,950	0,050 – 0,350
Maurer *et al.* (2003)	2	He	$0{,}910 \pm 0{,}030$	0,060 – 0,800
	2	N_2	$0{,}870 \pm 0{,}030$	0,002 – 0,590
Ewart *et al.* (2007)	1	He	$0{,}829 \pm 0{,}004$	0,009 – 0,309
	1	Ar	$0{,}725 \pm 0{,}007$	0,003 – 0,302
	1	N_2	$0{,}770 \pm 0{,}010$	0,003 – 0,291
Ewart *et al.* (2007)	2	He	$0{,}914 \pm 0{,}009$	0,009 – 0,309
	2	Ar	$0{,}871 \pm 0{,}017$	0,003 – 0,302
	2	N_2	$0{,}908 \pm 0{,}041$	0,003 – 0,291
Graur *et al.* (2009)	1	Ar	$0{,}848 \pm 0{,}008$	0,007 – 0,300
	1	N_2	$0{,}889 \pm 0{,}004$	0,007 – 0,300
Graur *et al.* (2009)	2	Ar	$0{,}910 \pm 0{,}028$	0,007 – 0,300
	2	N_2	$0{,}956 \pm 0{,}005$	0,007 – 0,300

TABLEAU 2.3 – Quelques valeurs (ou plages) du coefficient d'accommodation σ_v proposées dans la littérature. L'ordre détermine le modèle de glissement utilisé pour déterminer le coefficient.

ment faible, la conductance du tube passe par un minimum, phénomène désormais appelé minimum de KNUDSEN ou paradoxe de KNUDSEN. Ce minimum intervient pour Kn ≈ 1. Pour modéliser ses observations expérimentales, il a proposé l'utilisation d'une loi phénoménologique donnant la conductance du tube (rapport du débit massique Q et de la différence de pression Δp de part et d'autre du tube) de la façon suivante :

$$C = a\bar{p} + b\frac{1 + c_1\bar{p}}{1 + c_2\bar{p}} \tag{2.18}$$

Dans l'équation (2.18), C est la conductance du tube, a, b, c_1 et c_2 sont des paramètres ajustables et $\bar{p}$ est ici la pression moyenne dans le tube. Il a ensuite donné une expression de ces différents coefficients par des considérations théoriques, rendant moins arbitraire leur valeur. Le processus est présenté ci-après.

Détermination de a Pour déterminer le coefficient a, KNUDSEN évalue l'expression (2.18) pour des grandes valeurs de $\bar{p}$. L'écoulement doit se trouver dans le régime continu et se comporter comme un écoulement de POISEUILLE sans glissement. La conductance se comporte alors comme :

$$C \underset{\bar{p}\to+\infty}{\sim} a\bar{p} \tag{2.19}$$

Il trouve alors :

$$a = \frac{\pi}{128}\frac{M}{RT}\frac{d^4}{\mu L} \tag{2.20}$$

avec d le diamètre du tube, L sa longueur, μ la viscosité dynamique du gaz, M la masse molaire, T la température et R la constante des gaz parfaits.

Détermination de b Pour le coefficient b, KNUDSEN procède de même mais cette fois-ci pour des petites valeurs de $\bar{p}$. L'écoulement doit se trouver dans le régime moléculaire libre et on a l'équivalent suivant pour la conductance :

$$C \underset{\bar{p}\to 0}{\sim} b \tag{2.21}$$

En la comparant avec la conductance d'un tube dans le régime moléculaire libre, il trouve :

$$b = \frac{\sqrt{2\pi}}{6}\sqrt{\frac{M}{RT}}\frac{d^3}{L} \tag{2.22}$$

Détermination de c_1 et c_2 Pour déterminer ces deux constantes, deux cas doivent être considérés, le premier lorsque le libre parcours moyen est petit devant le rayon du tube mais pas encore négligeable, le second correspondant au cas contraire. Ces deux conditions équivalent à se placer dans le régime glissant et transitoire respectivement. Dans le premier cas, cela revient à considérer une pression « suffisamment importante » pour que la conductance puisse s'écrire comme :

$$C \sim a\bar{p} + b\frac{c_1}{c_2} \tag{2.23}$$

En comparant cette équation à celle de l'écoulement de Poiseuille avec glissement de premier ordre (2.24), il arrive à la conclusion que le rapport c_1/c_2 est une constante indépendante du gaz ou de la géométrie, ce qui est vérifié par ses résultats expérimentaux. Il prend cette constante égale à $c_1/c_2 \approx 0{,}81$. Pour cela, on peut montrer que la conductance de Poiseuille dans un tube avec un glissement de premier ordre (2.10) possède l'expression ci-dessous, avec λ le libre parcours moyen et ξ un coefficient fonction de l'accommodation à la paroi.

$$C = \frac{\pi}{128}\frac{M}{RT}\frac{d^4}{\mu L}\bar{p}\left(1 + 8\frac{\xi\lambda}{d}\right) \tag{2.24}$$

Pour le second cas, la pression est considérée comme « suffisamment faible » et la conductance s'écrit alors par un développement limité comme :

$$C \sim a\bar{p} + b\,(1 - (c_2 - c_1)\bar{p}) \tag{2.25}$$

En égalant cette expression avec une autre obtenue par des considérations cinétiques, Knudsen détermine une proportionnalité entre $c_2 - c_1$ et le facteur $d\sqrt{M/RT}/\mu$. En résolvant le système pour les deux coefficients restants, il obtient :

$$c_1 = \sqrt{\frac{M}{RT}}\frac{d}{\mu} \quad , \quad c_2 = \beta\sqrt{\frac{M}{RT}}\frac{d}{\mu} \tag{2.26}$$

avec β un facteur constant choisi en fonction du minimum expérimental par lequel passe la conductance. Ce dernier est alors calculé comme $\beta \approx 1{,}235$. Ainsi, la conductance du tube s'exprime de la manière suivante :

$$C = \frac{\pi}{128}\frac{M}{RT}\frac{d^4}{\mu L}\bar{p}\left(1 + \frac{64}{3}\sqrt{\frac{2RT}{\pi M}}\frac{\mu}{d\bar{p}}\frac{1 + \sqrt{\frac{M}{RT}}\frac{d\bar{p}}{\mu}}{1 + \beta\sqrt{\frac{M}{RT}}\frac{d\bar{p}}{\mu}}\right) \tag{2.27}$$

En utilisant l'expression du libre parcours moyen (2.6) et en définissant le nombre de Knudsen correspondant à la pression moyenne comme $\overline{\mathrm{Kn}} = \lambda/d$, la conductance de l'équation (2.27) se réécrit comme :

$$C = \frac{\pi}{128}\sqrt{\frac{\pi M}{2RT}}\frac{d^3}{L}\left(\frac{1}{\overline{\mathrm{Kn}}} + \frac{128}{3\pi}\frac{\overline{\mathrm{Kn}} + \sqrt{\frac{\pi}{2}}}{\overline{\mathrm{Kn}} + \beta\sqrt{\frac{\pi}{2}}}\right) \tag{2.28}$$

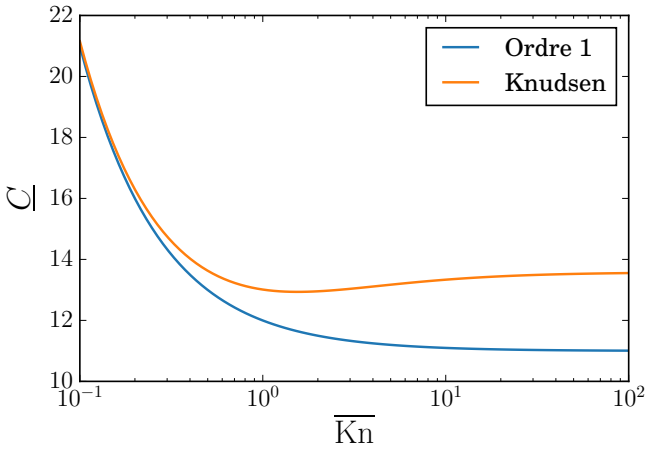


FIGURE 2.3 – Évolution de la conductance adimensionnelle en fonction du nombre de KNUDSEN pour le modèle de KNUDSEN (2.28) et pour le modèle de POISEUILLE glissant (2.29) (en prenant $\xi = 16/3\pi\beta \approx 1{,}37$).

En procédant de la même façon pour la conductance de POISEUILLE avec glissement de premier ordre donnée par l'équation (2.24), on obtient :

$$C = \frac{\pi}{128}\sqrt{\frac{\pi M}{2RT}}\frac{d^3}{L}\left(\frac{1}{\overline{\mathrm{Kn}}} + 8\xi\right) \tag{2.29}$$

En définissant la conductance adimensionnelle $\underline{C}$ comme le terme entre parenthèses dans les expressions (2.28) et (2.29), on trace son évolution sur la figure 2.3 en fonction de $\overline{\mathrm{Kn}}$ pour les deux modèles. Par commodité, on choisit $\xi = 16/3\pi\beta \approx 1{,}37$ afin que les deux modèles coïncident au premier ordre, lorsque $\overline{\mathrm{Kn}}$ prend des petites valeurs (ce choix est arbitraire car les deux modèles se comportent identiquement lorsque $\overline{\mathrm{Kn}} \to 0$ quelle que soit la valeur de ξ). Le minimum de KNUDSEN apparaît très clairement pour $\overline{\mathrm{Kn}} \approx 1$ alors que le modèle d'ordre un varie de façon monotone. Le modèle de premier ordre sous-estime donc la conductance du tube lorsque le nombre de KNUDSEN augmente. La conductance adimensionnelle de KNUDSEN s'écrit comme la somme de deux termes, $\underline{C_v}$ et $\underline{C_r}$. Le terme $\underline{C_v}$ correspond au modèle laminaire du régime visqueux tandis que le terme $\underline{C_r}$, s'interprète comme une correction de raréfaction dans tous les régimes d'écoulements et plus uniquement dans le régime glissant comme le fait le terme 8ξ dans le modèle de POISEUILLE avec correction de premier ordre (2.29).

$$\underline{C} = \underbrace{\frac{1}{\overline{\mathrm{Kn}}}}_{\underline{C_v}} + \underbrace{\frac{128}{3\pi}\frac{\overline{\mathrm{Kn}} + \sqrt{\frac{\pi}{2}}}{\overline{\mathrm{Kn}} + \beta\sqrt{\frac{\pi}{2}}}}_{\underline{C_r}} \tag{2.30}$$

Le fait que KNUDSEN ait déterminé les paramètres de son équation (2.18) par des considérations issues de la théorie cinétique des gaz dans des conditions de raréfaction importante met en évidence l'importance de la prise en compte des effets moléculaires dans ces régimes, en particulier sur les échanges ayant lieu entre les molécules de gaz et les parois solides lors des collisions.

D'autres auteurs se sont intéressé aux écoulements à raréfaction importante dans des canaux. Citons par exemple les travaux de Porodnov *et al.* (1974) qui traitent notamment le cas de différents gaz ainsi que de différentes géométries (tubes, fentes rectangulaires). La procédure expérimentale utilisée est similaire à celle de Knudsen (1909) (relaxation instationnaire d'une différence de pression initiale dans deux réservoirs de volume connu).

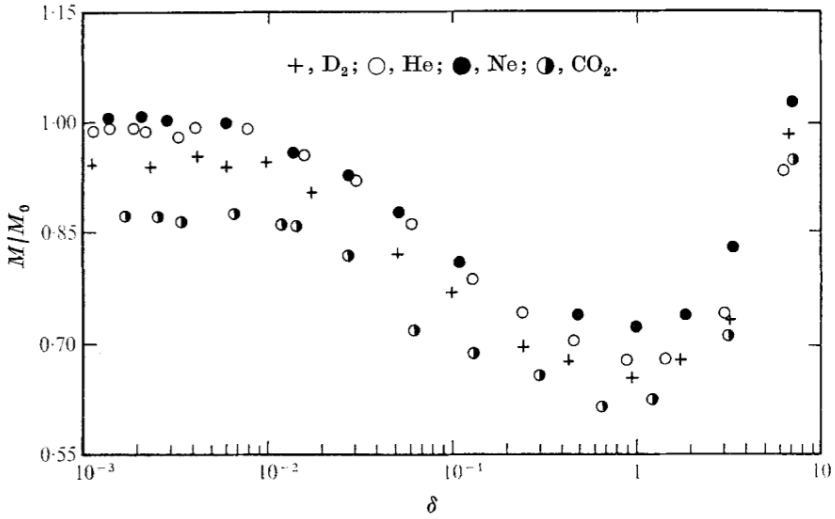


FIGURE 2.4 – Évolution de la conductance adimensionnelle en fonction du paramètre de raréfaction $\delta \propto 1/\mathrm{Kn}$ pour différents gaz dans une fente rectangulaire (d'après Porodnov *et al.* (1974)).

Le rapport de la différence de pression appliquée et de la pression moyenne varie dans leurs essais de 10^{-4} en régime glissant à 1 en régime moléculaire libre. Dans le cas d'une fente rectangulaire, les valeurs du nombre de KNUDSEN atteintes expérimentalement s'échelonnent alors de 0,1 à 900. Les auteurs montrent que la conductance devient presque constante en régime moléculaire libre, et ce pour différents gaz (voir figure 2.4). Ils montrent également que l'augmentation de la rugosité des surfaces tend à diminuer la valeur de la conductance.

2.2.3 Des modèles d'écoulement unifiés

Par interprétation de ses résultats expérimentaux, KNUDSEN (Knudsen, 1909) a développé un modèle phénoménologique d'écoulement de gaz dans des tubes valable dans tous les régimes d'écoulements (2.27). Pour essayer d'étendre ce résultat à des géométries différentes, la littérature dispose d'un certain nombre de modèles d'écoulements « corrigés », valides pour des nombres de KNUDSEN arbitraires.

2.2.3.1 L'équation de la lubrification corrigée

Un nombre important de travaux de la littérature des écoulements raréfiés se concentre sur les écoulements en fentes droites ou au cas des patins glissants pour la modélisation des têtes de disques durs par exemple. Dans ces cas, l'équation de la lubrification est employée pour la modélisation des écoulements gazeux. Dans le cas général, le débit fluide total obtenu est alors la somme de trois contributions élémentaires : le débit de POISEUILLE, le débit de COUETTE et un débit dû à la transpiration thermique (Fukui et Kaneko, 1988). Concentrons-nous sur la première composante (la contribution de POISEUILLE). Pour un écoulement unidimensionnel de gaz, le débit massique par unité de largeur peut s'écrire sous la forme générale ci-contre :

$$Q_p = -\rho \frac{h^3}{12\mu} Q^* \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x} \tag{2.31}$$

Dans l'équation (2.31), Q^* est le facteur de correction du débit de POISEUILLE dépendant du niveau de raréfaction. Ce facteur s'apparente à une transmissivité adimensionnelle. Il est courant dans la littérature d'adimensionner l'équation (2.31) de la façon ci-dessous pour obtenir le débit de POISEUILLE adimensionnel, $\underline{C}$, qui s'apparente à une conductance adimensionnelle.

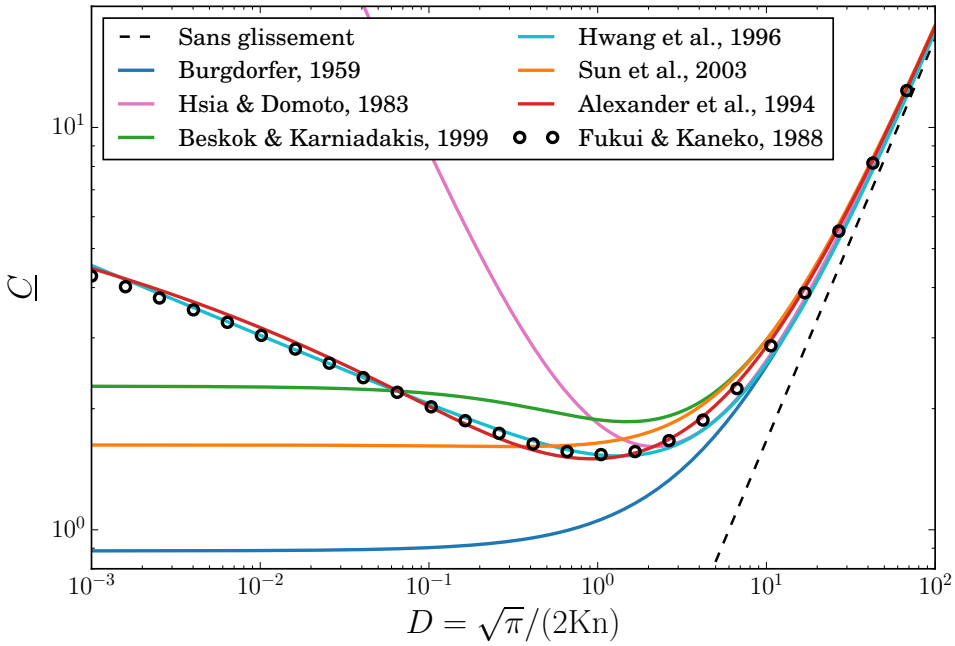


FIGURE 2.5 – Comparaison des différents modèles.

$$\underline{C} = -\frac{Q_p \sqrt{\frac{2RT}{M}}}{h^2 \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}} \tag{2.32}$$

En insérant les expressions (2.31) et (2.5) dans (2.32), on obtient :

$$\underline{C} = \frac{\sqrt{\pi}}{12\mathrm{Kn}} Q^* = \frac{Q^* D}{6} \tag{2.33}$$

où D est un nombre de raréfaction abondamment utilisé dans la littérature, inversement proportionnel à Kn et définit comme :

$$D = \frac{\sqrt{\pi}}{2\mathrm{Kn}} \tag{2.34}$$

Au cours des années, différents modèles ont été développés pour donner une expression du facteur de correction Q^* (ou de $\underline{C}$ de façon équivalente). Un aperçu non-exhaustif de quelques-uns de ces modèles est présenté dans le tableau 2.4 page 52, et graphiquement sur la figure 2.5. Dans le cadre de l'étude de la lubrification hydrodynamique des paliers, Burgdorfer (1959) a proposé d'introduire une correction de glissement de premier ordre de MAXWELL, résultant en l'équation de REYNOLDS corrigée au premier ordre en KNUDSEN. Afin d'augmenter le domaine de validité du modèle de BURGDORFER, Hsia et Domoto (1983) et Mitsuya (1993) ont utilisé une condition de glissement de second ordre pour obtenir une équation de REYNOLDS, cette fois-ci corrigée jusqu'à l'ordre deux en KNUDSEN. Selon le modèle, le coefficient de second ordre est toutefois différent, comme présenté en début de section 2.2. Ils ont comparé avec succès leurs modèles avec des résultats expérimentaux d'écoulement sous un patin glissant, essentiellement dans le régime glissant. Toujours pour des travaux concernant les patins glissants présentant des faibles espacements entre les deux surfaces antagonistes, Fukui et Kaneko (1988) ont développé une équation de REYNOLDS modifiée à partir de l'équation de BOLTZMANN linéarisée, valide pour un niveau de raréfaction arbitraire et incluant les effets de POISEUILLE, de COUETTE et de transpiration thermique. L'expression du coefficient de correction de POISEUILLE est obtenue semi-analytiquement et donnée par Cercignani et Pagani (1966) pour un écoulement entre deux plaques planes parallèles. L'effet de l'accommodation à la surface n'est

toutefois pas considéré dans l'étude, les auteurs considérant une réflexion spéculaire aux parois. Pour des régimes très raréfiés, le coefficient $\underline{C}$ obtenu se comporte asymptotiquement comme $\ln(\mathrm{Kn})$. En conséquence, Alexander *et al.* (1994) ont proposé l'expression empirique (2.35) de la conductance adimensionnelle, fonction de deux paramètres constants, A et B, déterminés par ajustement (numériquement, les auteurs obtiennent : $A = 1{,}318\,889$; $B = 0{,}387\,361$).

$$\underline{C} = \frac{D}{6} + \frac{A\sqrt{\pi}}{2} + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \ln\left(1 + \frac{B\sqrt{\pi}}{2D}\right) \tag{2.35}$$

Cette relation permet d'obtenir un comportement asymptotique correct lorsque $\mathrm{Kn} \to 0$ et $\mathrm{Kn} \to +\infty$ mais présente des écarts dans le régime de transition. De manière similaire, Hwang *et al.* (1996) ont proposé un modèle comportant trois paramètres d'ajustement (pour ce modèle présenté dans le tableau 2.4, ils obtiennent : $a = 0{,}018\,07$; $b = 1{,}353\,55$ et $c = -1{,}174\,68$). Bien que permettant d'obtenir un comportement satisfaisant par rapport aux résultats de Fukui et Kaneko (1988) pour un large domaine de raréfaction, le comportement asymptotique en l'infini se fait selon une loi puissance et non-plus logarithmique.

D'autre part, Beskok et Karniadakis (1999) ont développé un modèle utilisant la définition de la vitesse de glissement d'ordre élevé (2.15). De plus, les auteurs considèrent une viscosité effective dépendante du nombre de Knudsen selon la loi (2.36) suivante, où α est un paramètre constant ajustable et μ_0 la viscosité « usuelle ».

$$\mu = \frac{\mu_0}{1 + \alpha \mathrm{Kn}} \tag{2.36}$$

Le concept de viscosité effective est basé sur la conception faite du changement des mécanismes de dissipation de quantité de mouvement au fur et à mesure que la raréfaction de l'écoulement est augmentée, menant à une viscosité qui doit de ce fait décroître. Les auteurs choisissent comme valeur $\alpha = 2{,}2$, déterminée par des simulations (par la méthode DSMC) dans des canaux de rapport longueur sur hauteur de 20. De plus, à petit Kn, ce modèle ne permet pas retrouver le comportement du modèle de premier ordre. Cette valeur de α est propre au gaz étudié qui est du diazote dans ce cas. Une illustration des résultats de Beskok et Karniadakis (1999) est donnée en figure 2.6 où le modèle permet de capter le minimum de conductance du canal pour $\mathrm{Kn} \approx 1$. Le comportement pour des niveaux de raréfaction plus importants n'est cependant pas correctement reproduit. En revanche, la moins bonne prédiction du minimum par rapport au modèle de Fukui et Kaneko (1988) sur la figure 2.5 est possiblement due à un « effet de taille finie » du canal utilisé dans les simulations pour la détermination de α.

Pour l'étude d'un patin glissant, Sun *et al.* (2003) ont présenté un modèle utilisant la vitesse de glissement de second ordre développée par Hsia et Domoto (1983), en plus d'introduire un modèle de viscosité effective avancé par Veijola et Turowski (2001) de la manière suivante :

$$\mu = \frac{\mu_0}{1 + 2\mathrm{Kn} + 0{,}2\mathrm{Kn}^{0{,}788} \exp(-0{,}1\mathrm{Kn})} = \mu_0 f(\mathrm{Kn}) \tag{2.37}$$

Le modèle de Reynolds résultant offre une meilleure prédiction du débit dans le régime glissant et transitoire proche par rapport au modèle de premier et second ordre de Burgdorfer (1959) et Hsia et Domoto (1983) respectivement. Au-delà de ces régimes, les écarts avec les résultats obtenus par résolution de l'équation de Boltzmann linéarisée sont plus conséquents.

Les modèles de Reynolds modifiés présentés dans les paragraphes précédents présentent tous un comportement asymptotique semblable lorsque la raréfaction devient négligeable ($\mathrm{Kn} \to 0$). Lorsque la raréfaction augmente, le modèle de premier ordre (Burgdorfer, 1959) tend à sous-estimer le débit par rapport aux résultats de Fukui et Kaneko, qui est utilisé comme référence dans l'industrie. Le phénomène opposé se produit avec le

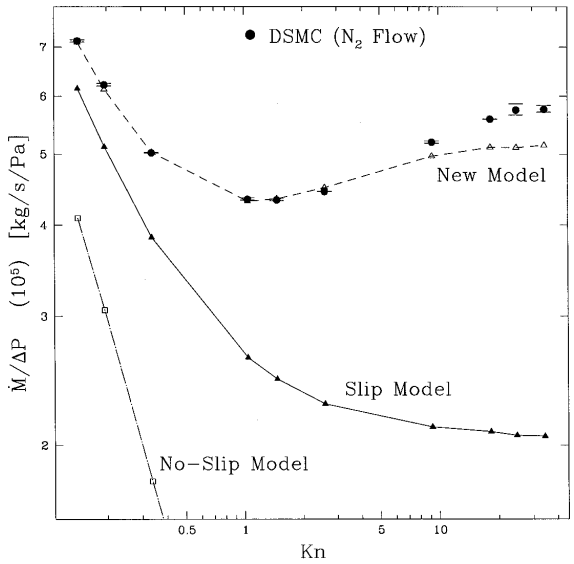


FIGURE 2.6 – Comparaison des différents modèles dans une fente mince par rapport à une simulation par la méthode DSMC, d'après Beskok et Karniadakis (1999). Le « New Model » correspond au modèle phénoménologique d'ordre élevé de Beskok et Karniadakis (1999).

modèle de second ordre (Hsia et Domoto, 1983). Les modèles de Alexander *et al.* (1994) et Hwang *et al.* (1996) tentent de donner une formulation empirique des résultats de FUKUI et KANEKO par ajustement de paramètres numériques, avec plus ou moins de succès selon le régime de raréfaction. Enfin, en se basant sur le concept de viscosité effective en plus d'une vitesse de glissement aux parois, Beskok et Karniadakis (1999) et Sun *et al.* (2003) ont présenté des modèles essentiellement valides pour les régimes modérément raréfiés. La conductance adimensionnelle entre deux plaques planes parallèles et infinies augmente logarithmiquement avec le nombre de KNUDSEN dans le régime moléculaire libre. Cela est reflété dans le modèle de FUKUI et KANEKO et ses « dérivés ». La validité de ce comportement pour des écoulements en fentes lisses reste incertaine. D'autre part, la plupart des modèles présentés précédemment ont été développés en géométrie idéale (plaques lisses parallèles, fentes lisses droites). Leur transposition locale en topographie rugueuse n'est alors pas immédiate. Seul le modèle glissant de premier ordre, dont l'usage est limité jusqu'au régime glissant, mais où son expression y fait consensus semble pouvoir s'y prêter, ce qui fera l'objet du chapitre 3.

2.2.3.2 Extension dans le cas des écoulements en milieux poreux

L'étude de la lubrification en milieu hétérogène évoquée à la fin de la section précédente présente des similitudes avec l'écoulement dans un milieu poreux. À ce titre, des modèles prenant notamment en compte la raréfaction de l'écoulement dans des milieux poreux ont été développés au fil des années et une présentation succincte en est effectuée ci-après.

En 1856, DARCY s'est intéressé à décrire l'écoulement d'eau au travers de filtres à sable (Darcy, 1856), résultant en une loi qui porte aujourd'hui son nom. Cette loi macroscopique relie linéairement la vitesse d'écoulement au gradient de pression et à la viscosité via un coefficient de perméabilité, constant et donc intrinsèque à la micro-géométrie des structures poreuses. Par macroscopique, il faut comprendre invalide à l'échelle du pore mais valable à une échelle légèrement plus grande, celle d'un volume élémentaire représentatif du milieu poreux en question. Les grandeurs intervenant dans la loi de DARCY (vitesse, pression) représentent alors des valeurs moyennes sur ce volume représentatif. Dans le cas d'un écoulement rampant de fluide incompressible sans force volumique externe, la loi de DARCY peut être déduite de l'équation de STOKES microscopique par la méthode de prise de

Référence	Q^*, $\underline{C}$	$\lim_{D\to 0} \underline{C}$
Non glissant	$Q^* = 1$	
	$\underline{C} = \dfrac{D}{6}$	0
Burgdorfer (1959)	$Q^* = 1 + 6\xi\mathrm{Kn}$	
	$\underline{C} = \dfrac{D}{6} + \dfrac{\xi\sqrt{\pi}}{2}$	$\dfrac{\xi\sqrt{\pi}}{2}$
Hsia et Domoto (1983)	$Q^* = 1 + 6\xi\mathrm{Kn} + 6\xi\mathrm{Kn}^2$	
	$\underline{C} = \dfrac{D}{6} + \dfrac{\xi\sqrt{\pi}}{2} + \dfrac{\xi\sqrt{\pi}}{4D}$	$+\infty$
Alexander *et al.* (1994)	$Q^* = 1 + 6A\mathrm{Kn} + \dfrac{12}{\pi}\mathrm{Kn}\ln\left(1 + B\mathrm{Kn}\right)$	
	$\underline{C} = \dfrac{D}{6} + \dfrac{A\sqrt{\pi}}{2} + \dfrac{1}{\sqrt{\pi}}\ln\left(1 + \dfrac{B\sqrt{\pi}}{2D}\right)$	$+\infty$
Beskok et Karniadakis (1999)	$Q^* = (1 + \alpha\mathrm{Kn})\left(1 + \dfrac{6\xi\mathrm{Kn}}{1+\mathrm{Kn}}\right)$	
	$\underline{C} = \dfrac{D}{6}\left(1 + \dfrac{\alpha\sqrt{\pi}}{2D}\right)\left(1 + \dfrac{6\xi\sqrt{\pi}}{2D + \sqrt{\pi}}\right)$	$\dfrac{\alpha\sqrt{\pi}}{12}(1 + 6\xi)$
Hwang *et al.* (1996)	$Q^* = 1 + 6b\left(\dfrac{\sqrt{\pi}}{2\mathrm{Kn}}\right)^c + 6a\mathrm{Kn}$	
	$\underline{C} = \dfrac{D}{6} + bD^{c+1} + \dfrac{a\sqrt{\pi}}{2}$	$+\infty$
Sun *et al.* (2003)	$Q^* = \dfrac{1}{f} + 6\mathrm{Kn} + 6f\mathrm{Kn}^2$	
	$\underline{C} = \dfrac{D}{6f} + \dfrac{\sqrt{\pi}}{2} + \dfrac{\pi f}{4D}$	$\dfrac{11\pi}{12}$

Tableau 2.4 – Expressions de quelques modèles de la littérature pour les facteurs de correction Q^* (première ligne) et des conductances de Poiseuille adimensionnées $\underline{C}$ (seconde ligne).

moyenne volumique (Whitaker, 1999) et prend alors la forme générale ci-dessous :

$$\boldsymbol{v} = -\frac{\boldsymbol{K}}{\mu} \cdot \boldsymbol{\nabla} p \tag{2.38}$$

Dans (2.38), $\boldsymbol{v}$ est le vecteur vitesse de filtration de Darcy, μ la viscosité, p la pression et $\boldsymbol{K}$ est le tenseur de perméabilité intrinsèque du milieu. Pour un milieu homogène et isotrope, ce dernier se réduit à un scalaire et est appelé perméabilité du milieu. La loi de Darcy est établie avec des hypothèses parfois restrictives et des déviations peuvent être observées, ainsi des corrections à cette loi ont été apportées au fil du temps, comme la prise en compte des effets inertiels (Ward, 1964), la compressibilité du milieu ou encore les échanges réactifs entre le fluide et la structure poreuse.

Dans ses travaux, Klinkenberg s'est intéressé aux écoulements gazeux dans des roches poreuses et a observé que la perméabilité du milieu n'était pas un paramètre intrinsèque mais qu'elle dépendait des conditions dans lesquelles l'écoulement était effectué, notamment du niveau de pression (Klinkenberg, 1941). Cette observation était alors différente de celle faite avec des liquides, conduisant à une déviation à la loi de Darcy. Il a expliqué ce phénomène par les effets de raréfaction de l'écoulement et a ainsi proposé un modèle permettant de dissocier la perméabilité intrinsèque du milieu (ou parfois appelée perméabilité liquide) de la perméabilité apparente. Le modèle unidimensionnel proposé est le suivant :

$$K = K_0 \left(1 + \frac{b}{p}\right) \tag{2.39}$$

Dans l'équation (2.39), K est la perméabilité apparente, K_0 la perméabilité intrinsèque, p la pression moyenne dans l'échantillon et b est un coefficient d'ajustement avec les observations expérimentales. Ce coefficient dépend notamment de la nature du gaz et de la structure poreuse de la roche. Certains auteurs le relient de manière empirique avec la perméabilité intrinsèque et/ou la porosité du milieu (voir (Florence *et al.*, 2007) et les références incluses). Le second terme entre parenthèses dans (2.39) fait alors office de correction de glissement et cache implicitement une dépendance vis-à-vis du nombre de Knudsen moyen dans l'échantillon. De plus, la loi (2.39) indique une proportionnalité entre la perméabilité apparente et l'inverse de la pression moyenne. Klinkenberg observe cependant une non-linéarité dans ses expériences, laissant supposer que son modèle reste encore incomplet. Tout comme la loi de Darcy, il est possible de généraliser le modèle de Klinkenberg donné par l'équation (2.39) en un modèle tensoriel à l'aide de la méthode de la prise de moyenne volumique (Lasseux *et al.*, 2014). Les tenseurs de perméabilités obtenus sont alors intrinsèques et en particulier, le tenseur correspondant à b n'est plus empirique mais obtenu par résolution d'un problème de fermeture fonction de la microstructure du milieu poreux uniquement.

Dans le but d'étendre la relation de Klinkenberg à des raréfactions plus importantes, Florence *et al.* (2007) ont proposé une expression de la perméabilité apparente en utilisant le modèle d'écoulement raréfié dans un tube à nombre de Knudsen quelconque développé dans (Beskok et Karniadakis, 1999). La méthodologie employée est alors identique à celle effectuée par Klinkenberg, à savoir considérer le milieu poreux comme un tube équivalent. Le modèle aboutit alors à la formulation non-linéaire suivante, valable *a priori* dans tout le régime de raréfaction :

$$K = K_0 \left(1 + \alpha \mathrm{Kn}\right) \left(1 + \frac{4\mathrm{Kn}}{1 + \mathrm{Kn}}\right) \tag{2.40}$$

avec Kn le nombre de Knudsen moyen et α un paramètre fonction du nombre de Knudsen, qui s'exprime de la façon ci-dessous :

$$\alpha = \frac{128}{15\pi^2} \arctan\left(4\mathrm{Kn}^{0,4}\right) \tag{2.41}$$

Ici, les auteurs expriment le nombre de Knudsen en fonction de la perméabilité intrinsèque, de la porosité et de la pression moyenne en faisant intervenir trois paramètres d'ajustement pour correspondre aux expériences. Ces trois paramètres dépendent en plus du gaz et du milieu étudié, il est alors délicat de considérer le modèle (2.40) comme universel et facilement extrapolable à un milieu quelconque. Comme dans le cas d'un écoulement en fracture, le besoin s'exprime dans le domaine des milieux poreux d'obtenir des modèles d'écoulements dans les régimes fortement raréfiés.

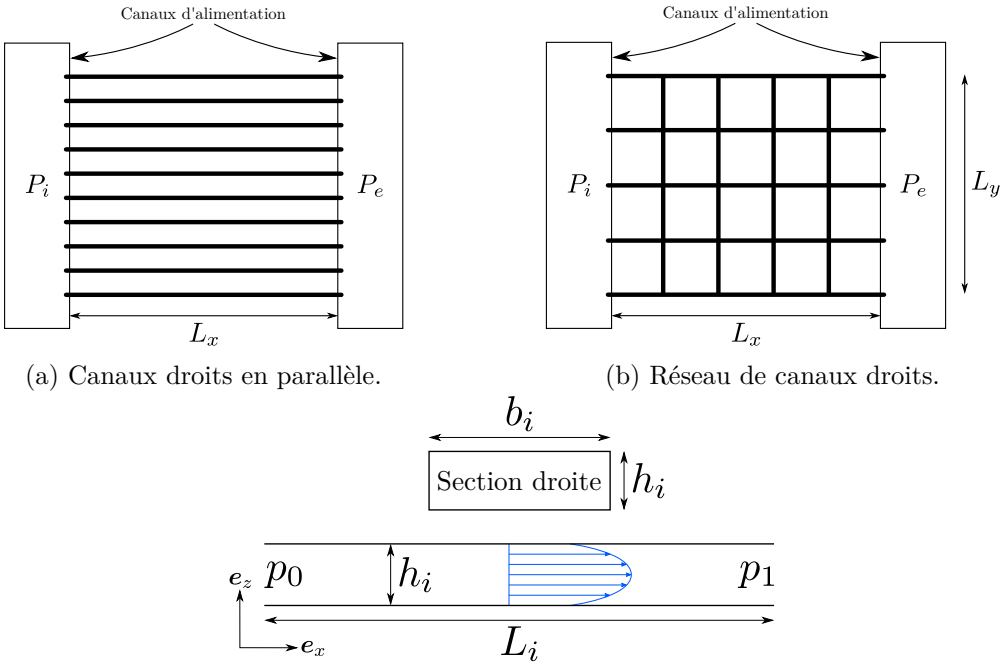
2.3 Les « joints sur puces » : des structures nanofluidiques modèles

Cette section présente les dispositifs nanofluidiques, de leur fabrication jusqu'à la réalisation d'essais expérimentaux de mesure de débit gazeux. Les dispositifs sont gravés sur des puces de silicium, avec des profondeurs allant jusqu'à 500 nm. Ces profondeurs gravées sont choisies pour mimer les dimensions caractéristiques et le caractère hétérogène des passages laissés au fluide à l'interface joint–bride d'un système d'étanchéité réel, et ainsi créer une géométrie modèle idéalisée. Ces dispositifs sont alors baptisés « joints sur puces ».

2.3.1 Présentation et objectifs des dispositifs nanofluidiques

La mise en contact de deux surfaces rugueuses l'une contre l'autre donne lieu à l'apparition de zones de contact (là où les surfaces se touchent), et de zones sans contact. D'un point de vue global, le contact n'est alors en général que partiel. Ces zones sans contact forment une topographie connectée, nommée champ des ouvertures, et dans lequel un écoulement de fluide peut se produire. Dans le domaine de l'étanchéité des joints métalliques, ce champ des ouvertures correspond à l'espace libre persistant à l'interface entre le joint d'étanchéité et la bride en vis-à-vis, et l'écoulement de fluide correspond à la fuite du système, qu'il convient bien souvent de minimiser (voir dans l'introduction). Les surfaces mises en jeu dans ce contact sont typiquement de taille centimétrique, et comportent des détails de rugosité pouvant aller jusqu'à quelques dizaines de nanomètres et moins, elles sont donc de nature multi-échelle. D'autre part, ces surfaces se déforment mécaniquement lors du contact selon un comportement généralement non-linéaire. Le champ des ouvertures est alors le résultat d'un processus mécanique multi-échelle complexe. La connaissance précise de ce champ des ouvertures est en général inaccessible expérimentalement (besoin d'un haut niveau de détails, surfaces métalliques, grandes dimensions). L'approche alors utilisée consiste à passer par la modélisation numérique du contact et de la déformation : en partant d'une mesure de la topographie des surfaces avant contact, les surfaces sont mises en contact jusqu'à un effort de serrage donné, et leur déformation est calculée par la méthode des éléments finis par exemple. Le champ des ouvertures en est déduit et le calcul numérique des écoulements y est réalisé ensuite. La détermination numérique de la fuite d'un assemblage d'étanchéité est donc le résultat d'un processus séquentiel : on calcule d'abord le champ des ouvertures, puis l'écoulement dans ce dernier. Toutefois, la précision des résultats numériques obtenus (par rapport à des résultats expérimentaux sur le même système par exemple) est tributaire de la justesse de la modélisation à chaque étape (partie contact mécanique ou partie écoulement) sans qu'il soit possible d'en distinguer précisément la provenance, en raison du caractère séquentiel de la procédure. Pour l'aspect déformation, les incertitudes proviennent de la mesure des surfaces rugueuses, de la gestion des contacts et du frottement, de la connaissance des lois de comportement des matériaux, en particulier aux très petites échelles (échelle des aspérités inférieure au micromètre), de la méthode numérique utilisée pour la simulation multi-échelle, etc.

Dans le but de se concentrer sur l'aspect écoulement fortement raréfié et de valider



(a) Canaux droits en parallèle.

(b) Réseau de canaux droits.

(c) Géométrie d'un canal droit.

FIGURE 2.7 – Schéma des deux types de puces réalisées. On représente également les canaux d'alimentation aux extrémités des puces, permettant l'apport et l'extraction du gaz.

l'utilisation des modèles présentés dans la section précédente pour la problématique de l'étanchéité, on souhaite s'affranchir au maximum des incertitudes de calcul apportées par l'aspect déformations mécaniques de surfaces rugueuses. Pour cela, on réalise des puces nanofluidiques dont la géométrie gravée est choisie et supposément bien connue, et la gravure maîtrisée. Il s'agit spécifiquement de puces de silicium sur lesquelles sont gravés des canaux droits ou encore des réseaux hétérogènes de canaux droits inter-connectés. Les dimensions gravées de ces géométries modèles idéalisées (dimensions de la puce, largeur, longueur et hauteur des canaux) sont choisies pour être semblables aux caractéristiques géométriques rencontrées dans les champs des ouvertures réels, et pour obtenir un débit de fuite typique de celui des joints d'étanchéité « haute performance » (de l'ordre de 10^{-8} Pa $\cdot$ m^3 $\cdot$ s^{-1} et moins). Des mesures expérimentales et des simulations numériques des écoulements gazeux sont réalisés sur ces « joints sur puce », ce qui sera développé plus en détails dans les sections ci-après. Une condition spécifique de qualification expérimentale des joints d'étanchéité consiste en l'application d'une pression donnée d'hélium d'un côté du joint, tandis que de l'autre côté, une mesure de fuite par spectrométrie de masse est réalisée et produit une condition de vide. Le nombre de KNUDSEN entre les deux côtés varie alors très fortement. On s'attachera particulièrement à répliquer ces conditions sur les puces, afin d'analyser l'impact de cette condition de vide sur le flux global et la capacité des modèles d'écoulement à reproduire ce dernier pour des nombre de KNUDSEN importants, hors de leur domaine de validité *a priori*.

2.3.2 Fabrication de dispositifs nanofluidiques

2.3.2.1 Types de puces réalisées

Dans cette étude, plusieurs puces sont réalisées et que l'on peut regrouper selon deux catégories, présentées sur la figure 2.7 : les puces faites de canaux droits placés en parallèle ; et les puces constituées d'un réseau de canaux droits. D'une puce à l'autre, seule la « partie centrale » est modifiée et constitue la zone d'intérêt. Les canaux d'alimentation placés aux extrémités de la puce permettent l'apport et l'extraction du gaz d'un côté et de l'autre de

celle-ci lors des essais expérimentaux, par application d'une différence de pression. Leurs dimensions sont choisies suffisamment grandes pour que leur résistance à l'écoulement soit faible devant celle de la zone d'intérêt, que l'on souhaite étudier. Un total de dix-neuf puces est alors réalisé, dont on donne le détail des caractéristiques géométriques ci-dessous.

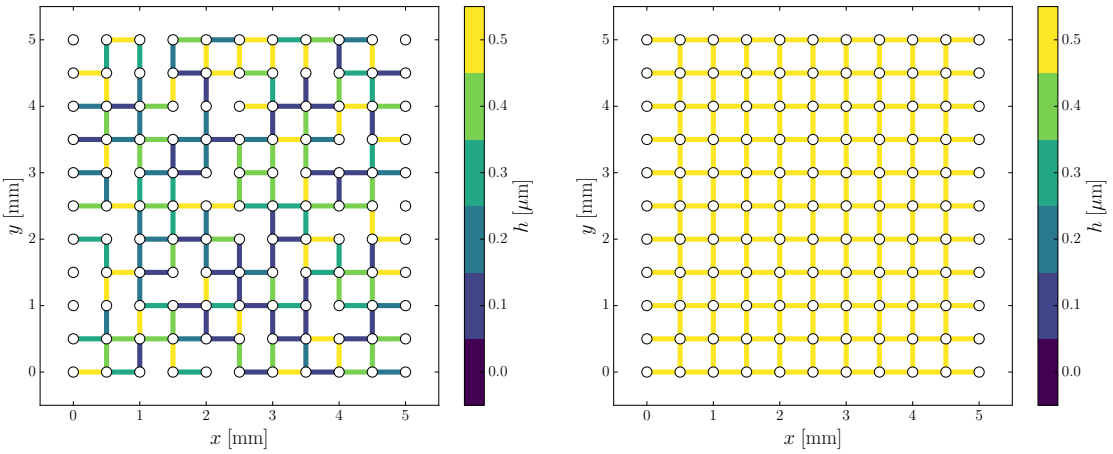
Canaux droits d'ouverture constante Cinq puces constituées de dix canaux d'ouverture constante placés en parallèle sont fabriquées. Pour une puce donnée, tous les canaux ont même géométrie, représentée sur la figure 2.7c. La longueur d'un canal, L_i, est de 500 µm, sa largeur, b_i, de 10 µm et sa hauteur ou profondeur gravée, h_i, est de 100, 200, 300, 400 ou 500 nm selon la puce. Ces dimensions ont notamment été choisies pour avoir $h_i \ll b_i \ll L_i$, afin de considérer l'écoulement comme pleinement développé, et pour pouvoir négliger l'effet des parois verticales sur l'écoulement (fente mince, modélisation par l'équation de la lubrification) (Karniadakis *et al.*, 2005). Le fait d'utiliser dix canaux au lieu d'un seul permettra *a priori* de diminuer la sensibilité à un éventuel défaut de gravure. Ces canaux constituent des « éléments unitaires » des réseaux homogènes et hétérogènes ci-dessous. Les puces fabriquées sont nommées : C100, C200, C300, C400 et C500 selon la profondeur de gravure.

Canaux droits d'ouverture convergente ou divergente On réalise deux puces identiques (pour s'assurer de la répétabilité du processus de fabrication), composées de dix canaux droits en parallèle. La longueur et la largeur des canaux sont identiques au cas précédent. La profondeur gravée, quant à elle, varie linéairement selon la longueur du canal (c'est-à-dire $h_i = h_i(x)$), passant de 200 nm à 500 nm. En valeur absolue, la pente est alors de $6 \cdot 10^{-4}$. Selon le sens de la différence de pression appliquée, la puce se comporte donc vis-à-vis de l'écoulement comme un assemblage de canaux en configuration convergente ou divergente. Selon la configuration, les puces fabriquées sont nommées : CV1, CV2 ou DV1, DV2.

Canaux droits d'ouverture divergente et convergente On produit deux puces identiques avec dix canaux en parallèle d'une longueur de 1 000 µm, double des cas précédents, d'une largeur de 10 µm et d'une profondeur gravée variant linéairement selon la longueur du canal, passant de 200 nm à 500 nm au milieu du canal, puis à nouveau 200 nm. On a donc des canaux divergents puis convergents, de pente identique au cas précédent en valeur absolue. Les puces fabriquées sont nommées : CVDV1 et CVDV2.

Réseau homogène de canaux droits d'ouverture constante Les réseaux homogènes sont constitués de canaux droits d'ouverture constante, tous identiques, et agencés de façon « plan hippodamien » (voir figure 2.8). Chaque réseau est carré, de dimensions 5 mm × 5 mm, et composé de 200 canaux (environ 10 canaux selon les directions x et y). La longueur de chaque canal est de 500 µm, sa largeur de 10 µm et sa profondeur gravée est de 100, 200, 300, 400 ou 500 nm selon les cinq puces fabriquées. Selon la profondeur gravée des canaux, les puces fabriquées sont nommées : R100, R200, R300, R400 et R500.

Réseau hétérogène de canaux droits d'ouverture constante Les réseaux hétérogènes sont semblables aux réseaux homogènes, à la différence que la profondeur gravée de chaque canal du réseau est tirée aléatoirement, selon une loi uniforme discrète. Les six valeurs $\{0; 100; 200; 300; 400; 500\}$ nm de profondeurs sont possibles, la valeur nulle correspondant à l'absence de canal. Cinq réseaux sont réalisés, avec un tirage aléatoire différent et donc une hétérogénéité différente (voir figure 2.8 et annexe A). De tels réseaux permettent alors de mimer un champ des ouvertures joint–bride, de façon idéalisée. Les puces fabriquées sont nommées : R#1, R#10, R#15, R#20 et R#25.



(a) Réseau « R#1 ». (b) Réseau R500.

FIGURE 2.8 – Exemple de deux réseaux, l'un hétérogène et l'autre homogène. La couleur correspond à la profondeur gravée des canaux.

2.3.2.2 Procédure de fabrication des puces

L'ensemble des puces sont fabriquées par les équipes du Laboratoire d'analyse et d'architecture des systèmes (LAAS) à Toulouse, selon un procédé de photolithographie par niveaux de gris développé par NAILLON durant ses travaux de thèse (Naillon, 2016; Naillon *et al.*, 2017). Le choix s'est porté sur ce procédé car il permet de graver des motifs de profondeur variable en une seule passe et en un temps raisonnable. Les dix-neuf puces (chaque puce est un carré de seize millimètres de côté) sont gravées sur un *wafer* (plaque) de silicium de 10 cm de diamètre et 525 µm d'épaisseur. Deux *wafers* sont réalisés pour s'assurer de la reproductibilité des géométries obtenues par le procédé, ils seront par la suite nommés « L070 » et « L107 ». Le processus de fabrication des puces, adapté de Naillon *et al.* (2017), est décrit dans ce qui suit et les étapes majeures sont présentées en figure 2.9.

Tout d'abord, le *wafer* de silicium est exposé à un plasma d'oxygène pour s'assurer de sa propreté et pour favoriser l'adhésion de la résine. Justement, une couche de résine photosensible positive de 1,1 µm d'épaisseur est appliquée sur une face du *wafer* par un procédé d'enduction centrifuge (*spin coating*). Pour réaliser les nano-structures « 2,5D » telles que les canaux droits et les réseaux, la résine est ensuite exposée localement à un rayonnement ultra-violet émis par un LASER sur une machine Kloé Dilase 750. La longueur d'onde de ce dernier est de 405 nm et son diamètre 6 µm, de telle sorte que pour réaliser un canal de 10 µm de largeur, trois passages sont nécessaires dans le sens de la longueur du canal. Ces passages sont effectués avec une vitesse de 6 $\mathrm{mm \cdot s^{-1}}$ permettant un temps d'écriture raisonnable. Pour les canaux avec pente, l'insolation s'effectue en revanche en faisant des passages de LASER dans la direction transverse des canaux, en faisant varier la puissance par palier selon le sens de la longueur. La dose d'exposition va correspondre à l'énergie lumineuse reçue localement par la résine, et cette dose peut être modulée par la puissance du LASER, ce qui, comme nous le verrons, va permettre de contrôler la profondeur gravée dans le silicium. La puissance est alors variée de 10% à 40% de la puissance initiale du LASER (100 mW). Le rayon d'intensité modulée ainsi obtenu est ensuite passé au travers d'un filtre à 1% pour réduire davantage la puissance effectivement reçue par la résine. Une fois insolée, cette dernière est ensuite développée dans une solution de MFCD26 durant 4 s. Avant cela, un recuit (*soft bake*) à 126 °C pendant 5 min est effectué pour obtenir une vitesse de développement proportionnelle à la dose reçue, de façon à mieux contrôler l'épaisseur retirée (Naillon *et al.*, 2017). À ce stade, le motif de la nano-structure est présent dans la résine. Il est alors transféré dans le silicium par une étape de gravure ionique réactive (*reactive-ion etching*, RIE), avec une sélectivité unitaire (vitesse d'attaque de la résine et du silicium identiques), pour en reproduire exactement la structure.

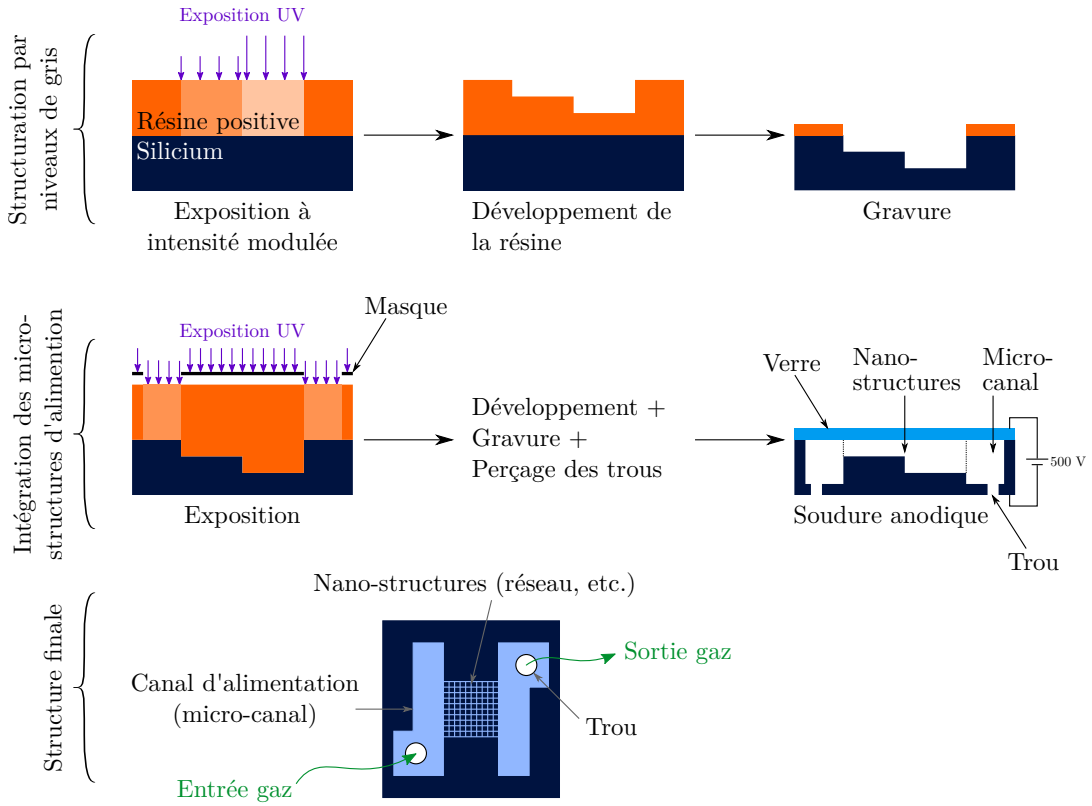


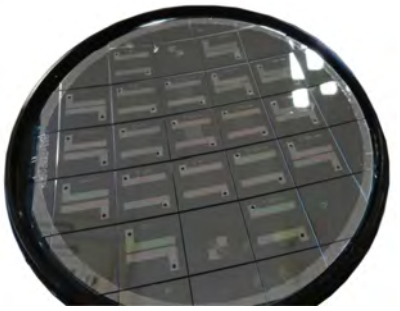
FIGURE 2.9 – Étapes de fabrication des puces nanofluidiques.

Les canaux d'alimentation en gaz sont ensuite réalisés dans une seconde étape, par un processus de photolithographie standard. Une résine photosensible est ré-appliquée et insolée à intensité uniforme au travers d'un masque. Une fois cette résine développée et la gravure réalisée, des canaux d'alimentation de 20 µm de profondeur sont obtenus. Des trous d'accès de diamètre 1 mm sont percés dans les canaux d'alimentation par sablage. Enfin, la puce est fermée par une plaque de verre de 500 µm d'épaisseur, scellée par soudure anodique.

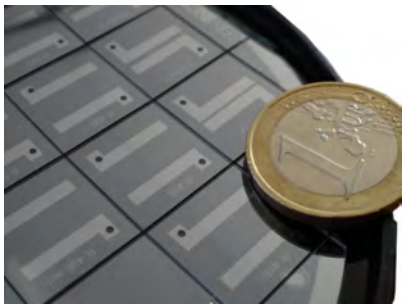
Des illustrations des puces nanofluidiques fabriquées sont présentées sur la figure 2.10. Sur l'image de droite présentant un réseau hétérogène, on distingue très nettement les trous et canaux d'alimentation. Le réseau est moins perceptible en raison de la finesse des canaux qui le composent, mais on en devine l'hétérogénéité.

2.3.2.3 Caractérisation de la géométrie gravée

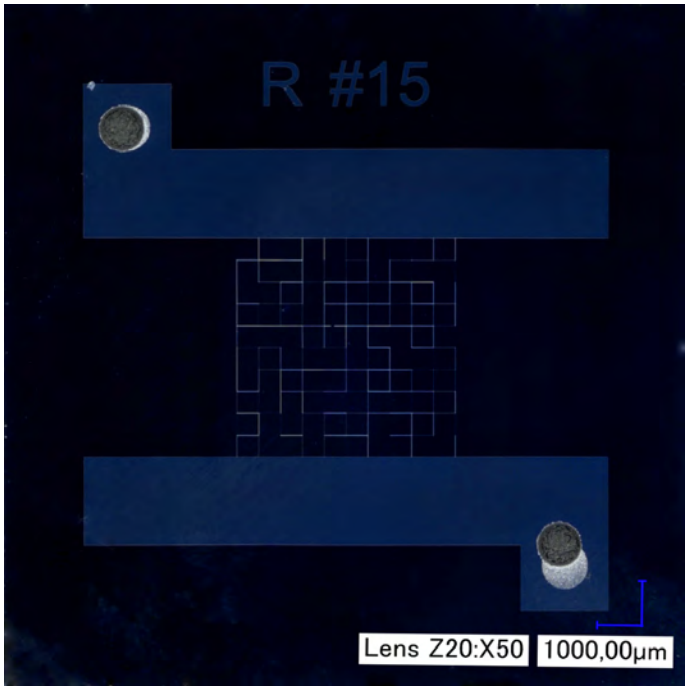
Pour s'assurer de la conformité du procédé, la géométrie gravée des canaux a été caractérisée ponctuellement avant fermeture de la puce par la plaque de verre, en utilisant un profilomètre mécanique ou par la technique de microscopie à force atomique (*atomic force microscopy*, AFM). Les mesures ont été faites par les équipes du LAAS sur les puces de canaux de profondeur constante, les réseaux homogènes et les canaux à profondeur variant linéairement pour les deux *wafers*. Ces mesures sont regroupées dans le tableau 2.5, donnant les profondeurs maximales moyennes et les largeurs moyennes des canaux. On remarque tout d'abord que la hiérarchie entre les différentes profondeurs souhaitées (allant de 100 nm à 500 nm) est maintenue par la gravure. En revanche, des déviations à ces valeurs visées sont observables. En règle générale, les canaux sont gravés plus profondément que désiré, sauf dans le cas des canaux de 500 nm, qui sont généralement moins profonds. Les écarts-types donnés entre parenthèses donnent la dispersion à la valeur moyenne de différentes mesures de profondeur sur une puce. Ces derniers semblent plus importants sur le *wafer* L107, signe d'une moins bonne homogénéité de gravure. Concernant la largeur



(a) *Wafer* complet.



(b) Échelle avec une pièce de 1 €.



(c) Puce réseau hétérogène « R#15 ».

FIGURE 2.10 – Illustrations de quelques puces nanofluidiques fabriquées.

gravée des canaux, elle est en majeure partie proche des 10 µm souhaités. Les canaux les moins profonds semblent avoir une largeur plus faible qu'attendue. Pour les canaux avec pente, la largeur varie le long du canal, augmentant conjointement avec la profondeur. Des mesures similaires ont été réalisées sur les réseaux hétérogènes et montrent une tendance identique aux réseaux homogènes en terme de géométrie gravée.

En plus de la profondeur et de la largeur gravée des canaux, il convient d'inspecter la forme des sections droites de ceux-ci, et de la comparer à la section rectangulaire souhaitée. Les sections mesurées par AFM sont données sur la figure 2.11 en traits pleins, où une couleur représente la section de trois canaux différents sur une puce, ce qui donne une idée de la dispersion. Le pas de mesure est d'environ un point tous les 80 nm selon la largeur du canal, la précision verticale est quant à elle reliée à la courbure de la pointe de l'AFM et est de l'ordre de quelques nanomètres. Les traits pointillés sont les sections rectangulaires visées pour la gravure, de largeur 10 µm et de profondeur variable. On observe alors que la section droite est généralement de forme parabolique plutôt que rectangulaire. On retrouve également les tendances affichées dans le tableau 2.5. Toutefois, la section reste assimilable à une fente de part son rapport d'aspect important. Des sections semblables sont obtenues pour les canaux avec pentes.

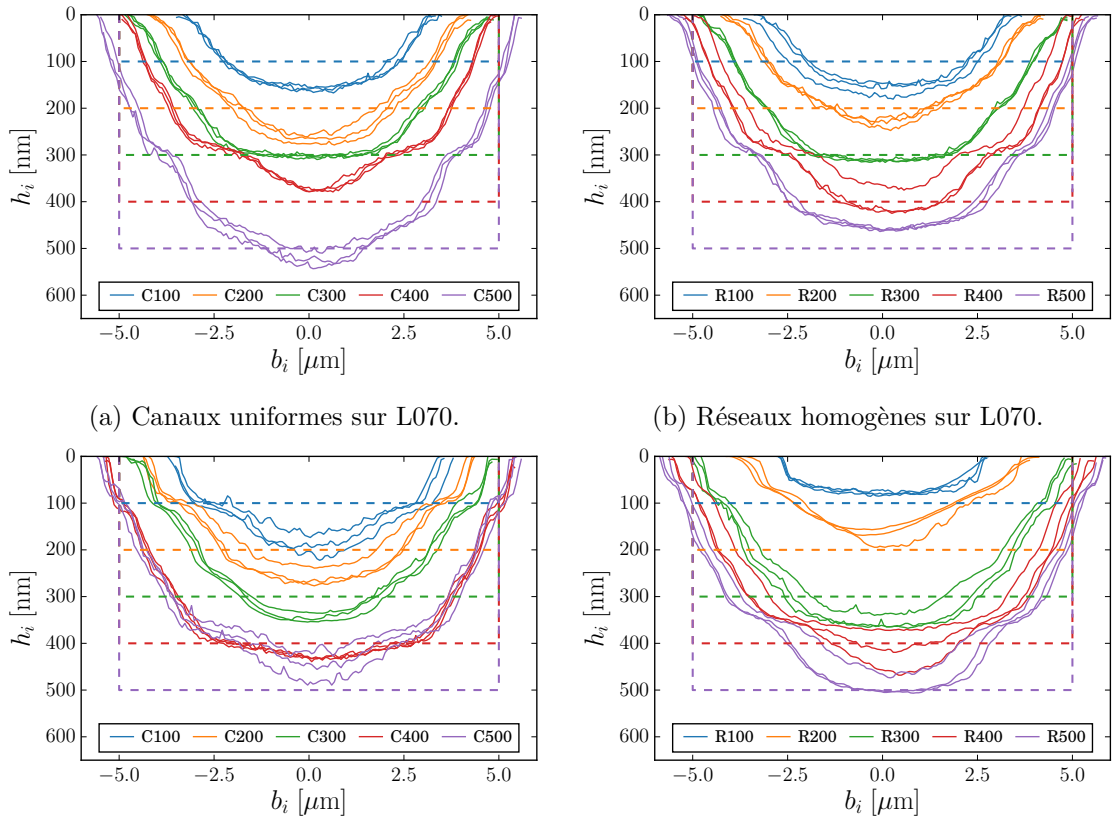
Pour terminer cette section, on présente sur la figure 2.12 un grossissement sur quelques zones des puces du *wafer* L107. En particulier, le point de concours de quatre canaux pour les réseaux homogènes et hétérogènes est exposé. Chaque croisement possède une forme de paraboloïde d'un diamètre de l'ordre de grandeur de la largeur d'un canal. Il est le résultat de la multiple exposition de la résine en cet endroit, et sa profondeur est alors supérieure à celle des canaux avoisinants (de l'ordre du micromètre). Enfin, la couleur donnant une idée de la profondeur gravée, on constate clairement la pente du canal convergent.

2.3.3 Essais expérimentaux d'écoulements gazeux

Des mesures expérimentales de débit de fuite sont réalisées sur les différentes puces au Laboratoire d'Étanchéité maestral. L'objectif de ces essais est de valider l'utilisation

	Wafer L070		*Wafer* L107	
Puce	h_i [nm]	b_i [µm]	h_i [nm]	b_i [µm]
C100	143 (16)	6,5	182 (19)	7,0
C200	261 (9)	8,2	261 (15)	8,5
C300	305 (7)	9,3	359 (15)	9,4
C400	361 (12)	9,7	421 (4)	10,7
C500	504 (14)	9,9	444 (24)	10,9
R100	157 (11)	6,3	78 (4)	5,5
R200	225 (6)	8,2	174 (18)	7,7
R300	308 (2)	9,5	355 (10)	9,8
R400	397 (27)	9,6	418 (42)	10,8
R500	459 (6)	10,6	487 (33)	11,4
CV1	285 – 380 – 473	9,8 – 11,3 – 12,3	240 – 370 – 523	8,7 – 11,0 – 12,0
CV2	268 – 384 – 457	9,5 – 11,2 – 12,9	235 – 340 – 496	8,7 – 10,4 – 12,1
CVDV1	257 – 464 – 266	9,7 – 12,3 – 9,4	269 – 514 – 270	9,4 – 12,1 – 9,1
CVDV2	304 – 460 – 268	10,2 – 12,3 – 9,8	225 – 521 – 276	9,0 – 12,4 – 9,3

TABLEAU 2.5 – Valeurs moyennes mesurées des profondeurs et des largeurs des canaux. L'écart-type est donné entre parenthèses lorsque disponible. Pour les canaux de profondeur avec pente linéaire, les trois valeurs successives correspondent aux positions $x = 0$, $x = L_i/2$ et $x = L_i$ le long du canal.



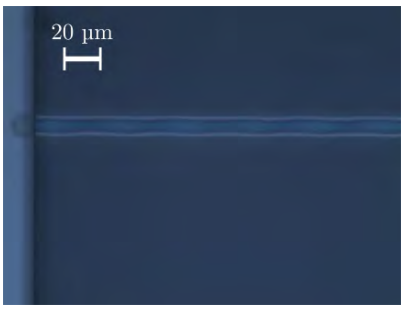
(a) Canaux uniformes sur L070.

(b) Réseaux homogènes sur L070.

(c) Canaux uniformes sur L107.

(d) Réseaux homogènes sur L107

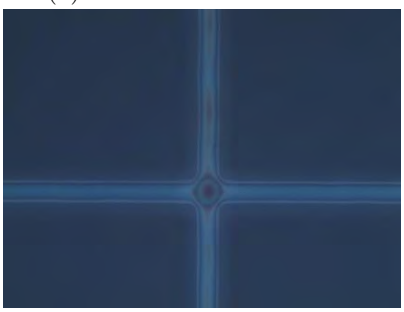
FIGURE 2.11 – Sections droites des canaux mesurées par AFM pour les puces de canaux uniformes et les réseaux homogènes. Les traits en pointillés représentent la section théorique souhaitée.



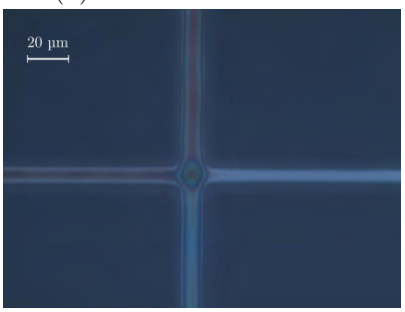
(a) Portion de canal C300.



(b) Croisement sur R100.



(c) Croisement sur R400.



(d) Croisement sur R#1.



(e) Canal CV1.

FIGURE 2.12 – Grossissement sur quelques puces du *wafer* L107. La couleur donne une indication de la profondeur.

des modèles numériques qui seront développés dans la section suivante, et en particulier lorsque le niveau de raréfaction sur la puce est important.

2.3.3.1 Description du montage et protocole expérimental

Les essais réalisés sur les puces sont semblables à ce qui est effectué lors de la qualification expérimentale des joints d'étanchéité : une pression est appliquée d'un côté du montage tandis qu'un spectromètre de masse pompe et mesure en permanence la fuite de l'autre côté. Pour les besoins de son fonctionnement, le spectromètre produit une condition de pression proche du vide de son côté du montage (P_e de l'ordre de 10^{-1} Pa à 10^{-2} Pa). On peut alors s'attendre à ce que le nombre de KNUDSEN varie fortement entre l'entrée et la sortie du système, un impact qu'il reste à quantifier sur le débit total au travers de la puce. Le gaz utilisé lors des essais est de l'hélium, qui est le seul mesurable par le spectromètre utilisé (Adixen ASM 142). Ce gaz est parfait, inerte et de petites taille et masse atomique.

Le montage expérimental présenté schématiquement en figure 2.13 est utilisé. On distingue trois ensembles : l'alimentation en gaz d'un côté de la puce ; la puce comportant les nano-structures ; la mesure de fuite réalisée par le spectromètre de masse, placé de l'autre côté de la puce. L'objectif des essais est alors de mesurer le taux de fuite traversant la puce, $\mathcal{Q}$, en fonction de la pression moyenne sur celle-ci, $\bar{p} = (P_i + P_e)/2 \approx P_i/2$. Pour cela, on décrit le protocole adopté ci-dessous.

1. La puce à étudier est placée dans le support porte-puce, et un léger effort de serrage est appliqué sur celle-ci à l'aide des quatre vis. L'étanchéité entre la puce et le support est assurée par deux joints toriques en élastomère Viton® (diamètre intérieur 2,5 mm, diamètre de tore 1,8 mm), placés au niveau de chacun des deux trous

d'alimentation.

2. Le montage est débarrassé de l'air et de l'hélium résiduels qui y sont présents. Pour cela, toutes les vannes sont ouvertes (V2 à V8) sauf V1, et la pompe à vide évacue le gaz présent dans le montage en abaissant la pression jusqu'à quelques pascals. Le spectromètre est ensuite mis en fonctionnement et restera dans cet état tout au long de l'essai (pompage permanent et mesure de fuite au niveau de la sortie de la puce). On attend alors la stabilisation du signal de fuite qui correspond au bruit de fond du spectromètre (environ 10^{-10} Pa $\cdot$ m$^3 \cdot$ s^{-1}). On ferme alors les vannes V4, V6, V7 et V8. La non-atteinte du niveau de bruit de fond est parfois constatée et est généralement due à un mauvais placement de la puce dans le support, à une mauvaise étanchéité du montage ou à un défaut de la puce. Ces anomalies sont dans ce cas corrigées.
3. Le montage et le réservoir sont mis en pression jusqu'à la pression maximale de l'essai par ouverture de la vanne V1 de la bouteille d'hélium. Cette pression maximale est de 20 bar, soit une pression moyenne maximale d'environ 10 bar. Ensuite, les vannes V1 et V3 sont fermées et un contrôle de la stabilité de la pression sur CP2 et de la fuite sur le spectromètre est réalisé afin de détecter une éventuelle fuite parasite.
4. Les mesures à proprement dites débutent à partir de cette étape. Pour une pression moyenne donnée dont on veut connaître le taux de fuite correspondant, on commence par faire baisser la pression en amont du circuit par pompage de gaz à l'aide de la pompe à vide (ouverture de la vanne V8 et de la vanne de régulation micro-débit VR). Une fois la pression moyenne désirée atteinte, on ferme V8, puis on attend la stabilisation de la pression et de la fuite afin d'avoir une mesure effectuée en « statique ». Le réservoir, d'un volume de 950 ml, placé juste en amont de la puce permet d'avoir un volume « tampon » bien supérieur au volume de la puce et du reste du montage, et de faciliter l'atteinte de la stabilité en pression. Le temps de stabilisation de la pression est plus important à basse pression qu'à haute pression (quelques minutes), ce qui est lié à la technologie des capteurs utilisés. La pression amont est lue sur les capteurs CP2 ou CP3 et CP4 (qui ont une gamme de mesure différente) selon la valeur. Pour une pression amont supérieure à 10^5 Pa, le capteur CP2 est utilisé (réf. Keller LEO 3). Dans le cas contraire, il s'agit des capteurs CP3 et CP4 (réf. Brooks CMC series), par ouverture de la vanne V7.
5. Une fois la mesure de fuite effectuée, une nouvelle mesure est réalisée à une pression moyenne inférieure. La procédure de l'étape 4 est alors exécutée à nouveau. On effectue ainsi une série de mesures par paliers pour plusieurs valeurs de la pression moyenne sur la puce, s'échelonnant d'environ 10^6 Pa à 10^2 Pa.

Il est également possible de réaliser les essais en faisant croître la pression moyenne plutôt qu'en la faisant décroître à chaque palier. Les résultats obtenus sont alors sensiblement identiques. Pour ce qui est des joints toriques en élastomère qui assurent l'étanchéité puce–support, il est observé qu'ils sont suffisamment étanches pour ne pas produire de fuite parasite supérieure au bruit de fond du spectromètre, et qui viendrait court-circuiter la puce. Une autre interrogation qui émerge est celle du temps d'établissement de la fuite stationnaire au sein d'une puce que l'on souhaite mesurer. Dans un canal droit (voir figure 2.7c), ce temps caractéristique d'établissement de la fuite, τ, peut être estimé en régime glissant par l'équation ci-dessous, en adoptant la démarche présentée dans Jannot et Lasseux (2012) à l'équation de Reynolds unidimensionnelle instationnaire (voir chapitre 3, équation (3.31)) :

$$\tau = \mu \frac{h_i {L_i}^2}{K p_0} \tag{2.42}$$

où $K = K_0(1 + 6\xi\overline{\mathrm{Kn}})$ est la transmissivité apparente glissante du canal, $K_0 = h_i^3/12$ la transmissivité intrinsèque du canal et $\overline{\mathrm{Kn}}$ le nombre de Knudsen moyen dans le canal.

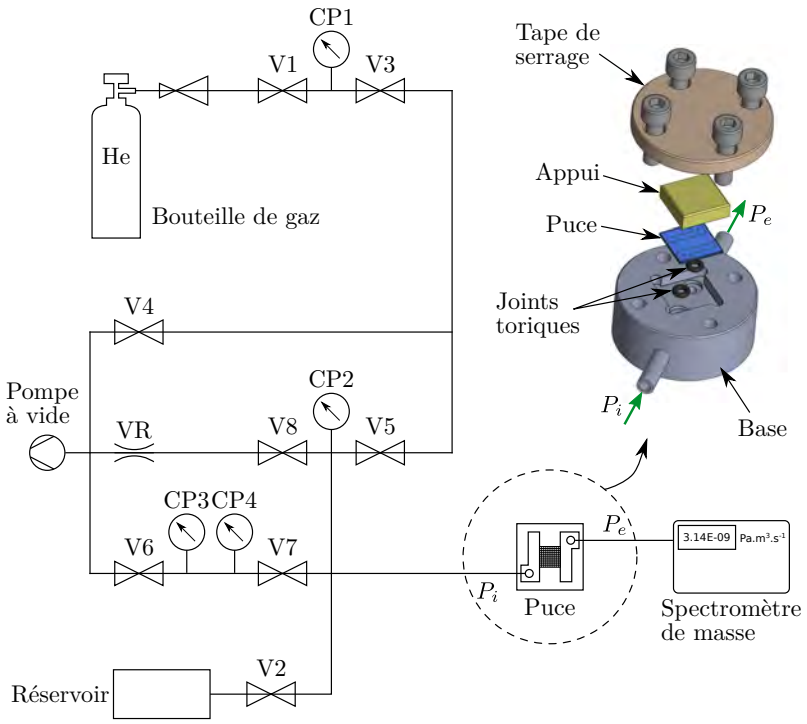


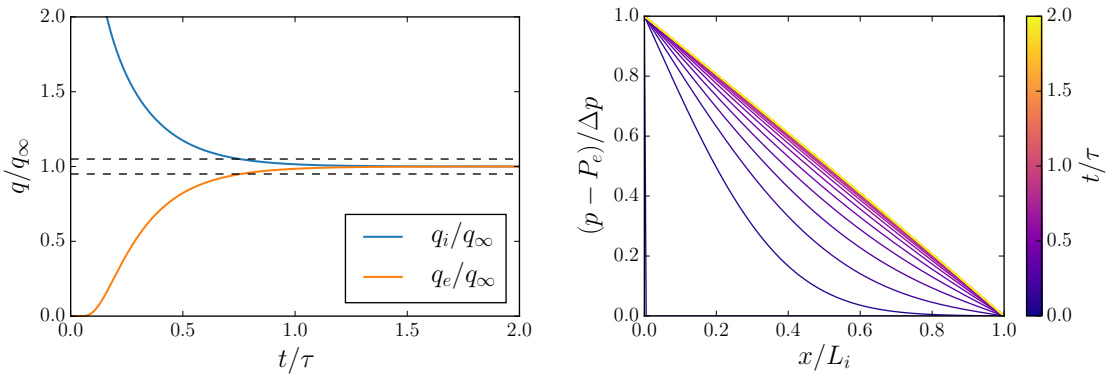
FIGURE 2.13 – Schéma du montage expérimental utilisé pour les essais sur les puces. La vue éclatée présente le support porte-puce dans lequel est placée la puce nanofluidique.

Il est évident par la formule (2.42) que plus l'ouverture du canal sera faible et plus le temps d'établissement sera important, toutes choses égales par ailleurs. La viabilité de la formule (2.42) est justifiée numériquement par simulation de l'écoulement dans un canal droit de type C100, lorsque l'on applique un échelon de pression en entrée. L'écoulement est celui d'hélium à température ambiante, pour une pression d'entrée de l'ordre du bar. Le temps caractéristique est alors estimé à 2 ms seulement. Les résultats présentés de façon adimensionnelle sur la figure 2.14 montrent que le régime établi est bien atteint pour un temps très voisin de τ : les débits entrant et sortant atteignent la valeur stationnaire, de même que le profil du champ de pression le long du canal.

Le temps caractéristique pour un réseau homogène R100, se comportant comme un canal unique, est quant à lui évalué à 240 ms. Bien que n'étant pas des canaux uniques, on peut néanmoins raisonnablement estimer que les réseaux hétérogènes posséderont un temps d'établissement du même ordre de grandeur. Ces temps caractéristiques apparaissent donc relativement faibles et l'aspect transitoire dans la puce semble pouvoir être négligé. Cette hypothèse est par ailleurs vérifiée expérimentalement, le spectromètre fournissant une valeur stable de la fuite de façon quasi-instantanée.

2.3.3.2 Résultats expérimentaux

Les résultats des mesures « brutes », donnant le taux de fuite mesuré au travers de la puce, $\mathcal{Q}$ (en $\mathrm{Pa \cdot m^3 \cdot s^{-1}}$), en fonction de la pression moyenne, $\bar{p}$ (en Pa) sont donnés ci-après pour les différentes familles de puces et pour les deux *wafers*. Pour chaque puce, deux séries de mesures sont réalisées : l'une en faisant diminuer la pression moyenne entre deux points de mesures, l'autre en l'augmentant. Aucune différence notable n'est alors observée entre ces deux manières de procéder. Il arrive que certains résultats ne soient pas présents (par exemple C200 ou R#20 sur L070), ceci en raison d'un défaut ou d'une casse de la puce, ne permettant pas la mesure. De plus, en raison d'une contrainte de temps et de la durée des manipulations (environ une journée par puce), toutes les mesures n'ont pas encore pu être réalisées à ce jour. À ce titre, on ne présente que ce qui est disponible actuellement, qui permet cependant de dégager les tendances.



(a) Débit massique entrant et sortant.

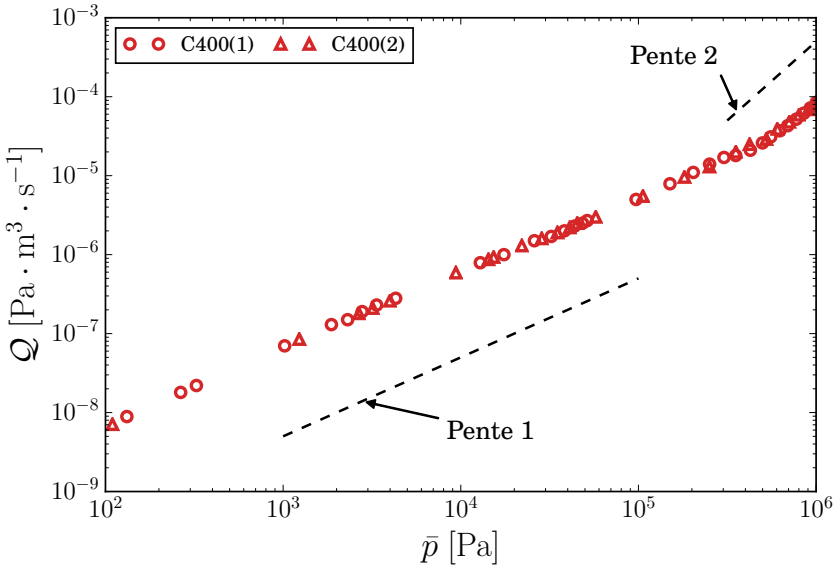
(b) Profil du champ de pression.

FIGURE 2.14 – Évolution temporelle des débits entrant et sortant d'un canal, ainsi que du champ de pression à un échelon en entrée. Le débit stationnaire est noté q_∞, les débits entrant et sortant q_i et q_e respectivement. Les traits pointillés indiquent $\pm 5\%$ de la valeur finale q_∞.

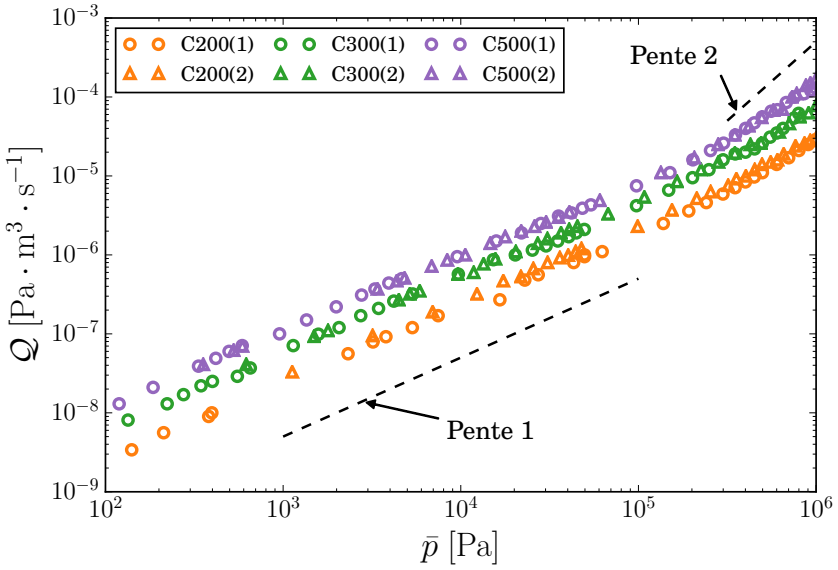
Les figures 2.15, 2.16 et 2.17 présentent respectivement l'évolution de la fuite mesurée pour les canaux droits d'ouverture uniforme, les réseaux homogènes et les réseaux hétérogènes. Comme attendu, on observe une décroissance de la fuite avec la pression moyenne. Une différence d'environ cinq ordres de grandeur entre la fuite la plus forte et la plus faible est observée sur la gamme de pression étudiée. À suffisamment basse pression, cette décroissance s'effectue selon une loi puissance de premier ordre, caractéristique du régime raréfié, tandis qu'à plus forte pression, on commence à entrevoir un comportement du second ordre sur certaines puces, caractéristique du régime hydrodynamique ou glissant proche. Nous verrons d'ailleurs plus loin dans ce chapitre que les nombres de KNUDSEN moyens atteints pour cette gamme de pression vont de $\mathcal{O}\left(10^{-1}\right)$ à $\mathcal{O}\left(10^{3}\right)$ pour la majorité des puces. Pour les canaux droits uniformes et les réseaux homogènes, on observe la hiérarchie attendue, à savoir que plus l'ouverture est grande et plus la fuite est importante à pression donnée. De plus, à profondeur gravée équivalente, les réseaux homogènes présentent comme attendu une fuite environ dix fois plus faible que les canaux droits (les réseaux homogènes se comportent comme onze canaux droits en parallèles, et dix fois plus longs que ceux des puces de canaux droits, leur fuite est donc théoriquement de 11/100 celle des puces de canaux droits). Pour les réseaux hétérogènes, on note également une certaine hiérarchie (ou dispersion) entre les puces qui est due à l'organisation différente des liens dans le réseau (tirage aléatoire différent), menant à une variabilité du comportement. Celle-ci n'est toutefois pas aussi importante que sur les réseaux homogènes (presque deux ordres de grandeur), mais plutôt d'un facteur compris entre deux et trois. En théorie, selon la géométrie des puces, on a la hiérarchie en fuite suivante : R#15 > R#25 > R#20 > R#1 > R#10. Ce classement semble respecté sur le lot L070 sauf pour la puce R#15 qui se retrouve en dernière position. Ceci est possiblement dû à l'écart à l'idéal de la gravure, qui donne un comportement légèrement différent. Enfin, on remarque que tous les réseaux hétérogènes possèdent un comportement global intermédiaire à ceux de R200 et R300.

2.3.4 Modélisation numérique des écoulements gazeux

On s'intéresse dans cette partie à la modélisation des écoulements dans les puces, dans le but de pouvoir comparer les débits totaux au travers des puces à ceux obtenus expérimentalement par la procédure présentée précédemment. Deux approches sont proposées, une approche de type « réseau de pores », et une approche de champ moyen.

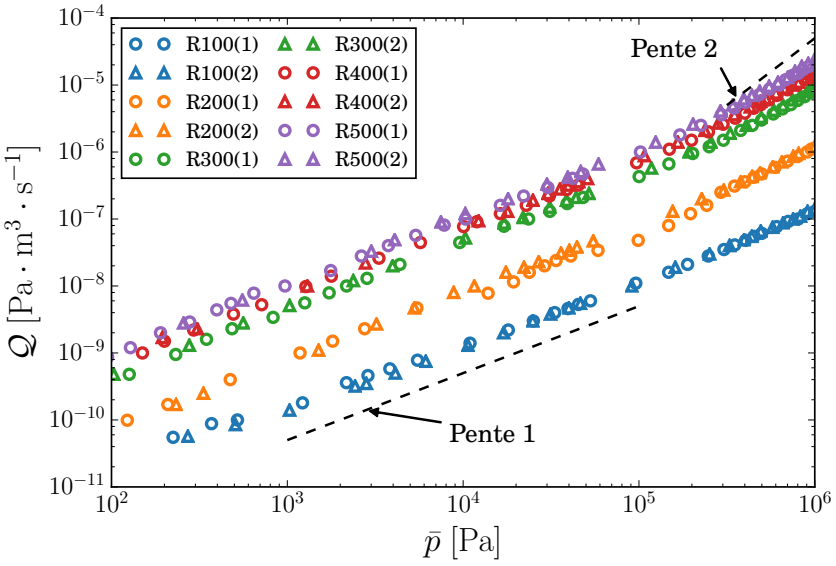


(a) *Wafer* L070.



(b) *Wafer* L107.

FIGURE 2.15 – Débits des canaux droits d'ouverture uniforme.



(a) *Wafer* L107.

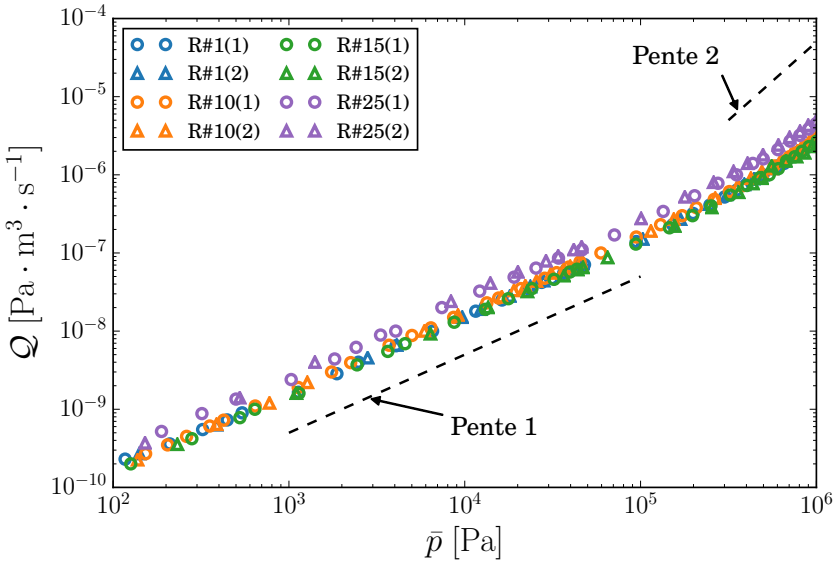
FIGURE 2.16 – Débits des réseaux homogènes.

2.3.4.1 Modélisation de type réseau de pores

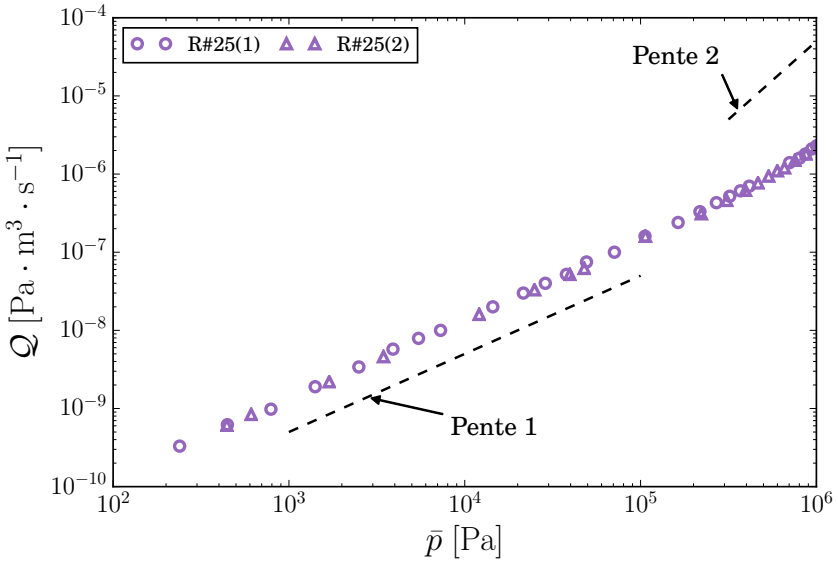
On adopte pour commencer une modélisation de type « réseau de pores » (dans la littérature anglophone, *pore-network modelling*, ou PNM), qui est une approche largement utilisée dans la littérature pour modéliser les écoulements dans les milieux poreux. Sommairement, il s'agit de construire un réseau à partir du squelette poreux du milieu à étudier, et où les nœuds de ce réseau correspondent aux « pores » de la structure, tandis que ses liens connectent deux nœuds et sont affectés d'une propriété de transport. Une telle approche semble, en première instance, appropriée pour l'étude des réseaux de canaux droits, où les nœuds du réseau représenteront les points de concours de quatre canaux, et les liens correspondront aux canaux eux-mêmes. Avant de décrire le modèle de réseau de pores plus amplement, il convient toutefois de définir les propriétés de transport qui seront affectées aux liens. Pour cela, on s'intéresse à un canal droit d'ouverture uniforme (voir figure 2.7c). L'approche est basée sur une modélisation de l'écoulement comme un milieu continu malgré les forts niveaux de raréfaction qui seront atteints, afin d'évaluer les capacités qu'ont ces modèles à décrire le comportement macroscopique d'une puce dans ces conditions (en particulier pour les réseaux hétérogènes). Comme la géométrie du canal est telle que $h_i \ll b_i \ll L_i$, l'écoulement est supposé pleinement développé et l'influence des parois latérales dans une section droite est considérée comme faible. L'écoulement est alors unidimensionnel et décrit par l'équation de la lubrification locale, dont la forme générale est donnée par l'équation (2.31). Le facteur Q^* dépend du nombre de KNUDSEN local et son expression peut être choisie dans le tableau 2.4. On se concentre plus particulièrement sur quatre modèles au domaine de validité en Kn différent :

— Le modèle sans glissement, pour $\mathrm{Kn} \lesssim 10^{-2}$.
— Le modèle avec glissement de premier ordre de Burgdorfer (1959), pour $\mathrm{Kn} \lesssim 10^{-1}$.
— Le modèle phénoménologique de Beskok et Karniadakis (1999), pour $\mathrm{Kn} \lesssim 10^{0}$.
— Le modèle phénoménologique de Alexander *et al.* (1994), supposément valide pour tout le régime de Kn.

Un écoulement se produit lorsque le canal est soumis à une différence de pression $\Delta p_i = p_0 - p_1$ entre ses extrémités, la pression moyenne est alors $\bar{p}_i = (p_0 + p_1)/2$. Le débit massique total au travers du canal, Q_i, est alors relié à la différence de pression par la conductance du canal, C_i, comme :



(a) *Wafer* L070.



(b) *Wafer* L107.

FIGURE 2.17 – Débits des réseaux hétérogènes.

$$Q_i = C_i \Delta p_i \tag{2.43}$$

En utilisant la loi des gaz parfaits et en définissant $\mathrm{Kn} = \lambda / h_i$, où λ est donné par la relation (2.6), le débit total dans le canal s'obtient analytiquement par intégration des lois locales, en utilisant la méthode de séparation des variables. Selon le modèle considéré, on obtient alors l'expression de la conductance du canal :

— Modèle sans glissement

$$C_i^{(0)} = \frac{M}{RT} \frac{{h_i}^3}{12\mu} \frac{b_i}{L_i} \bar{p}_i \tag{2.44}$$

— Modèle glissant de premier ordre (Burgdorfer, 1959)

$$C_i^{(1)} = C_i^{(0)} \left(1 + 6\xi \overline{\mathrm{Kn}_i}\right) \tag{2.45}$$

— Modèle phénoménologique (Beskok et Karniadakis, 1999)

$$C_i^{(BK)} = C_i^{(0)} \left(1 + (\alpha + 6\xi)\overline{\mathrm{Kn}_i} + 6\xi(\alpha - 1)\frac{\bar{p}_i}{\Delta p_i}{\overline{\mathrm{Kn}_i}}^2 \ln\left(\frac{p_0/\bar{p}_i + \overline{\mathrm{Kn}_i}}{p_1/\bar{p}_i + \overline{\mathrm{Kn}_i}}\right)\right) \tag{2.46}$$

— Modèle phénoménologique (Alexander *et al.*, 1994)

$$\begin{aligned} C_i^{(AL)} = C_i^{(0)} \Bigg(1 + 6A\overline{\mathrm{Kn}_i} + \frac{12}{\pi}\frac{\bar{p}_i}{\Delta p_i}\overline{\mathrm{Kn}_i} \Bigg\{ B\overline{\mathrm{Kn}_i} \ln\left(\frac{p_0/\bar{p}_i + B\overline{\mathrm{Kn}_i}}{p_1/\bar{p}_i + B\overline{\mathrm{Kn}_i}}\right) + \\ \frac{p_0}{\bar{p}_i} \ln\left(\frac{p_0/\bar{p}_i + B\overline{\mathrm{Kn}_i}}{p_0/\bar{p}_i}\right) - \frac{p_1}{\bar{p}_i} \ln\left(\frac{p_1/\bar{p}_i + B\overline{\mathrm{Kn}_i}}{p_1/\bar{p}_i}\right) \Bigg\} \Bigg) \end{aligned} \tag{2.47}$$

où $\overline{\mathrm{Kn}_i}$ est le nombre de Knudsen associé à la pression moyenne dans le canal, défini comme :

$$\overline{\mathrm{Kn}_i} = \frac{\mu}{\bar{p}_i h_i} \sqrt{\frac{\pi RT}{2M}} \tag{2.48}$$

On remarque alors que les conductances des modèles sans glissement (2.44) et avec glissement de premier ordre (2.45) ne dépendent que de la pression moyenne $\bar{p}_i$ dans le canal. Quant à elles, les conductances des modèles phénoménologiques (2.46) et (2.47) dépendent non seulement de la pression moyenne mais aussi des pressions elles-mêmes (dépendance en p_0, p_1 et Δp_i).

Les modèles présentés dans les équations ci-dessus donnent la conductance d'un canal droit d'ouverture uniforme, et seront utilisés pour modéliser les écoulements dans les puces de canaux d'ouverture constante ainsi que dans les réseaux homogènes et hétérogènes, en tant que constituant élémentaire du réseau de pores. Pour les canaux avec pente, où l'ouverture varie linéairement dans la longueur, il est généralement impossible de déterminer analytiquement la conductance. Par exemple, en considérant un modèle glissant de premier ordre, la conductance est obtenue de manière implicite par recherche de zéro d'une fonction que nous ne présentons pas ici (Burgdorfer, 1959; Graur *et al.*, 2015). Il est passablement plus commode de déterminer la conductance d'un tel canal numériquement, par une méthode de volumes finis par exemple, c'est l'approche que nous conserverons par la suite pour ces canaux. On peut toutefois expliciter le cas sans glissement qui permet d'exprimer la conductance comme :

$$C_i^{(0)} = \frac{M}{RT} \frac{(h_0 h_1)^2}{6\mu(h_0 + h_1)} \frac{b_i}{L_i} \bar{p}_i \tag{2.49}$$

où h_0 et h_1 sont les ouvertures aux deux extrémités du canal.

On présente maintenant la démarche de réseau de pores à proprement dite, pour modéliser les écoulements dans les réseaux homogènes et hétérogènes. Ces réseaux sont soumis à

des conditions limites en pression à leurs extrémités, P_i et P_e (au niveau des canaux d'alimentation, voir figure 2.7). On définit alors la différence de pression globale sur la puce, $\Delta p = P_i - P_e$, ainsi que la pression moyenne sur la puce, $\bar{p} = (P_i + P_e)/2$. Comme évoqué précédemment, les liens du réseaux correspondent aux canaux et les nœuds, ou pores, aux points de concours de quatre canaux (figure 2.12). Chaque nœud est alors connecté à quatre autres nœuds voisins en ses points cardinaux via les liens (un lien connecte deux nœuds). On fait ensuite l'hypothèse que les pores n'occasionnent aucune perte de charge dans l'écoulement et par conséquent, que la pression y est uniforme. Cela peut se justifier par leur profondeur plus importante que les liens avoisinants. La perte de charge entre deux pores est alors supposée entièrement imputable au lien qui les relie. Pour un nœud donné, on écrit alors la conservation du flux massique provenant des quatre liens qui lui sont connectés :

$$\sum_{i=1}^{4} Q_i = 0 \tag{2.50}$$

Le débit massique dans un lien est donné par le produit de la conductance de ce lien et de la différence de pression entre ses deux nœuds par l'équation (2.43). À ce stade, il convient de préciser que la conductance d'un lien est donnée, au choix, par les équations (2.44), (2.45), (2.46) ou (2.47), selon le modèle examiné. La relation de conservation de la masse précédente s'exprime alors en fonction des pressions nodales comme :

$$(C_n + C_s + C_e + C_o)p_c - C_n p_n - C_s p_s - C_e p_e - C_o p_o = 0 \tag{2.51}$$

où l'indice « c » correspond au nœud central, et les indices « n, s, e, o » aux nœuds placés aux points cardinaux du nœud central. En écrivant ce système pour tous les nœuds du réseau et en tenant compte des conditions limites en pression sur la puce, on aboutit à un système linéaire pour les pressions des nœuds internes du réseau. La résolution de ce système permet alors d'en déduire le débit total Q traversant la puce (on pourrait également en déduire la conductance du réseau, C, telle que $Q = C\Delta p$). D'un point de vue applicatif au domaine de l'étanchéité, il est généralement plus courant d'utiliser le taux de fuite, $\mathcal{Q}$, plutôt que le débit massique Q pour exprimer le flux au travers d'un milieu. Pour un gaz parfait, ces deux grandeurs sont liées par la relation :

$$\mathcal{Q} = \frac{RT}{M} Q \tag{2.52}$$

Enfin, comme la conductance de chaque lien dépend au moins de la pression moyenne entre ses nœuds, le problème est non-linéaire et des itérations sont faites jusqu'à atteinte de la convergence de la solution.

Le modèle de réseau de pores est donc adapté pour modéliser les écoulements dans les réseaux hétérogènes, où la géométrie des canaux varie d'un lien à l'autre. De plus, on peut d'ores et déjà remarquer que de part leur structure, les réseaux homogènes doivent théoriquement se comporter comme onze canaux droits placés en parallèle, car les liens transverses ne sont soumis à aucune différence de pression, ils ne transportent donc pas de fluide.

2.3.4.2 Approximation des milieux effectifs

Une seconde approche consiste en l'utilisation de la méthode des milieux effectifs (*effective medium approximation*, EMA), qui est une méthode de champ moyen pour décrire le comportement global d'un système à partir de la connaissance de ses constituants élémentaires. Cette approche est adaptée lorsque le système étudié est, par exemple, un réseau infini loin de son seuil de percolation (Kirkpatrick, 1973; Koplik, 1981). Citons également son utilisation dans le domaine de l'étanchéité liquide, où le champ des ouvertures

est décrit par un réseau de percolation, et menant à des résultats pertinents (Fluckiger, 2005).

Pour un réseau fait de conductances dont la valeur est distribuée aléatoirement selon une certaine loi de probabilité, l'idée de la méthode est de déterminer une conductance équivalente des liens du réseau, $\bar{g}$, de telle sorte que le comportement moyen du réseau soit inchangé lorsque chacune de ces conductances locales aléatoires est remplacée par $\bar{g}$. Par analogie avec le transport du courant dans un réseau électrique, Kirkpatrick (1973) décrit le raisonnement menant à la détermination de la conductance équivalente de manière auto-cohérente (non présenté ici). La valeur de la conductance équivalente $\bar{g}$ est alors choisie telle que l'équation intégrale (2.53) soit satisfaite, où g est la conductance des liens, de densité de probabilité $f(g)$.

$$\int \frac{g - \bar{g}}{g + \eta\bar{g}} f(g)\,\mathrm{d}g = 0 \tag{2.53}$$

avec $\eta = z/2 - 1$ la coordinance réduite et z la coordinance d'un nœud, c'est-à-dire le nombre de voisins que possède le nœud. Pour les réseaux réguliers de canaux présentés dans ce chapitre, nous avons $z = 4$ et donc $\eta = 1$. Le débit global au travers du réseau constitué de la conductance équivalente $\bar{g}$ sur chacun de ses liens (en bonnes circonstances, $Q = \bar{g}\Delta p$) peut ensuite être comparé aux débits fournis par le modèle de réseau de pores et aux résultats expérimentaux par exemple. L'approche des milieux effectifs permet donc d'estimer aisément la conductance globale d'un réseau à partir de la seule connaissance de la densité de probabilité de la conductance de ses liens.

Les réseaux étudiés dans ce travail sont d'une taille relativement modeste de 200 liens (11 rangés selon y, faites de 10 canaux et 9 rangés selon x, faites de 10 canaux également, voir figure 2.8). Le débit global donné par l'approximation des milieux effectifs souffrira alors passablement d'un effet de taille finie par rapport à celui du modèle de réseau de pores. D'autre part, le calcul numérique de l'intégrale (2.53) nécessite la connaissance de la fonction densité f. Dans le cas d'un problème linéaire (écoulement de liquide par exemple), les conductances des liens sont uniquement fonction de leur géométrie et la densité est alors facilement accessible au préalable (Fluckiger, 2005). Dans le cas d'un problème non-linéaire comme c'est le cas ici pour un écoulement de gaz, les conductances locales sont au minimum fonction de la pression moyenne sur les liens, qui vont varier à l'échelle du réseau (par exemple, deux liens ayant même géométrie mais une pression moyenne différente auront une conductance différente). Cela modifie donc la densité de probabilité par rapport au cas linéaire. Pour pouvoir poursuivre avec l'utilisation de l'équation (2.53), il est nécessaire de faire une estimation de la fonction densité. Dans le cas sans glissement et avec glissement de premier ordre, la variabilité de la conductance des liens n'est due qu'à la variabilité de leurs géométries et de la pression moyenne (voir équations (2.44) et (2.45)). Pour ne conserver qu'une variabilité géométrique (*a fortiori* uniquement une variabilité des profondeurs h_i), on considère que la pression moyenne sur chacun des liens du réseau est identique et égale à la pression moyenne sur la puce (c'est-à-dire $\bar{p}_i = \bar{p}$). Il s'agit là de linéariser le problème. On peut également fournir une estimation haute et basse des conductances en choisissant toutes les pressions moyennes sur les liens comme la pression interne ($\bar{p}_i = P_i$) ou externe ($\bar{p}_i = P_e$) respectivement. La densité de probabilité est donc celle d'une loi uniforme discrète pour les six profondeurs (de 0 nm à 500 nm), donnée par l'équation (2.54) :

$$f(g) = \frac{1}{6}\sum_i \delta(g - g_i) = \frac{1}{6}\left(\delta(g) + \delta(g - g_{100}) + \cdots + \delta(g - g_{500})\right) \tag{2.54}$$

où δ est la distribution de Dirac et g_{100} est la conductance d'un lien de profondeur 100 nm (de même pour les autres profondeurs). Selon le modèle utilisé, les conductances g_i correspondent bien entendu aux équations (2.44) où (2.45). Pour les modèles phénoménologiques, la conductance dépend, en plus, des pressions absolues sur les liens (voir

équations (2.46) et (2.47)). Contrairement au cas précédents, on ne peut pas choisir une fonction densité de façon objective. Ces cas ne sont pas traités par la suite.

Pour illustrer la méthode des milieux effectifs, on la compare au modèle de réseau de pores sur les réseaux homogènes et hétérogènes, en utilisant un modèle glissant de premier ordre comme loi de conductance (équation (2.45)). Pour cela, on considère un écoulement d'hélium à température ambiante, on fixe la pression externe sur la puce à $P_e = 1$ Pa et on fait varier la pression interne P_i de façon à ce que la pression moyenne sur la puce $\bar{p}$ s'échelonne de 10^4 Pa à 10^6 Pa (conditions proches des essais expérimentaux). Les résultats sont présentés sur la figure 2.18. Les traits pleins donnent la conductance du réseau obtenue par le modèle de réseau de pores en fonction de la pression moyenne. Les traits pointillés sont les résultats obtenus par milieux effectifs lorsque l'on considère que chaque lien voit la pression moyenne. Les zones colorées correspondent aux estimations haute et basse de la méthode des milieux effectifs (en considérant que chaque lien est soumis à une pression moyenne égale à P_i ou P_e respectivement).

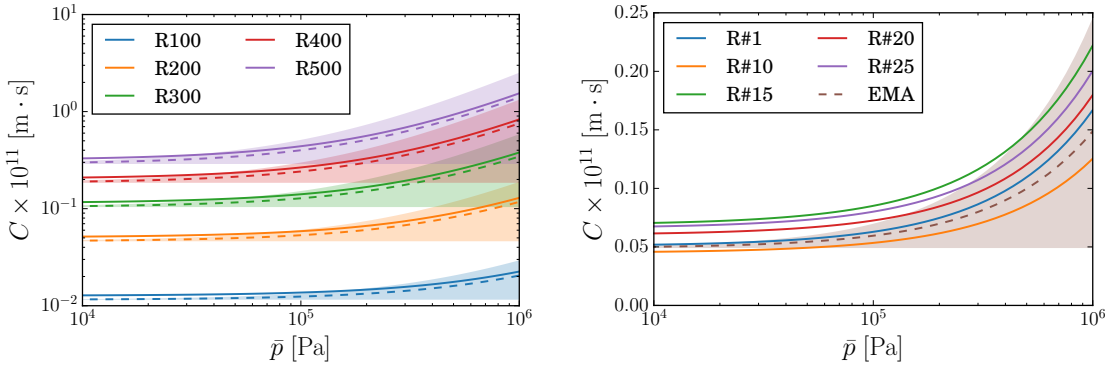
Pour tous les réseaux homogènes, on observe que la méthode des milieux effectifs est en bon accord avec le modèle de réseau de pores. Un écart permanent de 10% entre les deux modèles est constaté pour chaque réseau. Il est en grande partie dû à un effet de taille finie du réseau. Pour corriger cet effet, on prend en compte la géométrie réelle du réseau où chaque lien possède la conductance $\bar{g}$, le réseau se comporte alors comme 11 rangées de canaux droits, chacun constitué de 10 conductance de valeur $\bar{g}$. La conductance apparente du réseau n'est plus simplement $\bar{g}$ mais $11\bar{g}/10 = 1{,}1\bar{g}$. Cette correction permet de réduire l'écart entre PNM et EMA à seulement 1% au maximum sur la gamme de pression étudiée (écart maximal obtenu à forte pression). Ce reliquat est dû à la non-linéarité plus importante de l'écoulement à forte pression (fort Δp) qui n'est pas correctement captée par l'EMA (bornes haute et basse très éloignées par rapport à la valeur moyenne en traits pointillés).

Pour les réseaux hétérogènes, on observe tout d'abord un comportement différent entre les réseaux, en raison de la variabilité dans l'hétérogénéité des liens (réalisations aléatoires différentes des structures). Le flux est tantôt gouverné par des passages préférentiels très conducteurs ou peut, à l'inverse, ne pas être très conducteur dans sa globalité, d'où la variabilité observée. Le milieu effectif se comporte comme un modèle « moyen » et reste en accord raisonnable avec les modèles de réseau de pores, l'écart minimal est de 5% pour R#1, l'écart maximal de 30% pour R#15. Ces écarts relativement importants sont dûs à la petite taille des réseaux et à leur forte hétérogénéité dans le comportement. Augmenter la taille des réseaux (le nombre de liens) aura pour effet d'estomper cette variabilité et de se rapprocher du comportement moyen donné par les milieux effectifs.

En conclusion, on peut dire que la méthode des milieux effectifs donne une bonne approximation du comportement des réseaux par rapport au modèle de réseau de pores. Pour l'estimation des conductances, l'utilisation d'une pression moyenne unique (celle vue par la puce) semble fournir une appréciation correcte de la conductance globale du réseau. Il est envisageable de coupler l'EMA à un processus itératif qui permette d'estimer des pressions moyennes locales des liens, et donc une fonction densité des conductances plus représentative. D'autre part, la petite taille des réseaux introduit des effets très visibles sur la conductance apparente globale. Dans le cas des réseaux hétérogènes, on a donc une variabilité importante entre les réseaux de pores et le milieu effectif. La petite taille des réseaux fait également que le calcul direct par réseau de pores n'est pas très coûteux, rendant la méthode des milieux effectifs moins attractive ici. On conservera seulement cette première approche par la suite.

2.3.5 Confrontation des résultats numériques et expérimentaux

On compare maintenant les résultats expérimentaux aux différents modèles d'écoulements présentés dans la section précédente. Pour les canaux droits d'ouverture uniforme,



(a) Réseaux homogènes.

(b) Réseaux hétérogènes.

FIGURE 2.18 – Comparaison numérique des conductances des puces réseau par modèle de réseau de pores (traits pleins) et milieux effectifs (traits pointillés et zones colorées) pour le modèle glissant de premier ordre. Les zones colorées représentent les bornes supérieures et inférieures de l'approximation des milieux effectifs.

les modèles numériques correspondent directement aux lois (2.44), (2.45), (2.46) et (2.47) pour dix canaux en parallèle. Pour les réseaux, ces lois « élémentaires » sont mises en œuvre dans le modèle de réseau de pores. Les résultats sont donnés sous forme de conductance adimensionnelle, $\underline{C}$, en fonction du nombre de KNUDSEN moyen sur la puce, $\overline{\mathrm{Kn}}$. Pour cela, la conductance adimensionnelle est définie de façon similaire à l'équation (2.33) pour le taux de fuite, ce qui donne :

$$\underline{C} = \frac{\mathcal{Q}}{{h_0}^2 \Delta p} \sqrt{\frac{2M}{RT}} \frac{L_x}{L_y} \tag{2.55}$$

où h_0 est choisie comme l'ouverture intrinsèque caractéristique de la puce, distance séparant deux plaques planes ayant la même transmissivité intrinsèque que la puce, K_0. Pour les réseaux, la transmissivité intrinsèque est calculée par simulation sur la géométrie idéale des puces (sans considérer les formes réelles des sections de types paraboles, etc.), on a alors $h_0 = \sqrt[3]{12 K_0}$. Les valeurs sont données dans le tableau B.1 de l'annexe B. Pour les canaux droits d'ouverture uniforme, h_0 correspond directement à leur ouverture géométrique. On donne également la définition du nombre de KNUDSEN moyen sur la puce, associé à l'ouverture caractéristique et à la pression moyenne sur celle-ci :

$$\overline{\mathrm{Kn}} = \frac{\mu}{\bar{p} h_0} \sqrt{\frac{\pi RT}{2M}} \tag{2.56}$$

Dans les simulations, le coefficient d'accommodation tangentielle pour de l'hélium sur une surface en silicium est choisi à $\sigma_v = 0{,}92$ (soit $\xi = 1{,}17$), valeur moyenne obtenue par Hadj Nacer (2012) dans ses travaux présentés au début de ce chapitre.

Une partie des résultats sont présentés sur la figure 2.19, les courbes en traits pleins représentent les résultats obtenus par simulation numérique et les points sont les mesures expérimentales. Le reste des résultats est donné dans l'annexe B.

Dans l'ensemble, on constate que les résultats expérimentaux sont en relativement bon accord avec les simulations incluant du glissement. En particulier, à $\overline{\mathrm{Kn}}$ suffisamment élevé, le modèle sans glissement (courbe noire) sous-estime grandement la conductance expérimentale (de plusieurs ordres de grandeur), ce qui montre la nécessité de tenir compte du glissement dans la modélisation.

Pour les canaux droits d'ouverture uniforme, on remarque que les mesures se situent généralement entre le modèle de premier ordre et le modèle phénoménologique de Beskok et Karniadakis (1999). On observe très nettement un minimum de la conductance pour $\overline{\mathrm{Kn}} \approx 1$, ainsi que l'indépendance de la conductance vis-à-vis de $\overline{\mathrm{Kn}}$ lorsque celui-ci est

grand. À plus faible $\overline{\mathrm{Kn}}$, on note une hausse de la conductance qui spécifie l'atteinte du régime glissant. La variation de la conductance est alors similaire à celle offerte par le modèle phénoménologique Beskok et Karniadakis (1999).

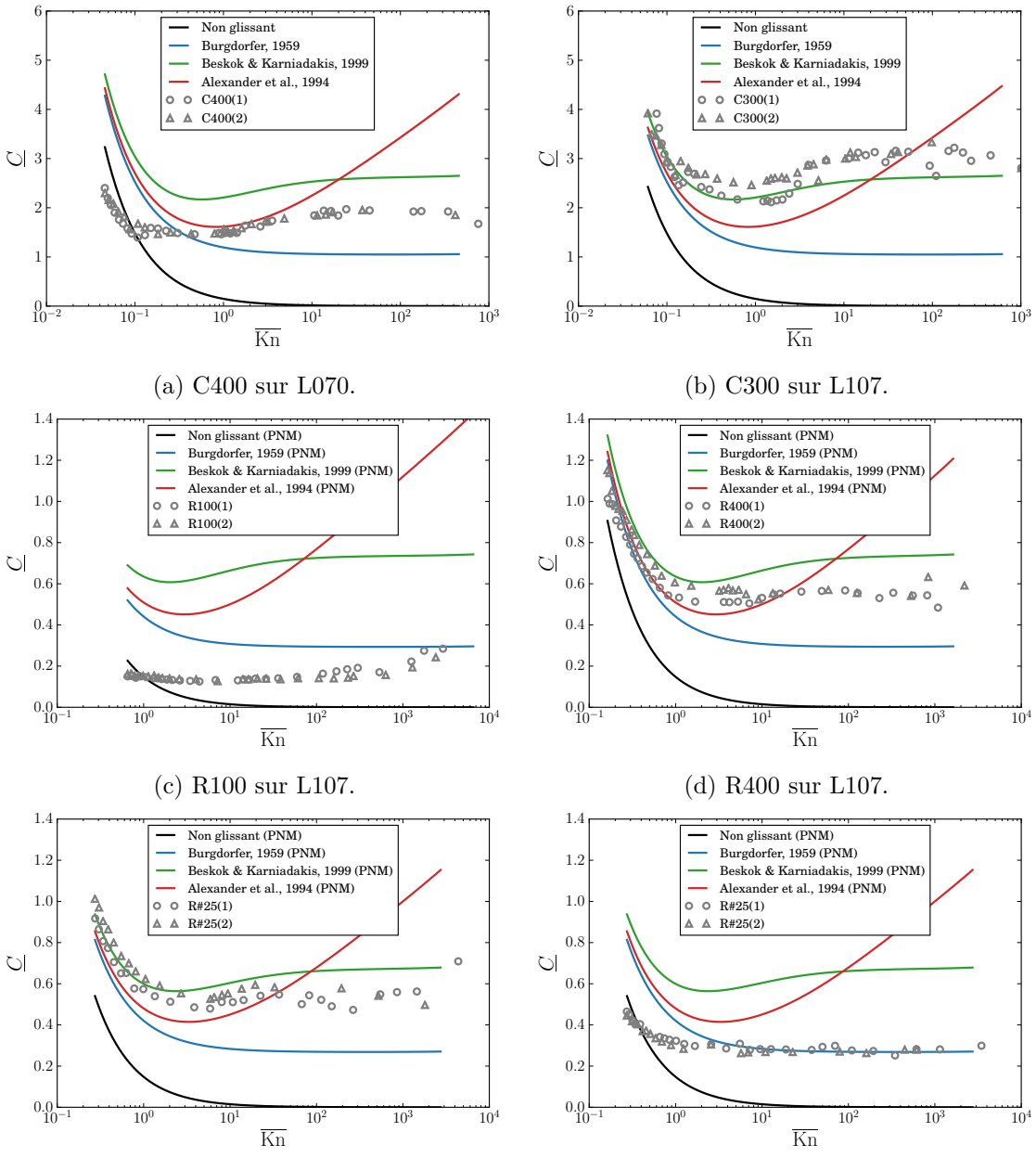
Dans le cas des réseaux homogènes, le minimum de conductance n'est pas clairement observé expérimentalement comme pour les canaux droits. Il s'agit là possiblement d'un effet « réseau » (présence des nœuds), qui rend le comportement global différent de celui des canaux droits seuls. En revanche, à forte raréfaction, la conductance est là aussi constante. Les réseaux d'ouverture supérieure à 300 nm permettent également d'atteindre le régime glissant où se rejoignent tous les modèles, cela permet leur validation. Les réseaux R100 et R200 montrent un comportement différent, de conductance quasi-constante et inférieure à celle prédite par le modèle de premier ordre. Cela peut possiblement s'expliquer par la gravure qui est beaucoup moins large et profonde qu'attendue (voir figure 2.11). Quelle que soit la pression, l'écoulement reste alors assez raréfié et les simulations vont surestimer la fuite car elles sont réalisées sur les géométries idéales.

Les réseaux hétérogènes se comportent de façon similaire aux réseaux homogènes, on n'observe pas clairement de minimum et la conductance tend à devenir constante à fort Knudsen. Les figures 2.19e et 2.19f permettent de comparer le comportement du réseau R#25 sur les deux *wafers*. On constate alors une différence notable, la fuite étant plus faible sur le *wafer* L107. Ceci est donc imputable à la gravure.

Les résultats ont permis de montrer que d'un point de vue macroscopique, la fuite dans les différentes puces est raisonnablement bien décrite par les modèles glissants proposés, au moins en terme de l'ordre de grandeur, et ce malgré la raréfaction importante atteinte, bien au-delà de leurs domaines de validité respectifs. Généralement, le modèle glissant de premier ordre sous-estime la fuite expérimentale. Compte tenu de la forte variation locale du nombre de Knudsen sur la puce, on peut poser la question de la représentativité de l'utilisation du nombre de Knudsen moyen, $\overline{\mathrm{Kn}}$, pour quantifier la raréfaction sur celle-ci. En raison de la forme des sections d'aspect parabolique plutôt que rectangulaire (voir figure 2.11), et de la largeur généralement plus faible, il est possible que les simulations réalisées donnent un débit légèrement plus important qu'il ne le serait avec la géométrie réelle. Il faudrait alors intégrer cette géométrie réelle dans les modèles, bien que nous ne disposions que de quelques échantillons sur certaines puces seulement. Il serait également d'intérêt de modéliser les écoulements au travers des puces par des méthodes adaptées à la forte raréfaction (DSMC, etc.).

2.4 Conclusions

Ce chapitre a tout d'abord présenté une revue de la littérature sur les gaz raréfiés, en particulier dans le régime glissant où l'on a introduit différents modèles de conditions aux limites de glissement aux parois, pour des géométries de type canaux droits. Il a également été présenté des études s'attachant à la détermination du coefficient d'accommodation pour différents couples gaz/surface. Dans l'objectif de valider l'utilisation de modèles glissants en fracture rugueuse et dans des conditions de forte raréfaction (entrée à pression donnée et sortie proche du vide), des puces nanofluidiques en silicium sont fabriquées par un procédé de photolithographie par niveaux de gris. Les structures gravées sont notamment de type canaux droits ou réseaux hétérogènes de canaux droits, et leur structure est relativement bien maîtrisée. La caractérisation des structures gravées a toutefois montré que les sections droites des canaux sont de forme parabolique au lieu de rectangulaire, et que leur largeur est, dans l'ensemble, légèrement plus petite que prévue. Les essais expérimentaux de mesure de débit gazeux au travers des puces sont réalisées et comparées à des simulations numériques par réseau de pores. Les régimes d'écoulements moyens s'étendent du régime glissant au régime moléculaire libre. On montre alors que dans l'ensemble, les modèles répliquent de manière satisfaisante le comportement global des puces quel que soit le régime. Cela laisse entrevoir l'utilisation de tels modèles dans



(a) C400 sur L070.

(b) C300 sur L107.

(c) R100 sur L107.

(d) R400 sur L107.

(e) R#25 sur L070.

(f) R#25 sur L107.

FIGURE 2.19 – Comparaison des résultats expérimentaux (points gris) aux différents modèles (traits pleins).

des fractures rugueuses par la suite. Des améliorations restent cependant à apporter, en commençant par l'intégration au mieux de la géométrie réelle gravée dans les modèles, et la validation par des méthodes adaptées aux régimes très raréfiés.

Chapitre 3

Application au problème de l'étanchéité

Les stratégies utilisées pour modéliser l'écoulement faiblement compressible d'un gaz en fracture rugueuse, en présence d'une condition limite de glissement aux parois sont présentées dans ce chapitre. Dans un premier temps, le développement de l'équation de Reynolds avec une correction de glissement de premier ordre à l'échelle microscopique est présenté. Ensuite, un changement d'échelle est effectué, permettant le passage d'une description microscopique de l'écoulement à l'échelle macroscopique. Enfin, un méthode à deux échelles permettant de déterminer la transmissivité de la fracture entière est exposée.

3.1 Modèle d'écoulement à l'échelle microscopique

La mise en contact de deux surfaces rugueuses ne permet généralement pas d'obtenir un contact parfaitement conforme, laissant ainsi des espaces libres entre ces dernières. Une telle structure est bien souvent appelée fracture, ou champ des ouvertures. Une fracture rugueuse réelle est usuellement caractérisée par une microstructure géométrique hétérogène constituée de zones ouvertes, d'aspect multi-échelle, ainsi que de zones de contact, d'ouverture nulle. La nature multi-échelle de la topographie rend la modélisation des écoulements de fluide assez complexe. En effet, le domaine d'étude peut avoir des dimensions centimétriques ou plus, tout en contenant des détails d'ordre micrométriques ou moins et ayant un impact important sur le transport global de fluide (Lorenz et Persson, 2009; Dapp et Müser, 2016). Pourtant, la connaissance de cette propriété de transport (idée de perméabilité du milieu) représente un enjeu crucial dans certaines applications industrielles, pouvant déterminer la viabilité de tout le processus en question. On peut citer par exemple, dans le cas des roches fracturées, la récupération de fluide dans ces fractures, ou encore la capacité d'une formation rocheuse à être imperméable pour former une couverture de roche réservoir (Mourzenko *et al.*, 1995; Berkowitz, 2002). Un autre exemple d'intérêt particulier dans ce travail est le cas des joints d'étanchéité métalliques qui interviennent, entre autres, dans la conception des réacteurs nucléaires ou pour les applications d'ultravide (Lefrançois, 2004).

La plupart des travaux de la littérature s'intéressent à l'écoulement de liquide incompressible (Marie *et al.*, 2003; Marie et Lasseux, 2007; Vallet *et al.*, 2009; Ledoux *et al.*, 2011; Pérez-Ràfols *et al.*, 2016a). Dans ce travail, nous nous attacherons cependant au cas d'un écoulement de gaz. Lorsque l'ouverture de la fracture est comparable au libre parcours moyen du gaz, des effets de raréfaction (ou effet Knudsen) apparaissent, ce qui peut modifier de manière importante les propriétés de transport de masse, de quantité de mouvement ou de chaleur à travers le champ des ouvertures. Cet effet est quantifié par le nombre de Knudsen, Kn, rapport du libre parcours moyen du gaz et d'une ouverture caractéristique. Dans le régime glissant, il est possible de prendre en compte cet effet en conservant une description continue du milieu par les équations classiques de Navier-Stokes, mais en introduisant une condition limite de glissement du fluide aux parois de la fracture. Une telle situation a été particulièrement étudiée pour des applications microfluidiques en géométrie idéale (tubes, canaux droits) (Porodnov *et al.*, 1974; Arkilic *et al.*,

1997; Beskok et Karniadakis, 1999; Dongari *et al.*, 2007; Cai *et al.*, 2007) ou pour l'écoulement de gaz en milieu poreux (Klinkenberg, 1941; Skjetne et Auriault, 1999; Lasseux *et al.*, 2014, 2016). Cette approche est employée et développée au cas d'une fracture dans la suite de cette section.

3.1.1 Analyse en ordre de grandeur et simplification des équations

On considère l'écoulement instationnaire, isotherme et barotrope d'un fluide newtonien faiblement compressible dans une fracture faite de deux surfaces rugueuses. L'écoulement est alors décrit par le problème (3.1) (Landau et Lifshitz, 1989) dans lequel l'équation (3.1a) est la conservation de la masse, (3.1b) la conservation de la quantité de mouvement (Navier-Stokes), (3.1c) la loi d'état du gaz et (3.1d) la condition limite de glissement de premier ordre.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \boldsymbol{v}) = 0 \qquad \text{dans } \Omega_\beta \qquad (3.1a)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\nabla}) \boldsymbol{v} \right) = -\boldsymbol{\nabla} p + \mu \boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{v} + \left(\zeta + \frac{1}{3} \mu \right) \boldsymbol{\nabla} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{v}) + \rho \boldsymbol{f} \qquad \text{dans } \Omega_\beta \qquad (3.1b)$$

$$\rho = \varphi(p) \qquad \text{dans } \Omega_\beta \qquad (3.1c)$$

$$\boldsymbol{v} = -\xi \lambda \boldsymbol{n} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \right) \cdot (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}) \qquad \text{sur } \mathcal{A}_{\sigma\beta} \qquad (3.1d)$$

Dans le problème (3.1), Ω_β désigne le domaine occupé par le fluide, $\mathcal{A}_{\sigma\beta}$ est l'interface entre le fluide et le solide. D'autre part, ρ et p sont respectivement la masse volumique et la pression du fluide, μ est la viscosité dynamique (considérée comme uniforme), ζ est la seconde viscosité et $\boldsymbol{v}$ est le vecteur vitesse, dont les composantes sont notées (u, v, w) dans la base orthonormale $(\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{e}_z)$ selon les conventions de la figure 3.1. Enfin, t désigne le temps et $\boldsymbol{f}$ les forces à distance. Une condition limite de glissement de premier ordre (3.1d) à l'interface fluide-solide est utilisée, rendant le vecteur vitesse localement tangent à la paroi et proportionnel au vecteur des taux de déformations (Lauga *et al.*, 2007). Dans cette équation, $\boldsymbol{I}$ est le tenseur identité, $\boldsymbol{n}$ est le vecteur normal unitaire de l'interface $\mathcal{A}_{\sigma\beta}$, pointant de la phase fluide β vers la phase solide σ. L'exposant T désigne la transposée d'un tenseur du second ordre. De plus, λ est le libre parcours moyen des molécules de gaz à la pression et température considérées, et ξ est un facteur dépendant du coefficient d'accommodation tangentiel de quantité de mouvement, σ_v, comme (Maxwell, 1879) :

$$\xi = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \qquad (2.9)$$

Le TMAC a été introduit par Maxwell pour tenir compte du type de réflexion entre les molécules de gaz et la paroi. Il est relié à la quantité de mouvement tangentielle selon l'équation (2.17). Expérimentalement, σ_v prend des valeurs allant de 0,75 à 0,85 selon le gaz, donnant des valeurs de ξ comprises entre 1,3 et 1,7 (Arkilic *et al.*, 2001; Karniadakis *et al.*, 2005; Ewart *et al.*, 2007). Le coefficient ξ est donc un facteur de l'ordre de l'unité qui, pour des raisons pratiques, sera considéré uniforme par la suite.

Le problème (3.1) peut être simplifié davantage en procédant à une analyse d'ordre de grandeur des différents termes (Quintard et Whitaker, 1996; Lasseux *et al.*, 2014). En notant v_β une vitesse caractéristique de l'écoulement et ρ_β une masse volumique caractéristique, on définit l_v et t_v la longueur et le temps caractéristiques pour lesquels v_β varie significativement. On définit L_ρ et t_ρ de façon analogue pour la masse volumique ρ_β. De plus, Kn désigne le nombre de Knudsen supposé suffisament petit en régime glissant. Comme l'écoulement est supposé faiblement compressible, il est attendu que $l_v \ll L_\rho$. Les contraintes ci-dessous (aisément satisfaites en pratique) permettent de négliger l'effet du troisième terme devant le second dans le membre de droite de l'équation (3.1b).

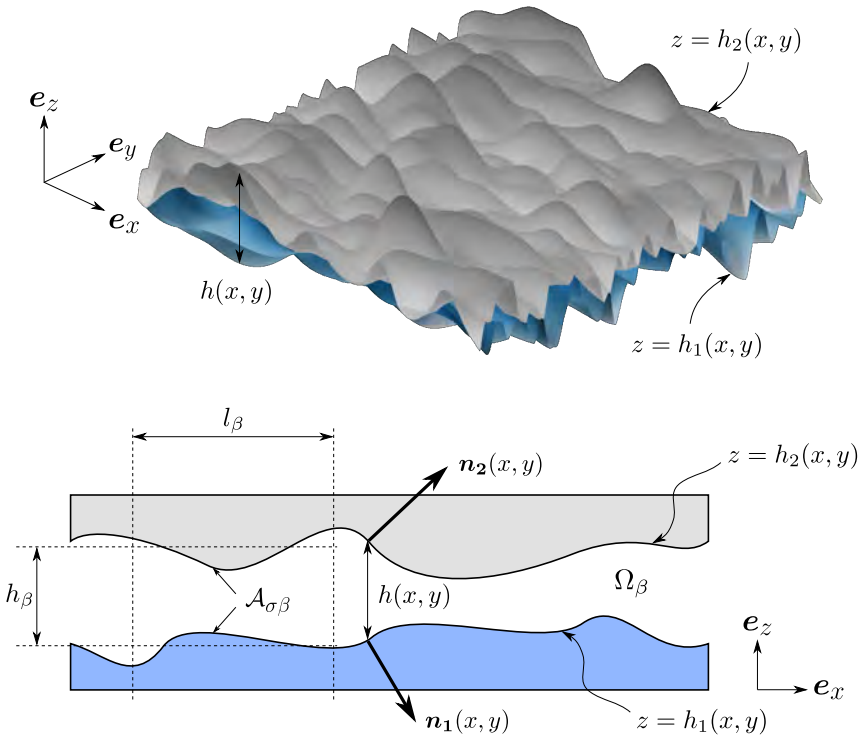


FIGURE 3.1 – Fracture constituée de deux surfaces rugueuses et les paramètres qui lui sont associés.

$$\frac{\Delta\rho_\beta}{\rho_\beta}\frac{l_v(1+\xi\mathrm{Kn})}{v_\beta t_\rho}\frac{l_v}{L_\rho} \ll 1 \quad , \quad \frac{\Delta\rho_\beta}{\rho_\beta}(1+\xi\mathrm{Kn})\left(\frac{l_v}{L_\rho}\right)^2 \ll 1 \tag{3.2}$$

D'autre part, les contraintes suivantes portant sur le paramètre de fréquence et le nombre de REYNOLDS, Re, permettent de négliger les termes inertiels du membre de gauche de l'équation (3.1b) si elles sont satisfaites.

$$\rho_\beta \frac{1+\xi\mathrm{Kn}}{\mu t_v} {l_v}^2 \ll 1 \quad , \quad \mathrm{Re} = \frac{\rho_\beta v_\beta l_v}{\mu} \ll 1 \tag{3.3}$$

En négligeant l'effet des forces à distances et en supposant l'écoulement rampant (à faible nombre de REYNOLDS) pour qu'il soit décrit par l'équation de STOKES, le problème (3.1) peut se réécrire de la façon suivante à l'échelle des rugosités (échelle microscopique) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot(\rho\boldsymbol{v}) = 0 \qquad \text{dans } \Omega_\beta \tag{3.4a}$$

$$-\boldsymbol{\nabla}p + \mu\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{v} = 0 \qquad \text{dans } \Omega_\beta \tag{3.4b}$$

$$\rho = \varphi(p) \qquad \text{dans } \Omega_\beta \tag{3.4c}$$

$$\boldsymbol{v} = -\xi\lambda\boldsymbol{n}\cdot\left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v} + \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\right)\cdot(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}) \qquad \text{sur } \mathcal{A}_{\sigma\beta} \tag{3.4d}$$

Comme présenté sur la figure 3.1, la fracture est constituée de deux surfaces rugueuses, toutes deux décrites par leur altitude, $z = h_i(x, y)$, dans un système de coordonnées de référence. Leur vecteur unitaire normal est noté $\boldsymbol{n_i}(x, y)$ avec $i = 1$ et 2 pour la surface inférieure et supérieure respectivement. De plus, on définit l'ouverture locale de la fracture par $h(x, y) = h_2(x, y) - h_1(x, y)$, qui doit être positive ou nulle dans les zones de contact. Si l'on suppose que le champ des ouvertures varie lentement dans le plan de coordonnées x et y (c'est-à-dire que les pentes des aspérités sont petites), il est d'intérêt de développer l'équation de REYNOLDS pour tenir compte du caractère quasi-bidimensionnel

de la microstructure, afin de simplifier davantage le problème (3.4), qui est tridimensionnel. À cet effet, on définit les grandeurs sans dimension suivantes (notation soulignée) :

$$\begin{aligned} \underline{x} &= x/l_\beta \quad , \quad \underline{y} = y/l_\beta \quad , \quad \underline{z} = z/h_\beta \\ \underline{u} &= u/u_\beta \quad , \quad \underline{v} = v/v_\beta \quad , \quad \underline{w} = w/w_\beta \\ \underline{p} &= p/p_\beta \quad , \quad \underline{\rho} = \rho/\rho_\beta \quad , \quad \underline{t} = t/t_\rho \end{aligned} \tag{3.5}$$

avec l_β la longueur caractéristique selon laquelle l'ouverture varie significativement dans le plan (x, y), et h_β est l'ouverture caractéristique de la fracture. D'autre part, u_β, v_β et w_β représentent les vitesses caractéristiques de l'écoulement dans les directions x, y et z respectivement ; p_β et ρ_β sont les pression et masse volumique caractéristiques du fluide ; t_ρ le temps caractéristique de variation de la masse volumique. En reportant ces quantités sans dimension dans l'équation de conservation de la masse (3.4a), on obtient :

$$\frac{\rho_\beta}{t_\rho}\frac{\partial \underline{\rho}}{\partial \underline{t}} + \rho_\beta \frac{u_\beta}{l_\beta}\frac{\partial(\underline{\rho}\underline{u})}{\partial \underline{x}} + \rho_\beta \frac{v_\beta}{l_\beta}\frac{\partial(\underline{\rho}\underline{v})}{\partial \underline{y}} + \rho_\beta \frac{w_\beta}{h_\beta}\frac{\partial(\underline{\rho}\underline{w})}{\partial \underline{z}} = 0 \tag{3.6}$$

Pour s'assurer que, dans l'équation (3.6), tous les termes aient le même ordre de grandeur, en suivant le principe de moindre dégénérescence (Van Dyke, 1975), on postule que u_β et v_β sont semblables et que

$$\frac{w_\beta}{u_\beta} = \frac{h_\beta}{l_\beta} = \varepsilon \tag{3.7}$$

Dans l'équation (3.7), le paramètre ε dénote le rapport entre la longueur caractéristique normale au plan et celle dans le plan. En se rappelant de l'hypothèse des faibles pentes évoquée précédemment (c'est-à-dire $h_\beta \ll l_\beta$), alors ε est supposément petit devant l'unité : $\varepsilon \ll 1$.

De façon similaire, en injectant les grandeurs sans dimension dans l'équation (3.4b) et en utilisant la définition (3.7) de ε, on obtient la forme adimensionnelle de l'équation de conservation de quantité de mouvement :

$$-\frac{p_\beta}{\mu}\frac{{h_\beta}^2}{u_\beta l_\beta}\frac{\partial \underline{p}}{\partial \underline{x}} + \varepsilon^2\left(\frac{\partial^2 \underline{u}}{\partial \underline{x}^2} + \frac{\partial^2 \underline{u}}{\partial \underline{y}^2}\right) + \frac{\partial^2 \underline{u}}{\partial \underline{z}^2} = 0 \tag{3.8a}$$

$$-\frac{p_\beta}{\mu}\frac{{h_\beta}^2}{u_\beta l_\beta}\frac{\partial \underline{p}}{\partial \underline{y}} + \varepsilon^2\left(\frac{\partial^2 \underline{v}}{\partial \underline{x}^2} + \frac{\partial^2 \underline{v}}{\partial \underline{y}^2}\right) + \frac{\partial^2 \underline{v}}{\partial \underline{z}^2} = 0 \tag{3.8b}$$

$$-\frac{p_\beta}{\mu}\frac{h_\beta}{w_\beta}\frac{\partial \underline{p}}{\partial \underline{z}} + \varepsilon^2\left(\frac{\partial^2 \underline{w}}{\partial \underline{x}^2} + \frac{\partial^2 \underline{w}}{\partial \underline{y}^2}\right) + \frac{\partial^2 \underline{w}}{\partial \underline{z}^2} = 0 \tag{3.8c}$$

En utilisant une fois de plus le principe de moindre dégénérescence, la pression caractéristique p_β est choisie pour que tous les termes dans les équations (3.8a) et (3.8b) soient du même ordre de grandeur. Cela mène à opter pour $p_\beta = \mu u_\beta l_\beta / h_\beta^2$. De cette façon, les équations (3.8) se réécrivent comme :

$$-\frac{\partial \underline{p}}{\partial \underline{x}} + \varepsilon^2\left(\frac{\partial^2 \underline{u}}{\partial \underline{x}^2} + \frac{\partial^2 \underline{u}}{\partial \underline{y}^2}\right) + \frac{\partial^2 \underline{u}}{\partial \underline{z}^2} = 0 \tag{3.9a}$$

$$-\frac{\partial \underline{p}}{\partial \underline{y}} + \varepsilon^2\left(\frac{\partial^2 \underline{v}}{\partial \underline{x}^2} + \frac{\partial^2 \underline{v}}{\partial \underline{y}^2}\right) + \frac{\partial^2 \underline{v}}{\partial \underline{z}^2} = 0 \tag{3.9b}$$

$$-\frac{\partial \underline{p}}{\partial \underline{z}} + \varepsilon^4\left(\frac{\partial^2 \underline{w}}{\partial \underline{x}^2} + \frac{\partial^2 \underline{w}}{\partial \underline{y}^2}\right) + \varepsilon^2\frac{\partial^2 \underline{w}}{\partial \underline{z}^2} = 0 \tag{3.9c}$$

En utilisant le fait que $\varepsilon \ll 1$, négliger les termes du second ordre et plus en ε (troncature en $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$) donne la forme suivante pour les composantes de l'équation de conservation de quantité de mouvement :

$$-\frac{\partial \underline{p}}{\partial \underline{x}} + \frac{\partial^2 \underline{u}}{\partial \underline{z}^2} + \mathcal{O}\left(\varepsilon^2\right) = 0 \tag{3.10a}$$

$$-\frac{\partial \underline{p}}{\partial \underline{y}} + \frac{\partial^2 \underline{v}}{\partial \underline{z}^2} + \mathcal{O}\left(\varepsilon^2\right) = 0 \tag{3.10b}$$

$$-\frac{\partial \underline{p}}{\partial \underline{z}} + \mathcal{O}\left(\varepsilon^2\right) = 0 \tag{3.10c}$$

En revenant à la forme dimensionnelle, cela donne :

$$-\frac{\partial p}{\partial x} + \mu\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \mathcal{O}\left(\mu\frac{u_\beta}{{l_\beta}^2}\right) = 0 \tag{3.11a}$$

$$-\frac{\partial p}{\partial y} + \mu\frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + \mathcal{O}\left(\mu\frac{u_\beta}{{l_\beta}^2}\right) = 0 \tag{3.11b}$$

$$-\frac{\partial p}{\partial z} + \mathcal{O}\left(\mu\frac{u_\beta}{l_\beta h_\beta}\right) = 0 \tag{3.11c}$$

De l'équation (3.11c), on remarque que la pression est indépendante de la coordonnée z. Une double intégration des équations (3.11a) et (3.11b) selon z peut alors être effectuée, fournissant les expressions des deux profils de vitesse dans le plan (x, y).

$$u = \frac{1}{2\mu}\frac{\partial p}{\partial x}\left(z^2 + \Upsilon_1 z + \Upsilon_2\right) \tag{3.12a}$$

$$v = \frac{1}{2\mu}\frac{\partial p}{\partial y}\left(z^2 + \Upsilon_3 z + \Upsilon_4\right) \tag{3.12b}$$

Dans ces équations, les Υ_i $(i = 1, \ldots, 4)$ sont quatre constantes d'intégration qu'il reste à déterminer à partir de la condition limite de glissement (3.4d).

3.1.2 Traitement de la condition limite de glissement

On se concentre désormais sur la condition limite de glissement de premier ordre de l'équation (3.4d), avec l'objectif d'en obtenir une approximation en $\mathcal{O}\left(\varepsilon^2\right)$, en accord avec ce qui a été réalisé pour l'équation de conservation de quantité de mouvement. En dénotant n_{xi}, n_{yi} et n_{zi} les composantes respectives en x, y et z du vecteur normal unitaire $\boldsymbol{n_i}$ à la paroi $z = h_i$ $(i = 1, 2)$ de la fracture ; en notant également u_i, v_i et w_i les composantes du vecteur vitesse sur chaque paroi, la forme générale de la condition limite de glissement (3.4d) peut s'écrire :

$$u_i = -\xi\lambda\left(A_{xi}\left(1 - {n_{xi}}^2\right) - A_{yi}n_{xi}n_{yi} - A_{zi}n_{xi}n_{zi}\right) \tag{3.13a}$$

$$v_i = -\xi\lambda\left(-A_{xi}n_{xi}n_{yi} + A_{yi}\left(1 - {n_{yi}}^2\right) - A_{zi}n_{yi}n_{zi}\right) \tag{3.13b}$$

$$w_i = -\xi\lambda\left(-A_{xi}n_{xi}n_{zi} - A_{yi}n_{yi}n_{zi} + A_{zi}\left(1 - {n_{zi}}^2\right)\right) \tag{3.13c}$$

avec A_{xi}, A_{yi} et A_{zi} définis par :

$$A_{xi} = 2n_{xi}\frac{\partial u}{\partial x} + n_{yi}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) + n_{zi}\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) \tag{3.14a}$$

$$A_{yi} = n_{xi}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) + 2n_{yi}\frac{\partial v}{\partial y} + n_{zi}\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) \tag{3.14b}$$

$$A_{zi} = n_{xi}\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) + n_{yi}\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) + 2n_{zi}\frac{\partial w}{\partial z} \tag{3.14c}$$

où toutes les dérivées sont évaluées à la paroi $z = h_i$ $(i = 1, 2)$, et où les composantes de $\boldsymbol{n_i}$ peuvent être définies comme :

$$\boldsymbol{n_i} = (-1)^{i-1} \left(1 + \left(\frac{\partial h_i}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial h_i}{\partial y}\right)^2\right)^{-1/2} \left(\frac{\partial h_i}{\partial x}\boldsymbol{e}_x + \frac{\partial h_i}{\partial y}\boldsymbol{e}_y - \boldsymbol{e}_z\right) \tag{3.15}$$

où, de manière équivalente :

$$\boldsymbol{n_i} = (-1)^{i-1} \left(1 + \varepsilon^2 \left(\frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{x}}\right)^2 + \varepsilon^2 \left(\frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{y}}\right)^2\right)^{-1/2} \left(\varepsilon \frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{x}}\boldsymbol{e}_x + \varepsilon \frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{y}}\boldsymbol{e}_y - \boldsymbol{e}_z\right) \tag{3.16}$$

L'insertion de ces expressions dans les équations (3.14) donne :

$$A_{xi} = \varepsilon N_i \frac{u_\beta}{l_\beta} \left\{2\frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{x}}\frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{x}} + \frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{y}}\left(\frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{y}} + \frac{\partial \underline{v}}{\partial \underline{x}}\right) - \frac{\partial \underline{w}}{\partial \underline{x}} - \frac{1}{\varepsilon^2}\frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{z}}\right\} \tag{3.17a}$$

$$A_{yi} = \varepsilon N_i \frac{u_\beta}{l_\beta} \left\{\frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{x}}\left(\frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{y}} + \frac{\partial \underline{v}}{\partial \underline{x}}\right) + 2\frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{y}}\frac{\partial \underline{v}}{\partial \underline{y}} - \frac{\partial \underline{w}}{\partial \underline{y}} - \frac{1}{\varepsilon^2}\frac{\partial \underline{v}}{\partial \underline{z}}\right\} \tag{3.17b}$$

$$A_{zi} = \varepsilon^3 N_i \frac{u_\beta}{h_\beta} \left\{\frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{x}}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{z}} + \frac{\partial \underline{w}}{\partial \underline{x}}\right) + \frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{y}}\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\frac{\partial \underline{v}}{\partial \underline{z}} + \frac{\partial \underline{w}}{\partial \underline{y}}\right) - \frac{2}{\varepsilon^2}\frac{\partial \underline{w}}{\partial \underline{z}}\right\} \tag{3.17c}$$

où N_i est défini tel que :

$$N_i = (-1)^{i-1} \left(1 + \varepsilon^2 \left(\frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{x}}\right)^2 + \varepsilon^2 \left(\frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{y}}\right)^2\right)^{-1/2} \tag{3.18}$$

Sous l'hypothèse des faibles pentes, on a $\varepsilon \ll 1$, ce qui permet d'écrire $N_i = (-1)^{i-1} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$. Ainsi, les équations (3.17) peuvent être simplifiées en $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ comme :

$$A_{xi} = (-1)^i \frac{u_\beta}{h_\beta}\frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{z}} + \mathcal{O}\left(\varepsilon^2 \frac{u_\beta}{h_\beta}\right) \tag{3.19a}$$

$$A_{yi} = (-1)^i \frac{u_\beta}{h_\beta}\frac{\partial \underline{v}}{\partial \underline{z}} + \mathcal{O}\left(\varepsilon^2 \frac{u_\beta}{h_\beta}\right) \tag{3.19b}$$

$$A_{zi} = (-1)^{i-1} \varepsilon \frac{u_\beta}{h_\beta} \left\{\frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{x}}\frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{z}} + \frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{y}}\frac{\partial \underline{v}}{\partial \underline{z}} - 2\frac{\partial \underline{w}}{\partial \underline{z}}\right\} + \mathcal{O}\left(\varepsilon^3 \frac{u_\beta}{h_\beta}\right) \tag{3.19c}$$

Une fois ces expressions reportées dans les équations (3.13), les vitesses de glissement sous forme adimensionnelle en $z = h_i$ peuvent s'écrire à l'ordre $\mathcal{O}(\varepsilon^2 \xi \mathrm{Kn})$ telles que :

$$\underline{u_i} = (-1)^{i-1} \xi \mathrm{Kn} \frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{z}} + \mathcal{O}\left(\varepsilon^2 \xi \mathrm{Kn}\right) \tag{3.20a}$$

$$\underline{v_i} = (-1)^{i-1} \xi \mathrm{Kn} \frac{\partial \underline{v}}{\partial \underline{z}} + \mathcal{O}\left(\varepsilon^2 \xi \mathrm{Kn}\right) \tag{3.20b}$$

$$\underline{w_i} = (-1)^{i-1} \xi \mathrm{Kn} \left(\frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{x}}\frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{z}} + \frac{\partial \underline{h_i}}{\partial \underline{y}}\frac{\partial \underline{v}}{\partial \underline{z}}\right) + \mathcal{O}\left(\varepsilon^2 \xi \mathrm{Kn}\right) \tag{3.20c}$$

où Kn dénote le nombre de Knudsen défini comme :

$$\mathrm{Kn} = \frac{\lambda}{h_\beta} \tag{3.21}$$

Cette approximation est consistante avec celle établie précédemment en $\mathcal{O}\left(\varepsilon^2\right)$, car en régime glissant, $\xi\mathrm{Kn}$ est un paramètre restant petit devant l'unité. En retournant à la forme dimensionnelle, cela donne en $z = h_i$ $(i = 1, 2)$:

$$u_i = (-1)^{i-1}\xi\lambda\frac{\partial u}{\partial z} + \mathcal{O}\left(\varepsilon^2\xi\mathrm{Kn}u_\beta\right) \tag{3.22a}$$

$$v_i = (-1)^{i-1}\xi\lambda\frac{\partial v}{\partial z} + \mathcal{O}\left(\varepsilon^2\xi\mathrm{Kn}u_\beta\right) \tag{3.22b}$$

$$w_i = (-1)^{i-1}\xi\lambda\varepsilon\left(\frac{\partial h_i}{\partial \underline{x}}\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial h_i}{\partial \underline{y}}\frac{\partial v}{\partial z}\right) + \mathcal{O}\left(\varepsilon^3\xi\mathrm{Kn}u_\beta\right) \tag{3.22c}$$

Comme attendu, l'équation (3.22c) indique que la composante verticale de la vitesse w_i est plus petite que les composantes u_i et v_i dans le plan d'un facteur ε. Sous l'hypothèse des faibles pentes, la condition limite de glissement de premier ordre (3.4d) se simplifie en les équations (3.22) au niveau des parois de la fracture (surface supérieure et inférieure). Cela justifie la formulation similaire obtenue par Burgdorfer (1959) sans démonstration pour l'étude de la lubrification au gaz des paliers.

3.1.3 Équation de Reynolds avec glissement

Pour clore le développement, les constantes d'intégration Υ_j $(j = 1, \ldots, 4)$ des équations (3.12) doivent être déterminées en employant les relations (3.22a) et (3.22b) pour $i = 1, 2$, ce qui fournit quatre équations. La résolution du système ainsi obtenu pour les Υ_j donne l'expression des profils de vitesse dans le plan (x, y) de la fracture.

$$u = \frac{1}{2\mu}\frac{\partial p}{\partial x}\left(z^2 - (h_1 + h_2)\,z + h_1h_2 + \xi\lambda\,(h_1 - h_2)\right) \tag{3.23a}$$

$$v = \frac{1}{2\mu}\frac{\partial p}{\partial y}\left(z^2 - (h_1 + h_2)\,z + h_1h_2 + \xi\lambda\,(h_1 - h_2)\right) \tag{3.23b}$$

À ce stade, le but est de réduire le modèle d'écoulement tridimensionnel originel en une formulation bidimensionnelle équivalente d'ordre $\mathcal{O}\left(\varepsilon^2\xi\mathrm{Kn}\right)$. En se rappelant que le fluide est supposé barotrope (équation (3.4c)) et que la pression est indépendante de la coordonnée z (équation (3.11c)), le débit massique par unité de largeur de la fracture peut s'obtenir par intégration de la densité de flux massique selon l'ouverture h de la fracture, ce qui donne :

$$q_x = \int_{h_1}^{h_2}\rho(x,y)u(x,y,z)\,\mathrm{d}z = -\rho\frac{h^3}{12\mu}\left(1 + 6\frac{\xi\lambda}{h}\right)\frac{\partial p}{\partial x} \tag{3.24a}$$

$$q_y = \int_{h_1}^{h_2}\rho(x,y)v(x,y,z)\,\mathrm{d}z = -\rho\frac{h^3}{12\mu}\left(1 + 6\frac{\xi\lambda}{h}\right)\frac{\partial p}{\partial y} \tag{3.24b}$$

avec $h = h_2 - h_1$. En définissant le nombre de Knudsen local comme $\mathrm{Kn} = \lambda/h$ et en notant le vecteur débit $\boldsymbol{q} = q_x\boldsymbol{e}_x + q_y\boldsymbol{e}_y$, cela peut s'écrire sous forme vectorielle comme :

$$\boldsymbol{q} = -\rho\frac{h^3}{12\mu}\left(1 + 6\xi\mathrm{Kn}\right)\boldsymbol{\nabla}p \tag{3.25}$$

L'équation de continuité (3.4a) peut également s'intégrer selon z, ce qui donne :

$$\int_{h_1}^{h_2}\frac{\partial\rho}{\partial t}\,\mathrm{d}z + \int_{h_1}^{h_2}\frac{\partial(\rho u)}{\partial x}\,\mathrm{d}z + \int_{h_1}^{h_2}\frac{\partial(\rho v)}{\partial y}\,\mathrm{d}z + \int_{h_1}^{h_2}\frac{\partial(\rho w)}{\partial z}\,\mathrm{d}z = 0 \tag{3.26}$$

En utilisant la définition du débit massique par unité de largeur de l'équation (3.24) ainsi que la règle de Leibniz de dérivation sous l'intégrale, on obtient :

$$\begin{aligned}\int_{h_1}^{h_2} \frac{\partial(\rho u)}{\partial x}\,\mathrm{d}z + \int_{h_1}^{h_2} \frac{\partial(\rho v)}{\partial y}\,\mathrm{d}z + \int_{h_1}^{h_2} \frac{\partial(\rho w)}{\partial z}\,\mathrm{d}z = {} & \frac{\partial q_x}{\partial x} + \rho u_1 \frac{\partial h_1}{\partial x} - \rho u_2 \frac{\partial h_2}{\partial x} \\ & + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \rho v_1 \frac{\partial h_1}{\partial y} - \rho v_2 \frac{\partial h_2}{\partial y} \\ & + \rho w_2 - \rho w_1 \end{aligned} \tag{3.27}$$

Cela peut s'écrire de manière plus compacte (en utilisant la convention de sommation d'Einstein) :

$$\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \rho \boldsymbol{v_i} \cdot \boldsymbol{m_i} = 0, \quad i = 1, 2 \tag{3.28}$$

avec

$$\boldsymbol{v_i} = u_i \boldsymbol{e}_x + v_i \boldsymbol{e}_y + w_i \boldsymbol{e}_z, \quad \boldsymbol{m_i} = (-1)^{i-1} \left(\frac{\partial h_i}{\partial x} \boldsymbol{e}_x + \frac{\partial h_i}{\partial y} \boldsymbol{e}_y - \boldsymbol{e}_z \right), \quad i = 1, 2 \tag{3.29}$$

Comme $\boldsymbol{v_i}$ est tangent à la paroi $z = h_i$ et que $\boldsymbol{m_i}$ est proportionnel au vecteur normal unitaire $\boldsymbol{n}_i$ en cette même paroi (voir équation (3.15)), leur produit scalaire est nul. D'autre part, l'intégration du premier terme de l'équation (3.26) est immédiate car ρ est indépendante de z. La forme intégrée de l'équation de conservation de la masse (3.26) se réduit alors à :

$$h \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} = h \frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{q} = 0 \tag{3.30}$$

Ce résultat est exact à n'importe quel ordre en ε et $\xi\mathrm{Kn}$ car il a été obtenu directement à partir de l'équation (3.4d). Un résultat identique aurait pu être obtenu à l'ordre $\mathcal{O}\left(\varepsilon^2 \xi\mathrm{Kn}\right)$ en utilisant les équations (3.22) dans l'équation (3.27).

Le problème aux limites initial (3.4) est réduit d'une forme tridimensionnelle à une forme bidimensionnelle dans le plan moyen de la fracture. Si $\mathcal{A}_\beta$ désigne la région bidimensionnelle occupée par la phase fluide et $\mathcal{A}_\sigma$ la région bidimensionnelle occupée par la phase solide (les zones de contact), le problème (3.4) peut être formulé de façon suivante, qui est une approximation juste au second ordre en la pente locale des aspérités et de premier ordre en nombre de Knudsen :

$$h \frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{q} = 0 \qquad \text{dans } \mathcal{A}_\beta \tag{3.31a}$$

$$\boldsymbol{q} = -\rho \frac{h^3}{12\mu} \left(1 + 6\xi\mathrm{Kn}\right) \boldsymbol{\nabla} p \qquad \text{dans } \mathcal{A}_\beta \tag{3.31b}$$

$$\rho = \varphi(p) \qquad \text{dans } \mathcal{A}_\beta \tag{3.31c}$$

$$\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{n_{\sigma\beta}} = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \tag{3.31d}$$

Dans la condition limite (3.31d), $\boldsymbol{n_{\sigma\beta}}$ est le vecteur normal unitaire aux contours $\mathcal{C}_{\sigma\beta}$ des zones de contact $\mathcal{A}_\sigma$ dans le plan (x, y), pointant de la phase fluide vers la phase solide. Cette condition limite dénote l'imperméabilité des zones de contact, lorsqu'elles existent. Les équations (3.31a) et (3.31b) forment le modèle de Reynolds d'un écoulement glissant mû par la pression. La transmissivité locale est désignée par $h^3(1 + 6\xi\mathrm{Kn})/12$, dont le second terme entre parenthèses indique la correction de glissement de premier ordre. Lorsque ce terme devient nul, le modèle de Reynolds classique sans glissement, de transmissivité locale $h^3/12$, est obtenu. C'est généralement le cas considéré pour un écoulement incompressible ou faiblement compressible sans glissement (Szeri, 1998; Vallet *et al.*, 2009).

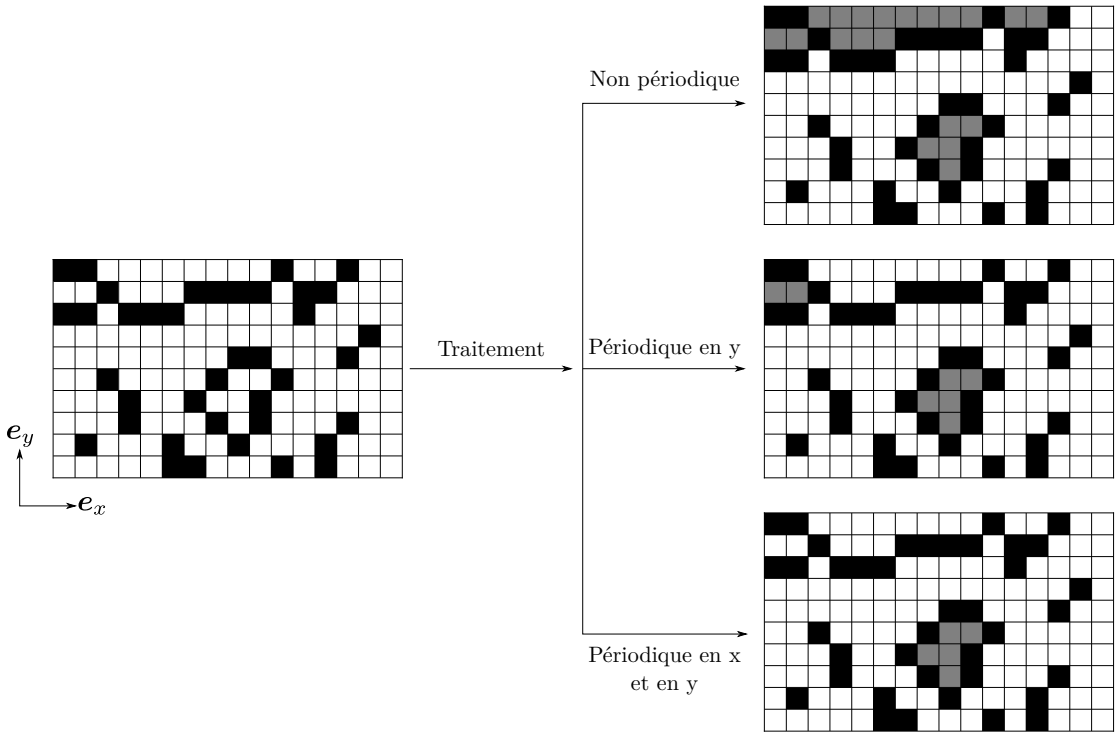


FIGURE 3.2 – Illustration de l'algorithme d'HOSHEN et KOPELMAN sur la grille initiale de gauche (cases blanches : $h > 0$; cases noires : $h = 0$). Selon les conditions limites que l'on utilise, des amas différents sont éliminés, représentés en gris, et auxquels sera affectée une ouverture nulle après traitement.

3.1.4 Aspects numériques

Un programme a été développé pour résoudre les équations (3.31), en se limitant au régime stationnaire. Par la suite, on l'appellera code de simulation directe (DNS). Un schéma numérique par volumes finis est utilisé, d'ordre deux en espace (Moukalled *et al.*, 2016). Le système linéaire résultant de cette discrétisation est symétrique, défini positif et creux, avec une structure penta-diagonale lorsque le maillage est cartésien et régulier. Il est résolu par la méthode itérative du gradient conjugué avec un préconditionnement par la diagonale (Saad, 2003). La non-linéarité du problème est traitée par la méthode de PICARD (voir par exemple Huyakorn et Pinder (1983)). On part d'abord d'une estimation initiale de la solution du problème. La matrice du système et le second membre (qui dépendent de la solution) sont alors mis à jour, puis la solution de ce nouveau système est calculée. Ce processus est ainsi répété jusqu'à convergence.

Le problème (3.31) opérant à l'échelle de la fracture entière, il n'est pas impossible que cette dernière comporte des zones de contact (où l'ouverture est nulle). Ces zones ne conduisent bien entendu pas de fluide. Il est également possible qu'il existe des amas non percolants, zones d'ouverture non-nulle mais non connectées entre l'entrée et la sortie de la fracture. Lors du calcul, il est donc inutile de considérer ces zones ne transportant pas effectivement de fluide et n'ayant donc aucun impact sur le débit total au travers de la fracture, ceci augmentant inutilement la taille du système à résoudre. Pour cela, ces zones sont éliminées du problème en utilisant l'algorithme de détection et d'élimination d'amas non percolants de Hoshen et Kopelman (1976). Une illustration du fonctionnement de cet algorithme est présentée sur la figure 3.2 selon la condition limite de périodicité utilisée pour décrire le champ des ouvertures. Dans le cas du code de simulation directe, une condition de périodicité selon y est utilisée.

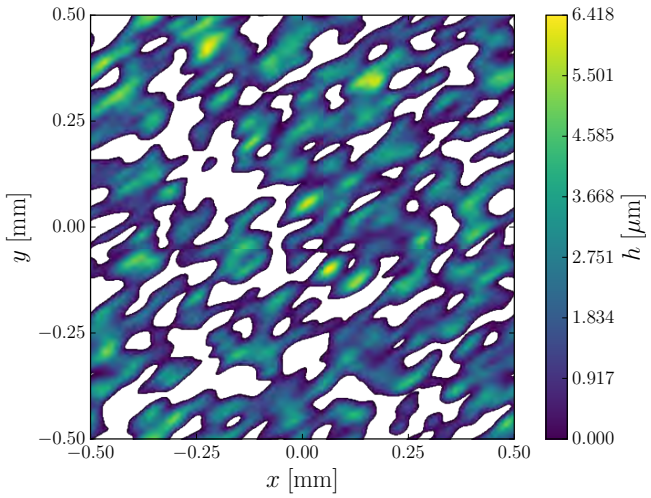


FIGURE 3.3 – Champ des ouvertures généré par mise en contact de deux surfaces gaussiennes. Les zones blanches désignent des zones de contact.

3.1.5 Exemple de problème résolu

On illustre ici la résolution du problème (3.31) sur une géométrie modèle. Pour cela, on génère un champ des ouvertures semblable à celui de la figure 3.1 par mise en contact de deux surfaces gaussiennes. L'annexe D présente la méthode de génération de telles surfaces gaussiennes corrélées à courte portée. Les paramètres statistiques utilisés lors de la génération des deux surfaces sont donnés dans le tableau 3.1, on fait ensuite s'interpénétrer ces dernières de 9 µm pour laisser apparaitre des zones de contact. La champ des ouvertures ainsi obtenu est donné en figure 3.3, il présente un caractère anisotrope.

Surface	σ_h [µm]	σ_x [µm]	σ_y [µm]	θ [°]
z_1	1,0	40	40	0
z_2	1,5	60	20	35

TABLEAU 3.1 – Valeurs numériques des paramètres statistiques utilisés pour générer la surface gaussienne 3.3. On remarque que la surface z_1 est statistiquement isotrope alors que z_2 est plus corrélée dans la direction orientée à 35° que dans la direction orthogonal à cette orientation.

Le champ des ouvertures connu et considéré périodique en y, on résout le problème (3.31) en appliquant des conditions limites en pression, P_i et P_e, selon x. On considère également le gaz comme parfait de telle sorte que $\varphi(p) = pM/RT$. On en déduit alors la transmissivité apparente de la fracture avec glissement, K, par comparaison du débit total, Q, à une loi de DARCY (Zimmerman et Bodvarsson, 1996).

$$Q = \bar{\rho}\frac{K}{\mu}\frac{L_y}{L_x}\Delta p \tag{3.32}$$

Dans l'équation (3.32), $\bar{\rho} = \varphi(\bar{p})$ est la masse volumique moyenne, $\bar{p} = (P_i + P_e)/2$ est la pression moyenne, $\Delta p = P_i - P_e$ est la différence de pression et enfin, L_x et L_y sont les dimensions de la fracture dans les directions x et y respectivement. Le débit total Q dans la direction x est obtenu par intégration du débit local q_x selon y comme (à noter que la conservation du débit indique que Q est identique quelle que soit la position x considérée) :

$$Q = \int_0^{L_y} q_x \, \mathrm{d}y \tag{3.33}$$

On définit également le nombre de Knudsen local, Kn, pour un gaz parfait comme (Cercignani, 1988) :

$$\mathrm{Kn} = \frac{\mu}{ph}\sqrt{\frac{\pi RT}{2M}} \tag{3.34}$$

Afin de visualiser l'impact du glissement sur la transmissivité, les conditions limites en pression sont variées, faisant ainsi varier le nombre de Knudsen moyen de la fracture, $\overline{\mathrm{Kn}}$, défini par :

$$\overline{\mathrm{Kn}} = \frac{\bar{\lambda}}{h_0} = \frac{\mu}{\bar{p}h_0}\sqrt{\frac{\pi RT}{2M}} \tag{3.35}$$

où h_0 est l'ouverture caractéristique intrinsèque de la fracture, distance séparant deux plaques planes parallèles (de dimensions similaires à celle de la fracture), et présentant une transmissivité identique à la transmissivité intrinsèque K_0 (sans glissement) de la fracture, c'est-à-dire :

$$h_0 = \sqrt[3]{12K_0} \tag{3.36}$$

Le nombre de Knudsen moyen ne représente cependant en aucun cas la valeur moyenne du champ de Knudsen local. Pour la fracture considérée, on a $K_0 = 4{,}55 \cdot 10^{-11}$ mm^3 et $h_0 = 0{,}82$ µm.

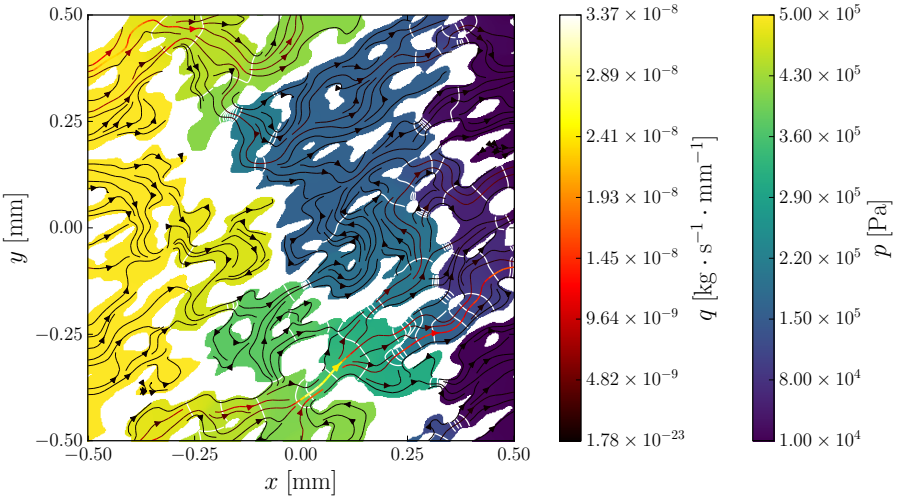
Quelques résultats sont présentés en figure 3.4. Tout d'abord, la figure 3.4a présente le champ de pression calculé pour une valeur de $\overline{\mathrm{Kn}} \approx 0{,}09$ ainsi que les lignes isobares, représentées par les lignes blanches. Les lignes de courant sont également présentées, leur couleur représentant localement la norme du vecteur débit massique par unité de largeur $\boldsymbol{q}$. L'écoulement se produit en passant par plusieurs constrictions.

La figure 3.4b présente le champ de Knudsen local donné par l'équation (3.34). On peut observer proche de la sortie des valeurs plus élevées qu'en entrée, car la pression y est plus faible. À proximité de l'entrée, le nombre de Knudsen est de l'ordre de 0,1 tandis que proche de la sortie, il est de l'ordre de 1. On remarque également qu'il peut atteindre des valeurs très élevées localement, proche des zones de contact où l'ouverture tend à se rapprocher fortement de zéro. Dans ces zones, la validité locale d'un modèle de glissement de premier ordre est alors grandement remise en cause. Néanmoins, on peut s'attendre à ce que l'impact sur le comportement macroscopique reste faible tant que la proportion totale de ces zones reste modérée.

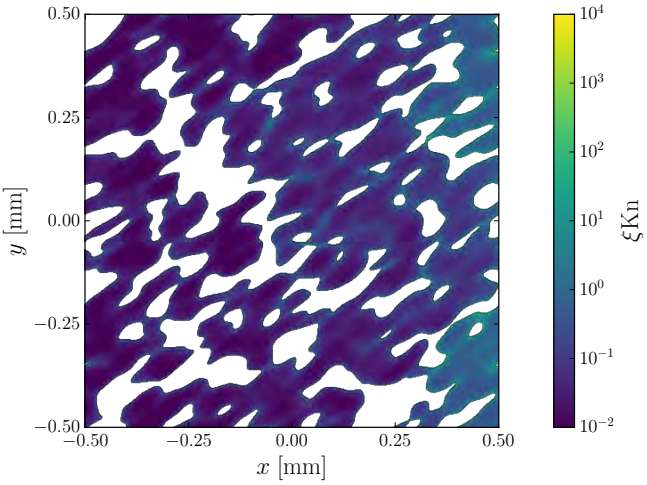
Enfin, la figure 3.4c présente l'évolution de la transmissivité normalisée en fonction du nombre de Knudsen moyen sur la fracture. La transmissivité macroscopique glissante apparente augmente donc en fonction du niveau de raréfaction moyen. Ce résultat était prévisible car en présence de glissement, les transmissivités microscopiques voient elles aussi leur valeur augmenter. La variation macroscopique semble quasi-linéaire pour cette surface, un résultat qui n'est aucunement généralisable. En présence de glissement, le milieu a donc tendance à être plus perméable, une caractéristique assurément pas souhaitable dans le domaine de l'étanchéité, mais inévitable.

3.2 Changement d'échelle – vers un modèle à l'échelle macroscopique

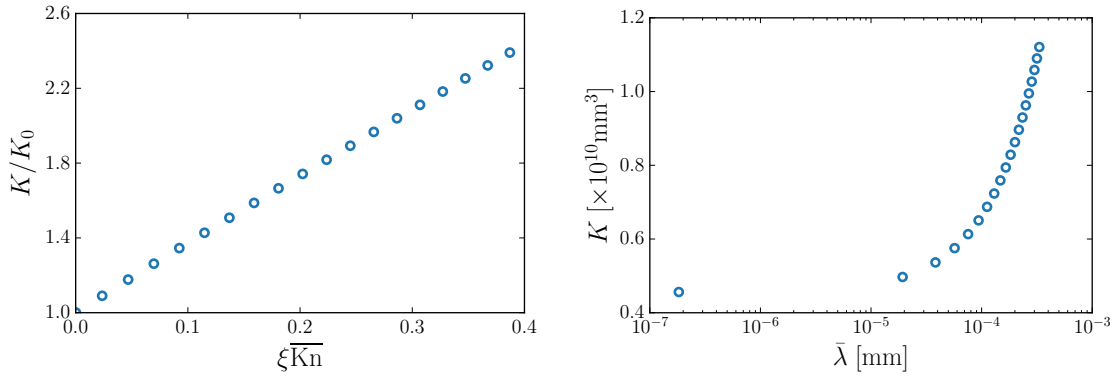
De manière générale dans une fracture au caractère multi-échelle, l'échelle de longueur caractéristique du profil des aspérités (ou rugosités) est petite devant la longueur caractéristique du domaine d'étude dans son ensemble. De ce fait, il est d'intérêt d'employer une approche par séparation d'échelles et de développer un modèle d'écoulement macroscopique moyenné, plutôt que d'utiliser une solution déterministe résolvant le problème



(a) Pression et lignes de courant.



(b) Nombre de Knudsen local.



(c) (d)

Figure 3.4 – 3.4a : champ de pression et lignes de courant calculées à $\overline{\mathrm{Kn}} \approx 0{,}09$. Les lignes blanches sont les isobares et q est la norme du vecteur débit massique linéique $\boldsymbol{q}$. 3.4b : champ de Knudsen local sur la fracture correspondant à $\overline{\mathrm{Kn}} \approx 0{,}09$. 3.4c : évolution de la transmissivité normalisée avec le nombre de Knudsen moyen. 3.4d : évolution de la transmissivité apparente avec le libre parcours moyen représentatif.

à toutes les échelles (de l'échelle des aspérités jusqu'à celle de la fracture entière). Deux échelles sont généralement séparées, la petite échelle microscopique, incluant les détails de la microstructure au niveau des aspérités, et une échelle macroscopique, plus globale. Plusieurs approches de la littérature traitant de ce problème sont présentées en section 1.3. Certains types de fractures géologiques par exemple possèdent une structure plus complexe où la séparation des échelles, de celle des aspérités à celle de la fracture entière, n'est pas toujours satisfaite. Ces types de fractures sont en général organisées en réseaux complexes, avec de long chenaux préférentiels d'écoulement, requérant une attention particulière pour décrire leur comportement à la grande échelle (Tsang et Tsang, 1987).

Dans l'approche qui suit, on se restreindra au changement d'échelle, de celle des aspérités à l'échelle d'un élément représentatif local caractérisé par son tenseur de transmissivité, et pour lequel la contrainte de séparation des échelles est aisément satisfaite. Par exemple, sur des surfaces obtenues par un processus mécanique (usinage, etc.), l'échelle des rugosités est généralement bien distincte de l'échelle supérieure qui est celle de l'ondulation (Stout *et al.*, 1990; Stout et Blunt, 2000), un pré-requis suffisant pour que ce changement d'échelle soit applicable.

L'écoulement de gaz dans le régime glissant est décrit par le problème au limites (3.31) à l'échelle microscopique (celle des aspérités). Notre intérêt est maintenant de développer un modèle d'écoulement macroscopique reliant le débit massique par unité de largeur moyen au gradient de pression moyenne, à l'échelle d'une surface élémentaire représentative de la fracture (SER). Pour ce faire, nous utilisons la méthode de la prise de moyenne volumique (Whitaker, 1999), dont quelques principes de base sont présentés ci-après. À noter que notre problème étant bidimensionnel, la désignation « prise de moyenne surfacique » serait plus adaptée, le formalisme restant toutefois identique au cas volumique. Nous conserverons cette dernière dénomination par la suite.

La prise de moyenne est effectuée sur un domaine $\mathcal{S}$ de surface S et de rayon r_0, qui est un échantillon représentatif de l'ensemble de la fracture, de dimension caractéristique L_0, comme présenté en figure 3.5. La phase fluide β occupe une région $\mathcal{S}_\beta$ de surface S_β dans cet élément représentatif. Pour une quantité quelconque donnée ψ, définie dans $\mathcal{S}_\beta$, deux moyennes sont utilisées (Whitaker, 1999) ; la moyenne superficielle :

$$\langle \psi \rangle = \frac{1}{S} \int_{\mathcal{S}_\beta} \psi \, \mathrm{d}S \tag{3.37}$$

et la moyenne intrinsèque :

$$\langle \psi \rangle^\beta = \frac{1}{S_\beta} \int_{\mathcal{S}_\beta} \psi \, \mathrm{d}S \tag{3.38}$$

On a l'évidente relation suivante, liant ces deux moyennes :

$$\langle \psi \rangle = \varepsilon_\beta \langle \psi \rangle^\beta \tag{3.39}$$

avec ε_β la porosité bidimensionnelle et ε_σ son complémentaire, nommé taux de portance de la fracture, quantités définies par :

$$\varepsilon_\beta = \frac{S_\beta}{S} \quad , \quad \varepsilon_\sigma = 1 - \varepsilon_\beta = \frac{S_\sigma}{S} \tag{3.40}$$

où S_σ est l'aire occupée par les zones de contact, et $S_\beta + S_\sigma = S$.

Après prise de moyenne d'une équation, il est parfois nécessaire de vouloir intervertir intégration et différentiation. Le théorème de prise de moyenne spatiale, forme particulière de la règle de Leibniz, peut être utilisé. Pour le gradient d'une quantité scalaire, on obtient (Howes et Whitaker, 1985) :

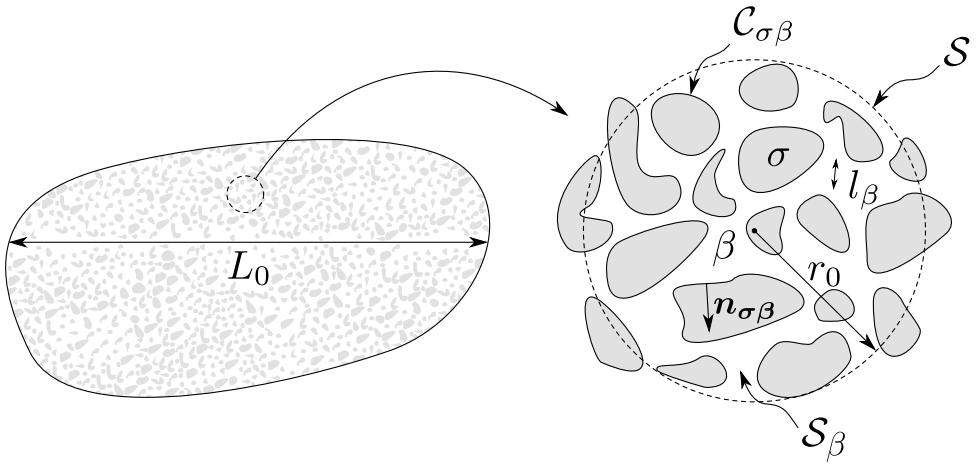


FIGURE 3.5 – Domaine macroscopique et surface représentative de la fracture incluant la phase fluide β et les zones de contact σ.

$$\langle \boldsymbol{\nabla}\psi \rangle = \boldsymbol{\nabla}\langle \psi \rangle + \frac{1}{S}\int_{\mathcal{C}_{\sigma\beta}} \psi \boldsymbol{n_{\sigma\beta}}\, \mathrm{d}l \tag{3.41}$$

avec une version semblable pour l'opérateur divergence :

$$\langle \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\psi} \rangle = \boldsymbol{\nabla}\cdot\langle \boldsymbol{\psi} \rangle + \frac{1}{S}\int_{\mathcal{C}_{\sigma\beta}} \boldsymbol{\psi}\cdot\boldsymbol{n_{\sigma\beta}}\, \mathrm{d}l \tag{3.42}$$

Comme pour tout processus de changement d'échelle, le développement du modèle d'écoulement macroscopique repose sur l'hypothèse de séparation des échelles :

$$l_\beta \ll r_0 \ll L_0 \tag{3.43}$$

Par simplicité, l'échelle L_0 est utilisée pour désigner l'échelle de la fracture entière, en supposant que cette dernière soit homogène, c'est-à-dire qu'aucune autre échelle de longueur n'est impliquée dans l'écoulement. Comme dit précédemment, ça n'est pas toujours le cas et plus précisément, L_0 doit être comprise comme l'échelle de longueur des défauts de taille caractéristique directement supérieure à l_β. Par la suite, cette hiérarchie d'échelle (3.43) est supposée valable. Dans ce cas, la grandeur ψ peut être décomposée spatialement comme (Gray, 1975) :

$$\psi = \langle \psi \rangle^\beta + \widetilde{\psi} \tag{3.44}$$

La quantité $\widetilde{\psi}$ désigne la déviation spatiale de ψ par rapport à sa valeur moyenne et possède une échelle caractéristique de variation de l'ordre de l_β (varie à la micro-échelle). Pour la valeur moyenne $\langle \psi \rangle^\beta$, l'échelle caractéristique de variation est de l'ordre de L_0 (voir figure 3.5). Si la contrainte d'échelles (3.43) est satisfaite, il est possible de démontrer que la moyenne intrinsèque possède des variations négligeables à l'échelle de la surface représentative (Whitaker, 1999), c'est-à-dire :

$$\left\langle \langle \psi \rangle^\beta \right\rangle^\beta \approx \langle \psi \rangle^\beta \tag{3.45}$$

et cela implique

$$\left\langle \widetilde{\psi} \right\rangle^\beta \approx 0 \tag{3.46}$$

3.2.1 Prise de moyenne volumique et modèle macroscopique non-clos

Le développement du modèle macroscopique avec glissement de premier ordre donné par le problème (3.31) débute par l'application de la moyenne superficielle à l'équation de continuité (3.31a). En utilisant le théorème de la prise de moyenne spatiale, cela donne :

$$\left\langle h\frac{\partial \rho}{\partial t}\right\rangle + \langle \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{q}\rangle = \left\langle h\frac{\partial \rho}{\partial t}\right\rangle + \boldsymbol{\nabla}\cdot\langle \boldsymbol{q}\rangle + \frac{1}{\mathcal{S}}\int\limits_{\mathcal{C}_{\sigma\beta}} \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{\sigma\beta}}\,\mathrm{d}l = 0 \tag{3.47}$$

Lorsque la condition limite d'imperméabilité (3.31d) est prise en compte, cela se réduit à :

$$\left\langle h\frac{\partial \rho}{\partial t}\right\rangle + \boldsymbol{\nabla}\cdot\langle \boldsymbol{q}\rangle = 0 \tag{3.48}$$

Pour un temps, concentrons nous sur la moyenne de l'équation (3.31b) qui intervient dans (3.48). Une attention particulière doit être donnée au libre parcours moyen présent dans cette expression du débit massique linéique. Si les collisions intermoléculaires peuvent être assimilées à celles entre sphère dures, λ dépend alors de l'inverse de la masse volumique (Loeb, 2004).

$$\lambda = \frac{M}{\pi\sqrt{2}\delta^2\mathcal{N}_\mathrm{A}\rho} \tag{2.5}$$

Dans cette expression, M est la masse molaire du gaz, $\mathcal{N}_\mathrm{A}$ est le nombre d'Avogadro et δ est le diamètre de collision effectif des molécules de gaz. Dans certaines situations pratiques, l'écoulement peut être considéré comme faiblement compressible à l'échelle d'une SER, ce qui signifie que les variations de la masse volumique du fluide restent petites par rapport à la masse volumique moyenne à l'échelle r_0, bien que cette valeur moyenne puisse montrer des variations substantielles à l'échelle L_0. Nous adoptons cette hypothèse dans la suite de ce travail, ce qui s'exprime par la contrainte suivante (Quintard et Whitaker, 1996; Lasseux *et al.*, 2014) :

$$\widetilde{\rho} \ll \langle\rho\rangle^\beta \tag{3.49}$$

Avec cette contrainte et la décomposition de ρ (voir équation (3.44)), λ peut être considéré uniforme à l'échelle r_0 de telle sorte que sa valeur moyenne, que l'on note $\bar{\lambda}$, se simplifie en l'expression suivante (Lasseux *et al.*, 2014, 2016) :

$$\bar{\lambda} = \frac{M}{\pi\sqrt{2}\delta^2\mathcal{N}_\mathrm{A}\langle\rho\rangle^\beta} \approx \lambda \quad \text{sur la SER} \tag{3.50}$$

Le processus de prise de moyenne peut se poursuivre en prenant la moyenne superficielle de l'équation (3.31b). En considérant l'hypothèse de faible compressibilité, on obtient :

$$\langle \boldsymbol{q}\rangle = -\langle\rho\rangle^\beta \frac{\langle k\boldsymbol{\nabla}p\rangle}{\mu} \tag{3.51}$$

avec k la transmissivité locale donnée par :

$$k = \frac{h^3 + 6\xi\bar{\lambda}h^2}{12} \tag{3.52}$$

L'équation (3.51) représente la forme non-close du débit massique moyen par unité de largeur, car faisant intervenir le gradient de pression à la petite échelle l_β.

Revenons à l'équation (3.48) dans l'optique de simplifier davantage la moyenne du terme instationnaire. Comme le champ des ouvertures h est invariant dans le temps, tout comme la SER, on a :

$$\left\langle h\frac{\partial\rho}{\partial t}\right\rangle = \frac{\partial\langle\rho h\rangle}{\partial t} \tag{3.53}$$

En développant l'opérateur de moyenne sur le terme dérivé et en utilisant les relations (3.39), (3.45) et (3.46), on obtient :

$$\begin{aligned}\langle\rho h\rangle &= \left\langle \langle h\rangle \langle\rho\rangle^{\beta}\right\rangle + \langle\langle h\rangle \widetilde{\rho}\rangle + \left\langle \check{h}\langle\rho\rangle^{\beta}\right\rangle + \left\langle \check{h}\widetilde{\rho}\right\rangle \\ &= \varepsilon_\beta \langle h\rangle \langle\rho\rangle^{\beta} + \varepsilon_\beta \langle h\rangle \langle\widetilde{\rho}\rangle^{\beta} + \varepsilon_\beta\left\langle \check{h}\right\rangle^{\beta}\langle\rho\rangle^{\beta} + \left\langle \check{h}\widetilde{\rho}\right\rangle \\ &= \varepsilon_\beta \langle h\rangle \langle\rho\rangle^{\beta} + \left\langle \check{h}\widetilde{\rho}\right\rangle\end{aligned} \tag{3.54}$$

où l'on a employé la décomposition $h = \langle h\rangle + \check{h}$. Dans le pire des cas, on a l'estimation suivante pour l'ordre de grandeur du terme $\check{h}$:

$$\check{h} = \mathcal{O}\left(\langle h\rangle\right) \tag{3.55}$$

En effet, dans le cas où les deux surfaces seraient très éloignées l'une de l'autre, on aurait $\check{h} \ll \langle h\rangle$, ce qui serait une contrainte encore plus favorable comme on pourra le voir ci-après. On a alors les estimations suivantes pour les deux termes de l'équation (3.54) :

$$\varepsilon_\beta \langle h\rangle \langle\rho\rangle^{\beta} = \mathcal{O}\left(\varepsilon_\beta \langle h\rangle \langle\rho\rangle^{\beta}\right) \tag{3.56}$$

$$\left\langle \check{h}\widetilde{\rho}\right\rangle = \mathcal{O}\left(\langle h\rangle \widetilde{\rho}\right) \tag{3.57}$$

Sous la contrainte de faible compressibilité à l'échelle de la SER, le second terme de l'équation (3.54) est négligeable devant le premier. L'équation macroscopique de conservation de la masse (3.48) se simplifie alors et donne :

$$\varepsilon_\beta \langle h\rangle \frac{\partial\langle\rho\rangle^{\beta}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\langle\boldsymbol{q}\rangle = 0 \tag{3.58}$$

Le terme $\varepsilon_\beta \langle h\rangle$ correspond à un coefficient de capacité, volume moyen de fluide emmagasinable par unité de surface de la fracture. On introduit ensuite le temps caractéristique de relaxation de la masse volumique à l'échelle macroscopique, τ, et on estime l'ordre de grandeur des deux termes de l'équation précédente comme :

$$\varepsilon_\beta \langle h\rangle \frac{\partial\langle\rho\rangle^{\beta}}{\partial t} = \mathcal{O}\left(\frac{\varepsilon_\beta \langle h\rangle \Delta\langle\rho\rangle^{\beta}}{\tau}\right) \tag{3.59}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\langle\boldsymbol{q}\rangle = \mathcal{O}\left(\frac{\langle\rho\rangle^{\beta} k\langle p\rangle^{\beta}}{\mu L_0 L_p}\right) \tag{3.60}$$

où L_p est la longueur caractéristique selon laquelle la pression moyenne varie significativement. De cette façon, on estime τ comme :

$$\tau = \mathcal{O}\left(\mu\frac{\varepsilon_\beta \langle h\rangle L_0 L_p}{k\langle p\rangle^{\beta}}\frac{\Delta\langle\rho\rangle^{\beta}}{\langle\rho\rangle^{\beta}}\right) \tag{3.61}$$

Avant de passer à la fermeture du problème, l'équation d'état du gaz doit être exprimée sous sa forme macroscopique. En raison de l'hypothèse de faible compressibilité, il est possible de montrer que la moyenne de l'équation (3.4c) donne (Lasseux *et al.*, 2014) :

$$\langle\rho\rangle^{\beta} = \varphi(\langle p\rangle^{\beta}) \tag{3.62}$$

3.2.2 Fermeture du problème

Pour aller vers le modèle macroscopique de forme fermée, on commence par soustraire l'équation macroscopique (3.58) au problème local donné par les équations (3.31b) et (3.31a). On a :

$$h\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{q} - \varepsilon_\beta \langle h\rangle \frac{\partial \langle\rho\rangle^\beta}{\partial t} - \boldsymbol{\nabla}\cdot\langle\boldsymbol{q}\rangle = 0 \tag{3.63}$$

soit encore, après décomposition de la masse volumique :

$$(h - \varepsilon_\beta \langle h\rangle)\frac{\partial \langle\rho\rangle^\beta}{\partial t} + h\frac{\partial \widetilde{\rho}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\check{\boldsymbol{q}} = 0 \tag{3.64}$$

On introduit maintenant les temps caractéristiques à l'échelle microscopique T^* et t^*. Ainsi, on estime les ordres de grandeur de chaque terme de l'équation précédente comme :

$$(h - \varepsilon_\beta \langle h\rangle)\frac{\partial \langle\rho\rangle^\beta}{\partial t} = \mathcal{O}\left(\frac{(1-\varepsilon_\beta)\langle h\rangle \Delta\langle\rho\rangle^\beta}{T^*}\right) \tag{3.65}$$

$$h\frac{\partial \widetilde{\rho}}{\partial t} = \mathcal{O}\left(\frac{\langle h\rangle \Delta\widetilde{\rho}}{t^*}\right) \tag{3.66}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\check{\boldsymbol{q}} = \mathcal{O}\left(\frac{\langle\rho\rangle^\beta k \langle p\rangle^\beta}{\mu l_\beta L_p}\right) \tag{3.67}$$

De ces estimations on en déduit les ordres de grandeur suivants pour les temps caractéristiques à l'échelle de la fermeture :

$$T^* = \mathcal{O}\left(\mu\frac{(1-\varepsilon_\beta)\langle h\rangle l_\beta L_p}{k\langle p\rangle^\beta}\frac{\Delta\langle\rho\rangle^\beta}{\langle\rho\rangle^\beta}\right) \tag{3.68}$$

$$t^* = \mathcal{O}\left(\mu\frac{\langle h\rangle l_\beta L_p}{k\langle p\rangle^\beta}\frac{\Delta\widetilde{\rho}}{\langle\rho\rangle^\beta}\right) \tag{3.69}$$

Ces temps correspondent au temps caractéristiques de relaxation à l'échelle microscopique des variations de masse volumique $\Delta\langle\rho\rangle^\beta$ et $\Delta\widetilde{\rho}$ respectivement. En les comparant au temps caractéristique du même processus à l'échelle macroscopique τ, donné par l'équation (3.61), et en utilisant la contrainte d'échelles (3.43), on a $\tau \gg T^*, t^*$. Ceci indique que le processus de relaxation à l'échelle microscopique est beaucoup plus rapide que celui à l'échelle macroscopique. En conséquence, l'équation de conservation de la masse à l'échelle de la fermeture (3.64) peut être réduite à sa forme stationnaire :

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\check{\boldsymbol{q}} = 0 \tag{3.70}$$

Le processus de fermeture se poursuit en se remémorant d'abord la décomposition $\check{\boldsymbol{q}} = \boldsymbol{q} - \langle\boldsymbol{q}\rangle$. En utilisant les expressions (3.31b) et (3.51), ainsi que l'hypothèse de faible compressibilité et en insérant le tout dans l'équation (3.70), on obtient :

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\langle\rho\rangle^\beta\left\{k\boldsymbol{\nabla}p - \langle k\boldsymbol{\nabla}p\rangle\right\}\right) = 0 \tag{3.71}$$

En employant la décomposition de la pression donnée par l'équation (3.44), cette dernière expression prend la forme suivante :

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\langle\rho\rangle^\beta\left\{\check{k}\boldsymbol{\nabla}\langle p\rangle^\beta + k\boldsymbol{\nabla}\widetilde{p} - \langle k\boldsymbol{\nabla}\widetilde{p}\rangle\right\}\right) = 0 \tag{3.72}$$

avec la notation

$$\check{k} = k - \langle k\rangle \tag{3.73}$$

Dans l'équation (3.72), $\boldsymbol{\nabla}\langle p\rangle^{\beta}$ a été considéré comme uniforme sur la surface représentative et a donc été sorti de l'opérateur de prise de moyenne. Cela peut se justifier par la contrainte $r_0 \ll L_{p1}$ où L_{p1} représente l'échelle de longueur caractéristique à laquelle le gradient de pression moyenne présente des variations significatives (Whitaker, 1999). Comme L_{p1} est supposé être du même ordre de grandeur que L_0, la contrainte d'échelles précédente est équivalente à celle donnée par la relation (3.43).

L'équation (3.72) peut être simplifiée en analysant l'ordre de grandeur des différents termes qui la composent. Tout d'abord, en se concentrant sur la condition limite (3.31d) qui peut s'écrire

$$\boldsymbol{\nabla}\widetilde{p}\cdot\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{\sigma\beta}} = -\boldsymbol{\nabla}\langle p\rangle^{\beta}\cdot\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{\sigma\beta}} \tag{3.74}$$

l'ordre de grandeur suivant pour $\widetilde{p}$ peut en être extrait.

$$\widetilde{p} = \mathcal{O}\left(\langle p\rangle^{\beta}\frac{l_\beta}{L_p}\right) \tag{3.75}$$

Dans l'équation (3.75), les longueurs caractéristiques de variation de $\widetilde{p}$ et $\langle p\rangle^{\beta}$ ont été respectivement choisies comme l_β et L_p, avec toujours l'idée que $L_p \sim L_0$. De ce constat, l'ordre de grandeur des deux derniers termes dans le membre de gauche de l'équation (3.72) peuvent s'exprimer comme :

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\langle\rho\rangle^{\beta}k\boldsymbol{\nabla}\widetilde{p}\right) = \mathcal{O}\left(\frac{\langle\rho\rangle^{\beta}k\langle p\rangle^{\beta}}{l_\beta L_p}\right) \tag{3.76}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\langle\rho\rangle^{\beta}\langle k\boldsymbol{\nabla}\widetilde{p}\rangle\right) = \mathcal{O}\left(\frac{\langle\rho\rangle^{\beta}k\langle p\rangle^{\beta}}{L_0 L_p}\right) \tag{3.77}$$

En raison de la hiérarchie d'échelles (relation (3.43)), le troisième terme de l'équation (3.72) peut être négligé et cela donne (en développant la divergence) :

$$\langle\rho\rangle^{\beta}\boldsymbol{\nabla}\check{k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\langle p\rangle^{\beta} + \check{k}\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\langle\rho\rangle^{\beta}\boldsymbol{\nabla}\langle p\rangle^{\beta}\right) + \langle\rho\rangle^{\beta}\boldsymbol{\nabla}\cdot(k\boldsymbol{\nabla}\widetilde{p}) + k\boldsymbol{\nabla}\widetilde{p}\cdot\boldsymbol{\nabla}\langle\rho\rangle^{\beta} = 0 \tag{3.78}$$

Une fois de plus, une analyse de l'ordre de grandeur de ces différents termes est conduite, cela donne :

$$\langle\rho\rangle^{\beta}\boldsymbol{\nabla}\check{k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\langle p\rangle^{\beta} = \mathcal{O}\left(\frac{\langle\rho\rangle^{\beta}\check{k}\langle p\rangle^{\beta}}{l_\beta L_p}\right) \tag{3.79}$$

$$\check{k}\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\langle\rho\rangle^{\beta}\boldsymbol{\nabla}\langle p\rangle^{\beta}\right) = \mathcal{O}\left(\frac{\langle\rho\rangle^{\beta}\check{k}\langle p\rangle^{\beta}}{L_0 L_p}\right) \tag{3.80}$$

$$\langle\rho\rangle^{\beta}\boldsymbol{\nabla}\cdot(k\boldsymbol{\nabla}\widetilde{p}) = \mathcal{O}\left(\frac{\langle\rho\rangle^{\beta}k\widetilde{p}}{{l_\beta}^2}\right) \tag{3.81}$$

$$k\boldsymbol{\nabla}\widetilde{p}\cdot\boldsymbol{\nabla}\langle\rho\rangle^{\beta} = \mathcal{O}\left(\frac{\langle\rho\rangle^{\beta}k\widetilde{p}}{l_\beta L_\rho}\right) \tag{3.82}$$

Dans la dernière expression, L_ρ a été utilisée pour désigner la longueur caractéristique de variation de $\langle\rho\rangle^{\beta}$, avec encore le jugement $L_\rho \sim L_0$. En utilisant une fois encore la contrainte d'échelles (c'est-à-dire $l_\beta \ll L_0$), le second et dernier terme de l'expression (3.78) sont négligeables devant les deux autres. En conséquence, l'équation (3.71) prend finalement la forme simplifiée ci-dessous :

$$\boldsymbol{\nabla}\check{k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\langle p\rangle^{\beta} + \boldsymbol{\nabla}\cdot(k\boldsymbol{\nabla}\widetilde{p}) = 0 \tag{3.83}$$

L'équation (3.83) en plus de la condition limite associée donnée par l'équation (3.74) forment le problème de fermeture, bien que des conditions limites externes soient encore requises. Cependant, il n'est pas dans notre intérêt de résoudre ce problème de fermeture sur la fracture dans son ensemble, mais plutôt sur un élément représentatif contenant toute l'information microstructurale (c'est-à-dire sur une SER). Cela permet d'adopter une représentation pseudo-périodique de la fracture complète et d'appliquer des conditions aux limites périodiques pour la déviation de la pression $\widetilde{p}$ sur la SER. Une telle condition peut s'écrire :

$$\widetilde{p}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\Pi_i}) = \widetilde{p}(\boldsymbol{x}), \quad i = x, y \tag{3.84}$$

avec $\boldsymbol{x}$ le vecteur position localisant n'importe quel point dans la surface représentative, et $\boldsymbol{\Pi_i}$ les deux vecteurs de base permettant de décrire la structure spatialement périodique. Le problème de fermeture local pour $\widetilde{p}$ peut alors s'écrire sur l'élément périodique :

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot (k \boldsymbol{\nabla} \widetilde{p}) = -\boldsymbol{\nabla} \check{k} \cdot \boldsymbol{\nabla} \langle p \rangle^{\beta} \qquad \text{dans } \mathcal{S}_{\beta} \tag{3.85a}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \widetilde{p} \cdot \boldsymbol{n_{\sigma\beta}} = -\boldsymbol{\nabla} \langle p \rangle^{\beta} \cdot \boldsymbol{n_{\sigma\beta}} \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \tag{3.85b}$$

$$\widetilde{p}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\Pi_i}) = \widetilde{p}(\boldsymbol{x}) \qquad i = x, y \tag{3.85c}$$

Il s'agit là d'un problème linéaire pour la variable $\widetilde{p}$. En conséquence, la solution peut être cherchée comme combinaison linéaire des différents termes sources qui rendent le problème inhomogène. Ici, $\boldsymbol{\nabla} \langle p \rangle^{\beta}$ est l'unique terme source et la déviation de la pression peut être déterminée en utilisant la représentation suivante :

$$\widetilde{p} = \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{\nabla} \langle p \rangle^{\beta} + \gamma \tag{3.86}$$

$\boldsymbol{b}$ est le vecteur de fermeture transcrivant l'effet du gradient de pression moyenne sur la déviation de pression, tandis ce que γ est une fonction quelconque. En substituant la représentation (3.86) dans les équations (3.85) et en gardant à l'esprit que γ est arbitraire, nous sommes libres de choisir le vecteur $\boldsymbol{b}$ pour qu'il obéisse par exemple au problème suivant :

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot (k \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b}) = -\boldsymbol{\nabla} \check{k} \qquad \text{dans } \mathcal{S}_{\beta} \tag{3.87a}$$

$$\boldsymbol{n_{\sigma\beta}} \cdot \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b} = -\boldsymbol{n_{\sigma\beta}} \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \tag{3.87b}$$

$$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\Pi_i}) = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) \qquad i = x, y \tag{3.87c}$$

ce qui donne pour γ :

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot (k \boldsymbol{\nabla} \gamma) = 0 \qquad \text{dans } \mathcal{S}_{\beta} \tag{3.88a}$$

$$\boldsymbol{n_{\sigma\beta}} \cdot \boldsymbol{\nabla} \gamma = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \tag{3.88b}$$

$$\gamma(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\Pi_i}) = \gamma(\boldsymbol{x}) \qquad i = x, y \tag{3.88c}$$

Avec ce choix pour $\boldsymbol{b}$, on peut montrer que γ est une constante (Zaouter *et al.*, 2018), ce qui n'a alors aucun impact sur le modèle macroscopique final, ne faisant intervenir que le gradient de $\widetilde{p}$ (3.83). La fermeture peut désormais être finalisée en exprimant le modèle macroscopique en fonction des variables macroscopiques.

3.2.3 Modèle macroscopique d'écoulement

La décomposition de la pression ainsi que la représentation (3.86) pour la déviation peuvent être introduites dans l'équation (3.51) pour obtenir la forme fermée du modèle

macroscopique d'écoulement donnant, le débit massique moyen par unité de largeur de fracture :

$$\langle \boldsymbol{q} \rangle = -\langle \rho \rangle^{\beta} \frac{\left\langle k \boldsymbol{\nabla} \langle p \rangle^{\beta} + k \boldsymbol{\nabla} \left(\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{\nabla} \langle p \rangle^{\beta} \right) \right\rangle}{\mu} \tag{3.89}$$

Comme $\boldsymbol{\nabla} \langle p \rangle^{\beta}$ est considéré comme uniforme à l'échelle de la SER, cela donne :

$$\langle \boldsymbol{q} \rangle = -\langle \rho \rangle^{\beta} \frac{\langle k \left(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b} \right) \rangle}{\mu} \cdot \boldsymbol{\nabla} \langle p \rangle^{\beta} \tag{3.90}$$

En résumé, le modèle de Reynolds macroscopique pour un écoulement en fracture d'un gaz faiblement compressible en régime glissant est donné par :

$$\varepsilon_{\beta} \langle h \rangle \frac{\partial \langle \rho \rangle^{\beta}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \langle \boldsymbol{q} \rangle = 0 \tag{3.91a}$$

$$\langle \boldsymbol{q} \rangle = -\langle \rho \rangle^{\beta} \frac{\boldsymbol{K}}{\mu} \cdot \boldsymbol{\nabla} \langle p \rangle^{\beta} \tag{3.91b}$$

$$\langle \rho \rangle^{\beta} = \varphi(\langle p \rangle^{\beta}) \tag{3.91c}$$

avec $\boldsymbol{K}$ le tenseur de transmissivité macroscopique défini par :

$$\boldsymbol{K} = \langle k \left(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b} \right) \rangle \tag{3.92}$$

Ce tenseur de transmissivité macroscopique est entièrement déterminé par la solution du problème de fermeture (3.87) pour la variable $\boldsymbol{b}$. On peut noter que ce problème définit $\boldsymbol{b}$ à une constante près, ce qui n'a cependant aucun impact sur $\boldsymbol{K}$ car seul intervient $\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b}$. Pour fixer la valeur de $\boldsymbol{b}$, on choisit généralement $\langle \boldsymbol{b} \rangle = 0$. D'autre part, le problème de fermeture n'est pas intrinsèque car il ne dépend pas uniquement de l'ouverture locale h de la fracture, mais aussi de la masse volumique moyenne $\langle \rho \rangle^{\beta}$ (ou du libre parcours moyen représentatif $\bar{\lambda}$), présente implicitement dans k. Le tenseur $\boldsymbol{K}$ est donc lui aussi non-intrinsèque. Enfin, il est possible de montrer que ce tenseur de transmissivité est symétrique quelle que soit la microstructure et la masse volumique moyenne (Lasseux et Valdes Parada, 2017).

3.2.4 Décomposition du problème

3.2.4.1 Développement en série du problème de fermeture

Comme indiqué précédemment, le problème de fermeture pour $\boldsymbol{b}$ n'est pas intrinsèque et mène à un tenseur de transmissivité apparente $\boldsymbol{K}$ incluant conjointement les effets visqueux et de glissement. Pour montrer le rôle particulier joué par le glissement aux parois, une décomposition en série du problème de fermeture est réalisée. Reformulons d'abord l'équation (3.87a) en introduisant la décomposition de k donnée par la relation (3.73), ce qui donne :

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(k \left\{ \boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b} \right\} \right) = 0 \tag{3.93}$$

Pour obtenir ce résultat, le fait que $\check{k}$ et $\langle k \rangle$ sont du même ordre de grandeur ainsi que la contrainte d'échelles $l_{\beta} \ll L_0$ a été utilisé, si bien que $\boldsymbol{\nabla} \langle k \rangle \ll \boldsymbol{\nabla} \check{k}$. Le problème de fermeture se réécrit alors :

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(k \left\{ \boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b} \right\} \right) = 0 \qquad \text{dans } \mathcal{S}_{\beta} \tag{3.94a}$$

$$\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\beta}} \cdot \left(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b} \right) = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \tag{3.94b}$$

$$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\Pi}_{\boldsymbol{i}}) = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) \qquad i = x, y \tag{3.94c}$$

La poursuite du développement du problème de fermeture « complet » (3.94) est effectuée en utilisant la forme adimensionnelle de ce dernier. On commence pour cela par définir les quantités adimensionnelles suivantes :

$$\begin{aligned} \underline{h} = h/h_\beta \quad &, \quad \underline{k} = k/h_\beta^3 \quad , \quad \underline{\boldsymbol{K}} = \boldsymbol{K}/h_\beta^3 \\ \underline{\boldsymbol{\nabla}} = l_\beta \boldsymbol{\nabla} \quad &, \quad \underline{\boldsymbol{b}} = \boldsymbol{b}/l_\beta \quad , \quad \overline{\mathrm{Kn}} = \bar{\lambda}/h_\beta \end{aligned} \tag{3.95}$$

où, comme précédemment, h_β est une ouverture caractéristique de la surface représentative et l_β est une longueur caractéristique de variation de la rugosité dans le plan horizontal sur la SER. On introduit également le nombre de Knudsen de référence $\overline{\mathrm{Kn}}$, associé au libre parcours moyen de référence $\bar{\lambda}$. En conséquence, le problème de fermeture se réécrit de la façon suivante sous forme adimensionnelle :

$$\underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \left(\underline{k}\left\{\boldsymbol{I} + \underline{\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{b}}\right\}\right) = 0 \qquad \text{dans } \mathcal{S}_\beta \tag{3.96a}$$

$$\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{\sigma\beta}} \cdot \left(\boldsymbol{I} + \underline{\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{b}}\right) = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \tag{3.96b}$$

$$\underline{\boldsymbol{b}}(\underline{\boldsymbol{x}} + \underline{\boldsymbol{\Pi}_{\boldsymbol{i}}}) = \underline{\boldsymbol{b}}(\underline{\boldsymbol{x}}) \qquad i = x, y \tag{3.96c}$$

avec la transmissivité locale adimensionnelle qui dépend de manière évidente du nombre de Knudsen de référence comme :

$$\underline{k} = \frac{\underline{h}^3 + 6\xi\overline{\mathrm{Kn}}\underline{h}^2}{12} \tag{3.97}$$

Dans le régime glissant, la valeur du paramètre de glissement $\xi\overline{\mathrm{Kn}}$ est supposée rester petite devant l'unité (Karniadakis *et al.*, 2005). Nous cherchons donc à exprimer le vecteur de fermeture $\boldsymbol{b}$ sous forme d'une série de ce petit paramètre. Un tel développement sous forme adimensionnelle s'écrit à l'ordre n :

$$\begin{aligned} \underline{\boldsymbol{b}} &= \sum_{p=0}^{n} (6\xi\overline{\mathrm{Kn}})^p \underline{\boldsymbol{b_p}} + \mathcal{O}\left((6\xi\overline{\mathrm{Kn}})^{n+1}\right) \\ &= \underline{\boldsymbol{b_0}} + 6\xi\overline{\mathrm{Kn}}\underline{\boldsymbol{b_1}} + (6\xi\overline{\mathrm{Kn}})^2\underline{\boldsymbol{b_2}} + \cdots \end{aligned} \tag{3.98}$$

où chaque variable de fermeture adimensionnelle à l'ordre p est définie de la manière suivante :

$$\underline{\boldsymbol{b_p}} = \frac{{h_\beta}^p}{l_\beta}\boldsymbol{b_p} \tag{3.99}$$

Quand les expressions (3.97) et (3.98) sont introduites dans le problème de fermeture adimensionnel (3.96), on peut alors séparer ce problème complet en plusieurs sous-problèmes à l'ordre souhaité. Ces sous-problèmes découlent de l'identification aux ordres successifs en $\xi\overline{\mathrm{Kn}}$. En revenant à la forme dimensionnelle, cela donne :

Sous-problème à l'ordre 0

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(h^3\left\{\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{b_0}\right\}\right) = 0 \qquad \text{dans } \mathcal{S}_\beta \tag{3.100a}$$

$$\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{\sigma\beta}} \cdot \left(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{b_0}\right) = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \tag{3.100b}$$

$$\boldsymbol{b_0}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\Pi}_{\boldsymbol{i}}) = \boldsymbol{b_0}(\boldsymbol{x}) \qquad i = x, y \tag{3.100c}$$

Sous-problème à l'ordre 1

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(h^2\left\{\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{b_0}\right\} + h^3\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{b_1}\right) = 0 \qquad \text{dans } \mathcal{S}_\beta \tag{3.101a}$$

$$\boldsymbol{n}_{\boldsymbol{\sigma\beta}} \cdot \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{b_1} = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \tag{3.101b}$$

$$\boldsymbol{b_1}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\Pi}_{\boldsymbol{i}}) = \boldsymbol{b_1}(\boldsymbol{x}) \qquad i = x, y \tag{3.101c}$$

Sous-problème à l'ordre $p \geqslant 2$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(h^2 \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_{p-1}} + h^3 \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_p} \right) = 0 \qquad \text{dans } \mathcal{S}_\beta \tag{3.102a}$$

$$\boldsymbol{n_{\sigma\beta}} \cdot \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_p} = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \tag{3.102b}$$

$$\boldsymbol{b_p}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\Pi_i}) = \boldsymbol{b_p}(\boldsymbol{x}) \qquad i = x, y \tag{3.102c}$$

On remarque dans un premier temps que tous ces sous-problèmes sont intrinsèques car ils ne font intervenir que la micro-géométrie de la structure via l'ouverture h. D'autre part, le problème à l'ordre zéro (3.100) correspond à celui fournissant la transmissivité intrinsèque du contact $\boldsymbol{K_0}$ (ce qui sera montré plus loin dans cette section), correspondant à un changement d'échelle de l'équation de Reynolds dans le cas sans glissement (Prat *et al.*, 2002; Vallet *et al.*, 2009). On peut enfin noter que chaque sous-problème à l'ordre $p \geqslant 1$ est explicitement couplé avec le sous-problème à l'ordre directement précédent $p-1$. Ce couplage étant néanmoins différent entre le premier ordre (3.101) et les ordres supérieurs à deux (3.102), ces derniers possédant tous la même forme à partir de ce rang.

3.2.4.2 Développement en série du tenseur de transmissivité macroscopique

Après avoir décomposé en série le problème de fermeture, le développement se poursuit maintenant sur le tenseur de transmissivité macroscopique défini par l'équation (3.92), que l'on peut réécrire sous forme adimensionnelle :

$$\underline{\boldsymbol{K}} = \langle \underline{k} \left(\boldsymbol{I} + \underline{\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b}} \right) \rangle \tag{3.103}$$

Comme précédemment, en introduisant l'expression (3.97) et le développement (3.98) dans l'équation (3.103), on peut séparer ce tenseur comme somme de différents termes aux ordres successifs en $\xi\overline{\mathrm{Kn}}$. Pour cela, on peut tout d'abord préciser la quantité suivante :

$$\begin{aligned} 12\underline{k} \left(\boldsymbol{I} + \underline{\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b}} \right) =& \underline{h^3} \left(\boldsymbol{I} + \underline{\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_0}} \right) + 6\xi\overline{\mathrm{Kn}} \left(\underline{h^2} \left\{ \boldsymbol{I} + \underline{\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_0}} \right\} + \underline{h^3} \underline{\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_1}} \right) + \\ & \sum_{p=2}^{n} (6\xi\overline{\mathrm{Kn}})^p \left(\underline{h^2} \underline{\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_{p-1}}} + \underline{h^3} \underline{\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_p}} \right) + \mathcal{O}\left((6\xi\overline{\mathrm{Kn}})^{n+1} \right) \end{aligned} \tag{3.104}$$

En prenant en compte la relation (3.104) dans la définition (3.103) et en revenant sous forme dimensionnelle, on peut alors définir la forme approximée du tenseur de transmissivité macroscopique $\boldsymbol{K}$ à l'ordre n comme :

$$\boldsymbol{K} \approx \sum_{p=0}^{n} (6\xi\bar{\lambda})^p \boldsymbol{K_p} = \boldsymbol{K_0} + 6\xi\bar{\lambda}\boldsymbol{K_1} + (6\xi\bar{\lambda})^2 \boldsymbol{K_2} + \cdots \tag{3.105}$$

Dans cette équation (3.105), $\boldsymbol{K_0}$ est le tenseur de transmissivité macroscopique intrinsèque qui correspond à la partie purement visqueuse de $\boldsymbol{K}$ tandis que les tenseurs $\boldsymbol{K_p}$ sont les tenseurs de correction de glissement à l'ordre p[1]. Ces tenseurs sont définis des façons suivantes :

$$\boldsymbol{K_0} = \frac{1}{12} \left\langle h^3 \left(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_0} \right) \right\rangle \tag{3.106a}$$

$$\boldsymbol{K_1} = \frac{1}{12} \left\langle h^2 \left(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_0} \right) + h^3 \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_1} \right\rangle \tag{3.106b}$$

$$\boldsymbol{K_p} = \frac{1}{12} \left\langle h^2 \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_{p-1}} + h^3 \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_p} \right\rangle \qquad \text{pour } p \geqslant 2 \tag{3.106c}$$

Tous les tenseurs définis par les relations (3.106) sont intrinsèques comme ils sont déterminés à partir de solutions de sous-problèmes de fermeture également intrinsèques (3.100),

1. $\boldsymbol{K_0}$ ayant la dimension de m^3, celle des tenseurs $\boldsymbol{K_p}$ est alors des $\mathrm{m}^{3-\mathrm{p}}$.

(3.101) et (3.102). En se restreignant à l'approximation au premier ordre dans l'expression (3.105), une version linéarisée du tenseur de transmissivité est obtenue, correspondant à l'analogue tensoriel d'un écoulement glissant en fracture du modèle de perméabilité apparente de KLINKENBERG (Klinkenberg, 1941). En effet, l'expression du libre parcours moyen de réference $\bar{\lambda}$ de l'équation (3.50), dépendant de l'inverse de la masse volumique $\langle\rho\rangle^\beta$, peut se réécrire de la manière suivante si le gaz est considéré parfait et quasi-isotherme (c'est-à-dire $\langle T\rangle^\beta \gg \widetilde{T}$) (Cercignani, 1988).

$$\bar{\lambda} = \frac{\mu}{\langle p\rangle^\beta}\sqrt{\frac{\pi R\langle T\rangle^\beta}{2M}} \tag{3.107}$$

où R est la constante des gaz parfaits. En insérant cette dernière expression dans l'équation (3.105) tronquée au premier ordre, on obtient la version linéarisée de $\boldsymbol{K}$ en fonction de la pression moyenne dans une formulation « à la KLINKENBERG », semblable à celle d'un milieu poreux tridimensionnel (Lasseux *et al.*, 2014) :

$$\boldsymbol{K} \approx \boldsymbol{K_0}\left(\boldsymbol{I} + \frac{1}{\langle p\rangle^\beta}\boldsymbol{B}\right) \tag{3.108}$$

avec $\boldsymbol{B}$ le tenseur de KLINKENBERG bidimensionnel, défini comme :

$$\boldsymbol{B} = 6\xi\mu\sqrt{\frac{\pi R\langle T\rangle^\beta}{2M}}\boldsymbol{K_0}^{-1}\boldsymbol{K_1} \tag{3.109}$$

3.2.5 Aspects numériques

Pour obtenir les différents tenseurs présentés dans cette section, il est nécessaire de résoudre les problèmes de fermeture associés. La discrétisation des ces problèmes de fermeture linéaires par la méthode des volumes finis sur un maillage cartésien régulier est présentée en annexe C. Le schéma numérique ainsi obtenu est d'ordre deux en espace (Moukalled *et al.*, 2016). Le système linéaire émanent de cette discrétisation est symétrique, défini positif et creux. Il est résolu par la méthode itérative du gradient conjugué avec un préconditionnement par la diagonale (Saad, 2003).

3.2.6 Exemples de problèmes résolus

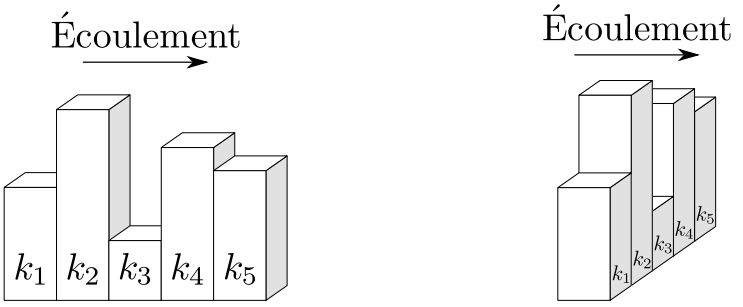
3.2.6.1 Validation sur des géométries simples

Dans un premier temps, une validation numérique du modèle macroscopique (3.91) est réalisée sur des géométries simples pour lesquelles le tenseur de transmissivité macroscopique peut être déterminé analytiquement à partir du champ de transmissivités locales. Sa valeur est ensuite comparée à celle obtenue par résolution du problème de fermeture (3.87). Dans le cas général, le champ des ouvertures varie à la fois selon les directions x et y (c'est-à-dire $h = h(x, y)$). Cependant, lorsque ce dernier ne varie que selon une seule direction (x par exemple), le champ des ouvertures est alors assimilable à un jeu de transmissivités locales assemblées dans une configuration purement sérielle ou parallèle, selon si le gradient de pression est appliqué selon x ou y respectivement (voir figure 3.6).

Ainsi, comme le fluide est considéré macroscopiquement incompressible, en configuration sérielle, la transmissivité macroscopique, K_s, est donnée par la moyenne harmonique des transmissivités locales (Zimmerman et Bodvarsson, 1996), c'est-à-dire :

$$K_s = \left\langle k^{-1}\right\rangle^{-1} = \frac{1}{12}\left\langle\frac{1}{h^3 + \alpha h^2}\right\rangle^{-1} \tag{3.110}$$

Dans la configuration parallèle, la transmissivité macroscopique, K_p, est en revanche donnée par la moyenne arithmétique des transmissivités locales :



(a) En série. (b) En parallèle.

FIGURE 3.6 – Schématisation de l'arrangement de transmissivités.

$$K_p = \langle k \rangle = \frac{1}{12} \left\langle h^3 + \alpha h^2 \right\rangle \tag{3.111}$$

où, par soucis de clarté, nous dénotons le paramètre de glissement $\alpha = 6\xi\bar{\lambda}$. Dans ce qui suit, deux champs des ouvertures, variant selon la direction x uniquement, sont étudiés. Ils sont définis pour $x \in [0, l_x]$ et sont d'ouverture moyenne h_0.

Champ sinusoïdal Dans un premier temps, le cas d'un champ des ouvertures sinusoïdal donné ci-contre est traité.

$$h(x) = h_0 \left(1 + \Upsilon \cos\left(\frac{2\pi x}{l_x}\right)\right) \tag{3.112}$$

où l'amplitude Υ est supposée être inférieure à l'unité (pas de contact) et l_x correspond à la période spatiale. Le calcul de la transmissivité parallèle par l'équation(3.111) est triviale et donne :

$$K_p = \left(\frac{3\Upsilon^2 + 2}{2} + \frac{\Upsilon^2 + 2}{2}\frac{\alpha}{h_0}\right)\frac{{h_0}^3}{12} \tag{3.113}$$

La détermination de la transmissivité sérielle à l'aide de l'équation (3.110) est un peu plus calculatoire. On commence par définir l'intégrale ci-dessous :

$$J = \frac{1}{l_x}\int_0^{l_x} \frac{1}{h^3(x) + \alpha h^2(x)}\,\mathrm{d}x \tag{3.114}$$

tout en remarquant que $K_s = J^{-1}/12$. En effectuant une décomposition en éléments simples de l'intégrande, on obtient :

$$J = \frac{1}{l_x}\int_0^{l_x} \frac{1}{\alpha h^2(x)}\,\mathrm{d}x - \frac{1}{l_x}\int_0^{l_x} \frac{1}{\alpha^2 h(x)}\,\mathrm{d}x + \frac{1}{l_x}\int_0^{l_x} \frac{1}{\alpha^2\left(h(x) + \alpha\right)}\,\mathrm{d}x \tag{3.115}$$

Les deux premières intégrales de J peuvent s'évaluer en utilisant le changement de variable « de SOMMERFELD » (Hamrock *et al.*, 2004), tandis que l'expression de la troisième intégrale peut se trouver par exemple dans (Abramowitz et Stegun, 1964). L'expression finale de J est alors donnée par :

$$J = \frac{1}{\alpha {h_0}^2\left(1 - \Upsilon^2\right)^{3/2}} - \frac{1}{\alpha^2 h_0\left(1 - \Upsilon^2\right)^{1/2}} + \frac{1}{\alpha^2\sqrt{\left(h_0 + \alpha\right)^2 - \left(h_0\Upsilon\right)^2}} \tag{3.116}$$

ce qui permet d'obtenir la transmissivité sérielle de la surface sinusoïdale comme :

$$K_s = \frac{\alpha^2 \left(1-\Upsilon^2\right)^{3/2} \sqrt{\left(h_0+\alpha\right)^2 - \left(h_0\Upsilon\right)^2}}{h_0 \left(\alpha - h_0\left(1-\Upsilon^2\right)\right) \sqrt{\left(h_0+\alpha\right)^2 - \left(h_0\Upsilon\right)^2} + {h_0}^3 \left(1-\Upsilon^2\right)^{3/2}} \frac{{h_0}^3}{12} \tag{3.117}$$

Dans le cas limite où l'on ne considère pas de glissement ($\alpha \to 0$), on obtient la transmissivité intrinsèque dans la configuration parallèle, K_{0p}, comme :

$$K_{0p} = \lim_{\alpha \to 0} K_p = \frac{3\Upsilon^2 + 2}{2} \frac{{h_0}^3}{12} \tag{3.118}$$

Pour le cas sériel, on obtient la limite K_{0s} en utilisant par exemple deux fois la règle de l'HÔPITAL :

$$K_{0s} = \lim_{\alpha \to 0} K_s = \frac{2\left(1-\Upsilon^2\right)^{5/2}}{2+\Upsilon^2} \frac{{h_0}^3}{12} \tag{3.119}$$

Ces deux derniers résultats sont cohérents avec ceux de la littérature pour un écoulement incompressible sans glissement (Letalleur *et al.*, 2002).

Champ exponentiel Dans le second cas, on considère un champ des ouvertures variant de façon exponentielle comme :

$$h(x) = H \exp\left(-\frac{\Upsilon x}{l_x}\right) \tag{3.120}$$

où Υ est une constante positive et H est donné par :

$$H = \frac{\Upsilon}{1-\mathrm{e}^{-\Upsilon}} h_0 \tag{3.121}$$

Les expressions analytiques des intégrales (3.110) et (3.111) donnent les transmissivités K_s et K_p comme :

$$K_p = \left(\frac{1-\mathrm{e}^{-3\Upsilon}}{3\Upsilon} + \frac{1-\mathrm{e}^{-2\Upsilon}}{2\Upsilon}\frac{\alpha}{H}\right)\frac{H^3}{12} \tag{3.122}$$

$$K_s = \frac{2\alpha^3\Upsilon}{2H^3 \ln\left(\dfrac{H+\alpha\mathrm{e}^{\Upsilon}}{H+\alpha}\right) + 2\alpha H^2\left(1-\mathrm{e}^{\Upsilon}\right) - \alpha^2 H\left(1-\mathrm{e}^{2\Upsilon}\right)} \frac{H^3}{12} \tag{3.123}$$

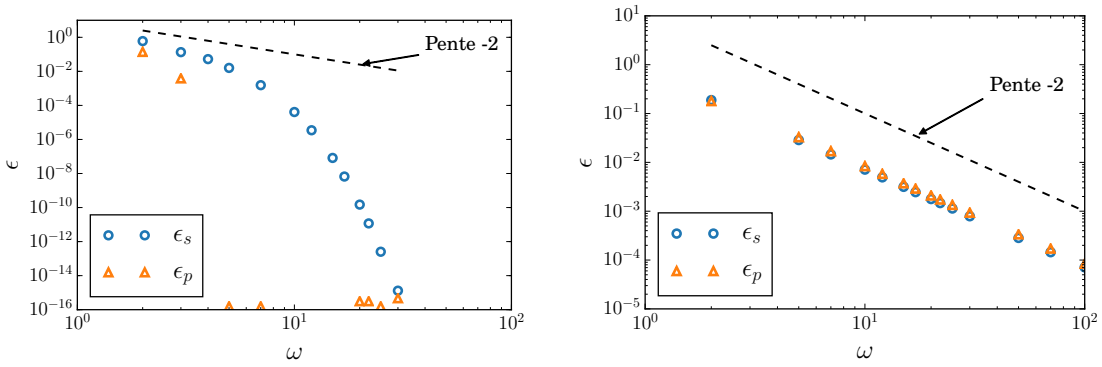
Une fois encore, dans le cas sans glissement, les transmissivités intrinsèques du champ des ouvertures exponentiel sont obtenues pour le cas parallèle :

$$K_{0p} = \lim_{\alpha \to 0} K_p = \frac{1-\mathrm{e}^{-3\Upsilon}}{3\Upsilon} \frac{H^3}{12} \tag{3.124}$$

et pour le cas sériel :

$$K_{0s} = \lim_{\alpha \to 0} K_s = \frac{3\Upsilon}{\mathrm{e}^{3\Upsilon}-1} \frac{H^3}{12} \tag{3.125}$$

Il faut noter que dans le cas parallèle, la transmissivité reste linéaire en α (voir équations (3.113) et (3.122)) alors que la transmissivité sérielle montre une dépendance non-linéaire vis-à-vis de ce paramètre de glissement (voir équations (3.117) et (3.123)). Cela résulte du fait que la dépendance linéaire au paramètre de glissement à l'échelle locale (voir équation (3.31b)) est préservée par la moyenne arithmétique mais pas par la moyenne harmonique, qui introduit de la non-linéarité. D'autre part, cela suggère que dans le cas général des géométries variant selon deux directions, le tenseur de transmissivité macroscopique $\boldsymbol{K}$, qui résulte d'un processus de prise de moyenne plus complexe, ne restera probablement



(a) Surface sinusoïdale.

(b) Surface exponentielle.

FIGURE 3.7 – Variation de l'erreur relative donnée par l'équation (3.126) entre les solutions analytique et numérique en fonction de la densité du maillage, ω. La ligne en pointillés indique une loi puissance en ω d'exposant -2.

pas linéaire en $\xi\bar{\lambda}$, comme nous le verrons dans la section suivante. L'objectif est maintenant de comparer les solutions analytiques de transmissivités ci-dessus pour les surfaces sinusoïdale et exponentielle avec les résultats obtenus par résolution du problème de fermeture (3.87) et l'équation (3.92). Pour cela, on fixe les valeurs de $\alpha = 6 \cdot 10^{-2}$, $l_x = 1$ et $h_0 = 10^{-2}$. On se donne également $\Upsilon = 0{,}5$ pour la surface sinusoïdale et $\Upsilon = 2$ pour la surface exponentielle.

Dans un premier temps, une analyse de convergence du schéma numérique est effectuée. Comme le champ des ouvertures varie ici uniquement selon x, le tenseur de transmissivité $\boldsymbol{K}$ est diagonal et les transmissivités sérielles et parallèles correspondent respectivement aux composantes K_{xx} et K_{yy}. On analyse ensuite l'erreur relative entre la solution calculée et la solution analytique en définissant ϵ_p et ϵ_s les écarts parallèles et sériels respectivement.

$$\epsilon_p = \frac{|K_{yy} - K_p|}{K_p} \quad , \quad \epsilon_s = \frac{|K_{xx} - K_s|}{K_s} \tag{3.126}$$

où K_p et K_s sont respectivement donnés par les équations (3.113) et (3.117) pour la surface sinusoïdale, et par les équations (3.122) et (3.123) pour la surface exponentielle.

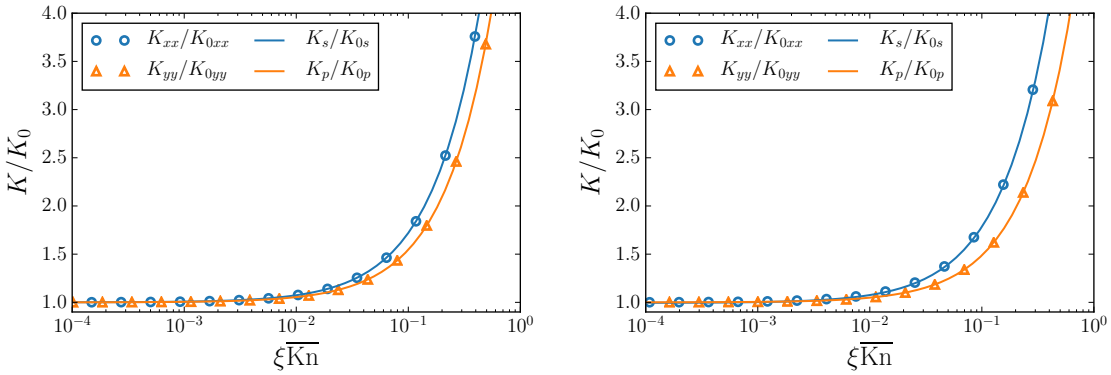
Sur la figure 3.7, la variation de l'écart relatif ϵ_s et ϵ_p est présentée en fonction de la densité du maillage ω, définie comme le nombre de points de discrétisation par unité de longueur de la fracture l_x. Pour la surface exponentielle, on observe clairement que le schéma numérique est du second ordre alors que pour la surface sinusoïdale, la convergence semble bien plus rapide, tant pour le terme parallèle que sériel. Le schéma est alors au moins d'ordre deux en espace.

On présente maintenant l'effet du glissement sur la transmissivité. La figure 3.8 présente le rapport de la composante de la transmissivité apparente avec glissement et de la composante intrinsèque K/K_0 en fonction de $\xi\overline{\mathrm{Kn}} = \xi\bar{\lambda}/h_{\beta j}$ pour les deux surfaces. Il est possible de montrer que ce rapport ne dépend que de $\xi\overline{\mathrm{Kn}}$ et Υ. Le nombre de KNUDSEN a ici été choisi pour être caractéristique d'une direction d'écoulement donnée. Pour cela, l'ouverture caractéristique utilisée, $h_{\beta j}$, est donnée selon la direction par :

$$h_{\beta j} = \sqrt[3]{12 K_{0jj}}, \quad j = x, y \tag{3.127}$$

Cela signifie que $h_{\beta j}$ représente l'ouverture entre deux plaques parallèles qui présenterait une transmissivité intrinsèque K_{0jj} dans la direction j ($j = x, y$).

L'accord des solutions calculées avec les solutions analytiques (3.113), (3.117), (3.122) et (3.123) est excellent pour les deux surfaces sur toute la gamme de $\xi\overline{\mathrm{Kn}}$. On observe dans les deux cas que la transmissivité normalisée parallèle reste toujours inférieure à celle



(a) Surface sinusoïdale.

(b) Surface exponentielle.

FIGURE 3.8 – Rapport de la transmissivité apparente et de la transmissivité intrinsèque K_{ij}/K_{0ij} en fonction de $\xi\overline{\mathrm{Kn}} = \xi\bar{\lambda}/h_{\beta j}$. L'ouverture caractéristique $h_{\beta j}$ est définie par la relation (3.127). Les points représentent les solutions calculées à partir du problème de fermeture (3.87), les traits pleins sont les solutions analytiques données par les équations (3.113), (3.117) et (3.122), (3.123).

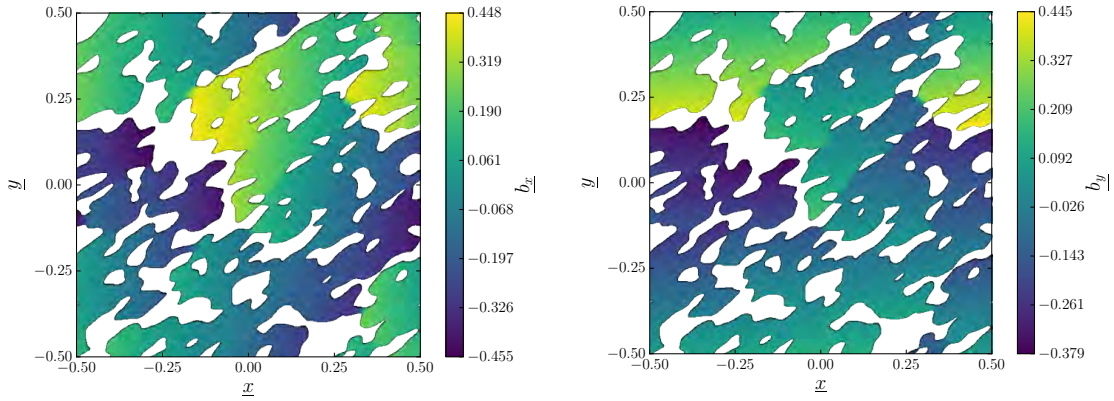
en configuration sérielle. Comme attendu, quand $\xi\overline{\mathrm{Kn}}$ tend vers zéro, les composantes des transmissivités glissantes recouvrent leur valeur intrinsèque du régime non-glissant. Ces résultats montrent la validité du modèle macroscopique d'écoulement avec glissement et du schéma numérique utilisé pour résoudre le problème de fermeture (3.87), permettant la détermination du tenseur de transmissivité macroscopique $\boldsymbol{K}$.

3.2.6.2 Solution sur une fracture rugueuse gaussienne

On présente maintenant un exemple de résolution du problème de fermeture complet (3.87) donnant le tenseur de transmissivité macroscopique $\boldsymbol{K}$ (équation (3.92)) pour une fracture rugueuse. Les résultats pour les sous-problèmes de fermeture (3.100) et (3.101) donnant le tenseur de transmissivité décomposé au premier ordre (équation (3.105)) sont également présentés. Comme champ des ouvertures, on réutilise celui de la section 3.1 donné en figure 3.3, qui doit donc être vu cette fois comme une surface élémentaire représentative d'une fracture plus large.

Dans un premier temps, le problème de fermeture (3.87) est résolu pour le champ des ouvertures de la figure 3.3. Un exemple du champ adimensionnel de la variable de fermeture $\boldsymbol{b}$ est présenté sur la figure 3.9 avec, pour $\underline{b_x}$, $\xi\overline{\mathrm{Kn}} = 0{,}089$ et, pour $\underline{b_y}$, $\xi\overline{\mathrm{Kn}} = 0{,}093$. D'un point de vue physique, les champs des variables de fermeture représentés sur les figures 3.9a et 3.9b sont les champs adimensionnels des déviations de pression (adimensionnés par $L_j\|\nabla\langle p\rangle^\beta \cdot \boldsymbol{e}_j\|$, $j = x, y$) générés par un gradient de pression moyenne unitaire dans la direction j correspondante. Ici encore, $\xi\overline{\mathrm{Kn}} = \xi\bar{\lambda}/h_{\beta j}$, avec $h_{\beta j}$ donné par la relation (3.127). On peut d'ores et déjà noter que, comme la fracture est anisotrope avec une orientation préférentielle dans la direction orientée à 35°, on s'attend à avoir une valeur de K_{0xx} supérieure à K_{0yy} de telle façon que le $\overline{\mathrm{Kn}}$ estimé soit plus grand selon y que selon x. En effet, on obtient $K_{0xx} = 2{,}05 \cdot 10^{-11}$ mm^3 et $K_{0yy} = 1{,}56 \cdot 10^{-11}$ mm^3.

De manière similaire, les deux sous-problèmes de fermeture (3.100) et (3.101) ont été résolus l'un après l'autre, la solution du premier étant requise pour le second. Les champs adimensionnels des variables de fermeture décomposées au premier ordre $\boldsymbol{b_0}$ et $\boldsymbol{b_1}$ sont présentés sur la figure 3.10 pour le champ des ouvertures de la figure 3.3. On note une très forte similarité des champs de $\boldsymbol{b}$ et ceux de $\boldsymbol{b_0}$, ceci en raison des problèmes de fermeture (3.87) (ou (3.94)) et (3.100) qui possèdent une forme semblable. Toutes ces variables de fermeture permettent la détermination du tenseur de transmissivité $\boldsymbol{K}$ et de son approximation $\boldsymbol{K_0} + 6\xi\bar{\lambda}\boldsymbol{K_1}$ à l'ordre $\mathcal{O}\left(\xi\overline{\mathrm{Kn}}\right)$ par moyennage selon les équations



(a) $\underline{b_x} = b_x/L_x$ pour $\xi\overline{\mathrm{Kn}} \approx 0{,}089$.

(b) $\underline{b_y} = b_y/L_y$ pour $\xi\overline{\mathrm{Kn}} \approx 0{,}093$.

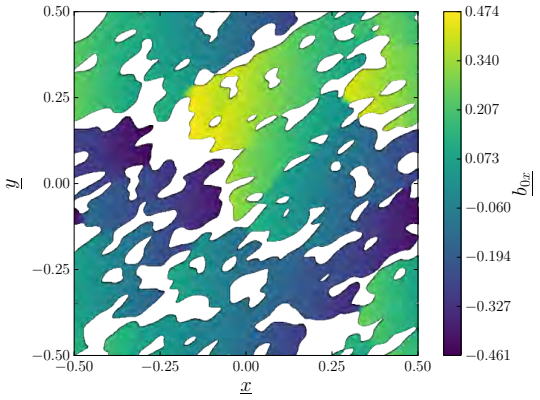
FIGURE 3.9 – Variables de fermeture adimensionnelles calculées pour le champ des ouvertures de la figure 3.3. Les longueurs de la surface sont rendues adimensionnelles comme $\underline{x} = x/L_x$ et $\underline{y} = y/L_y$.

(3.92) ainsi que (3.106) respectivement.

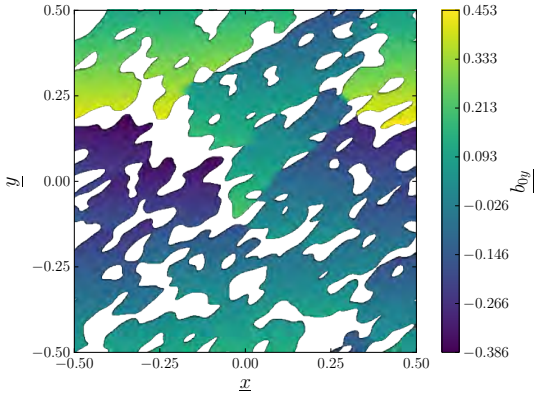
L'évolution du rapport de la transmissivité apparente avec glissement et de la transmissivité intrinsèque K_{ij}/K_{0ij} $(i, j = x, y)$ est représentée par composante en fonction de $\xi\overline{\mathrm{Kn}}$ sur la figure 3.11. On observe clairement un comportement non-linéaire de la transmissivité apparente par rapport à $\xi\overline{\mathrm{Kn}}$, comme indiqué par la déviation des composantes « complètes » par rapport à leur version linéarisée. Pour la surface étudiée ici, la non-linéarité est plus importante pour les composantes extra-diagonales que pour les composantes diagonales du tenseur de transmissivité. L'approximation linéaire de ce dernier peut donc devenir imprécise dans certaines situations, même pour des valeurs de $\xi\overline{\mathrm{Kn}}$ suffisamment petites pour que l'écoulement reste dans le régime glissant. Pour illustrer cette remarque, les écarts relatifs ϵ entre la version complète et linéarisée du tenseur de transmissivité sont présentés en figure 3.12. Cet écart augmente donc avec $\xi\overline{\mathrm{Kn}}$, quelle que soit la composante du tenseur considérée. De plus, pour une valeur donnée du paramètre de glissement, l'écart est approximativement identique pour les composantes diagonales et extra-diagonales. Par exemple, à $\xi\overline{\mathrm{Kn}} \approx 0{,}1$, l'écart est d'environ 2%. Il est toutefois possible de trouver des situations où cet écart serait encore plus important (Zaouter *et al.*, 2018). En conséquence, l'écart ne peut pas nécessairement être considéré comme négligeable, même dans une situation où le régime glissant s'applique. Comme évoqué précédemment, ce comportement résulte de la variation spatiale du champ des ouvertures et du processus de prise de moyenne qui vient rompre, à l'échelle macroscopique, la linéarité du modèle microscopique. Dans le cas particulier d'une fracture lisse, le tenseur de transmissivité est sphérique et dépend linéairement de $\xi\overline{\mathrm{Kn}}$, faisant de ce cas le seul connu où la transmissivité apparente « complète » et son analogue linéarisée correspondent exactement.

3.3 Modélisation de la fuite à l'échelle du joint – une approche à deux échelles

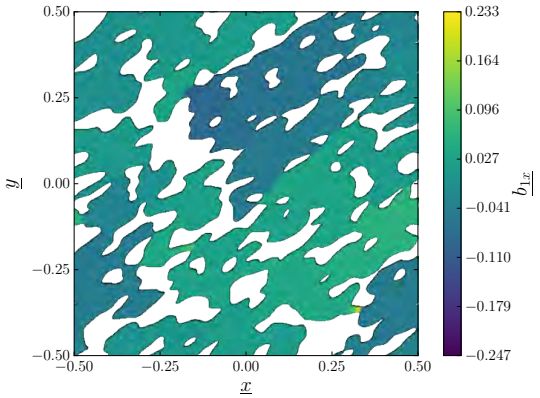
Une fracture réelle de nature multi-échelle présente des aspects géométriques dont les échelles de longueurs caractéristiques peuvent s'étendre sur plusieurs ordres de grandeur et avoir un impact significatif sur le transfert au travers de celle-ci. En conséquence, une simulation directe de l'écoulement dans une telle topographie n'est pas désirable en pratique, demandant des ressources calculatoires importantes. Le changement d'échelle effectué dans la section 3.2 a permis de développer un modèle d'écoulement macroscopique faisant intervenir un tenseur de transmissivité caractéristique d'un élément local de



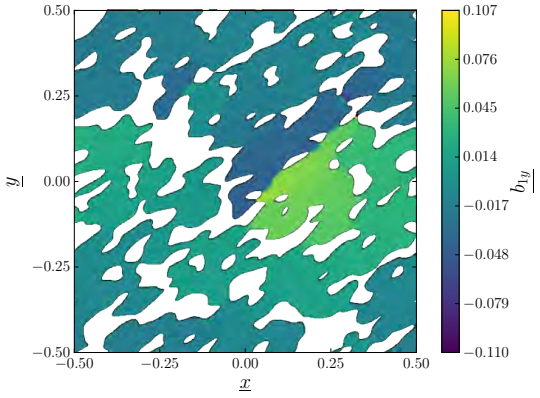
(a) $\underline{b_{0x}} = b_{0x}/L_x$.



(b) $\underline{b_{0y}} = b_{0y}/L_y$.

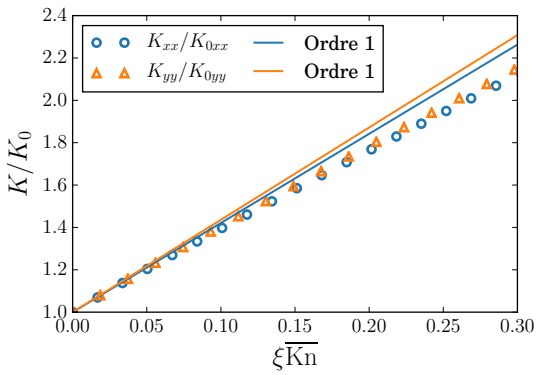


(c) $\underline{b_{1x}} = b_{1x}h_{\beta x}/L_x$.

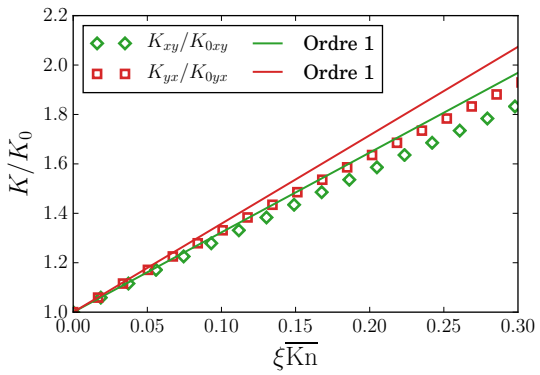


(d) $\underline{b_{1y}} = b_{1y}h_{\beta y}/L_y$.

FIGURE 3.10 – Variables de fermeture adimensionnelles du problème décomposé au premier ordre, calculées pour le champ des ouvertures adimensionné de la figure 3.3.

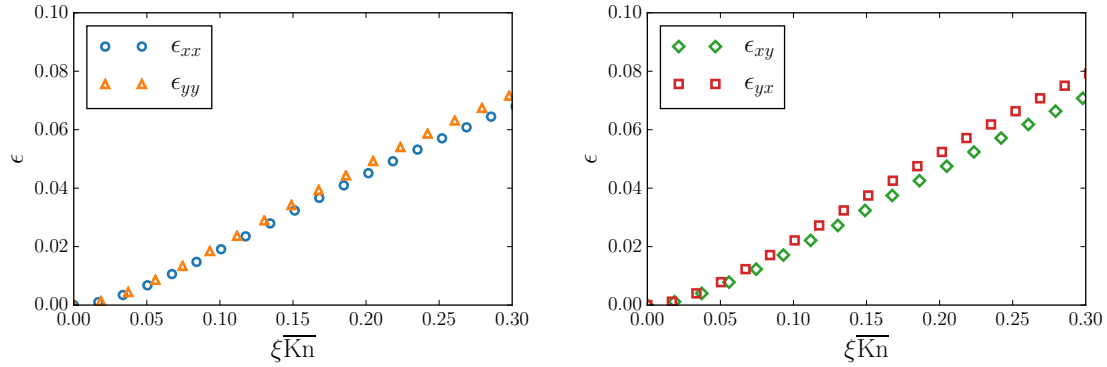


(a) Composantes diagonales.



(b) Composantes extra-diagonales.

FIGURE 3.11 – Évolution du rapport de la transmissivité apparente glissante et de la transmissivité intrinsèque en fonction du paramètre de glissement, calculé pour le problème complet (3.87) (points) et pour les sous-problèmes décomposés au premier ordre (3.100) et (3.101) (lignes).



(a) Composantes diagonales.

(b) Composantes extra-diagonales.

FIGURE 3.12 – Évolution de l'écart relatif entre la solution du problème complet (3.87) et celle estimée par les sous-problèmes décomposés au premier ordre (3.100) et (3.101). La solution du problème complet est prise comme référence.

fracture, d'une taille incorporant quelques aspérités. Il est cependant inconcevable que le tenseur de transmissivité d'un élément de fracture puisse être représentatif de l'ensemble de la portée, cette dernière pouvant présenter des caractéristiques hétérogènes à plus grande échelle telles que de l'ondulation, des motifs d'usinage, etc. Cela mène à un écoulement qui est hétérogène et anisotrope à large échelle. En conséquence, la notion de tenseur de transmissivité développé précédemment apparait comme quelque chose de plus local.

Il est donc nécessaire de développer des stratégies de modélisation tenant compte de ces spécificités. Pour cela, cette section décrit une méthode à deux échelles permettant de modéliser l'écoulement faiblement compressible d'un gaz en régime glissant dans une fracture. Cette méthode opère sur la fracture entière, pouvant être hétérogène et anisotrope à cette échelle, et ou l'information microscopique est englobée dans des tenseurs de transmissivité, qui définissent l'échelle locale du problème.

3.3.1 Développement d'une méthode à deux échelles

On présente dans cette section la méthode à deux échelles permettant la modélisation des écoulements en fracture rugueuse multi-échelle. Avant tout, il convient cependant de bien définir les échelles de longueurs caractéristiques mises en jeu dans ce problème d'écoulement. Pour la situation considérée, on peut distinguer trois échelles de longueurs d'intérêt, représentées schématiquement sur la figure 3.13 :

— Dans un premier temps, on définit l'échelle microscopique (de longueur caractéristique l_β) comme étant la plus petite échelle du problème. Elle peut être vue comme l'échelle du pore (ou des aspérités). C'est l'échelle à laquelle l'information varie rapidement et il est attendu qu'elle soit du même ordre de grandeur que les aspérités (ou rugosité) de la fracture.

— Ensuite vient l'échelle macroscopique, une échelle intermédiaire (de longueur caractéristique L_1) qui peut être vue comme l'échelle de DARCY, là où un milieu poreux est usuellement considéré comme un milieu continu. C'est l'échelle qui englobe quelques aspérités de l'échelle microscopique précédente, et est typiquement de l'ordre de grandeur de l'ondulation de la surface.

— Enfin, on identifie l'échelle mégascopique comme l'échelle de la fracture (de longueur caractéristique L_f). En pratique, il s'agit de l'échelle à laquelle les conditions aux limites sont spécifiées.

Les objectifs de la méthode à deux échelles sont alors de calculer l'écoulement et de déterminer la transmissivité de la fracture à l'échelle mégascopique en utilisant l'information de l'échelle macroscopique, cette dernière étant obtenue à partir de l'information à l'échelle microscopique par résolution de problèmes annexes. Encore une fois, de part la

nature multi-échelle de la fracture, il est fort probable que, comme pour l'information microscopique, l'information macroscopique (par exemple, une propriété de transport locale comme un tenseur de transmissivité) présente elle aussi un caractère hétérogène à l'échelle de la fracture. Cet aspect sera considéré par la présente méthode à deux échelles.

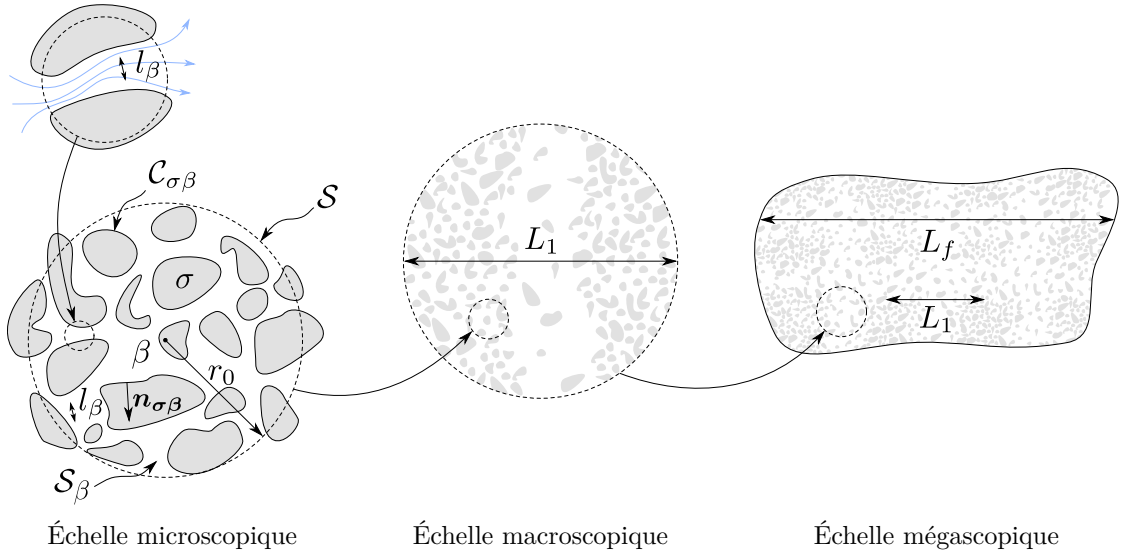


FIGURE 3.13 – Échelles de longueurs caractéristiques pour la modélisation du problème d'écoulement en fracture multi-échelle. β représente la phase fluide tandis ce que σ représente les zones de contact.

3.3.1.1 Équations régissant l'écoulement aux différentes échelles

Les échelles de longueurs du problème étant définies, il est utile de rappeler les équations qui y gouvernent l'écoulement avant de présenter la méthode à deux échelles. Si l'on suppose comme il l'a été fait jusqu'alors que le champ des ouvertures varie lentement dans le plan moyen de la fracture (c'est-à-dire que les pentes des aspérités sont petites), l'équation de REYNOLDS est utilisée pour décrire l'écoulement à l'échelle microscopique. Toutefois, lorsque cette hypothèse n'est pas respectée, la validité de l'équation de REYNOLDS peut être remise en cause (voir par exemple Mourzenko *et al.* (1995)) et il faut alors utiliser l'équation de STOKES, équation tridimensionnelle dont la résolution est plus ardue. D'autre part, il est délicat de supposer la validité d'un tel modèle continu dans une certaine distance proche des zones de contact, où l'ouverture est très petite. À notre connaissance, peu de travaux sont disponibles dans la littérature pour quantifier une telle distance, qui doit, comme soulevé dans Prat *et al.* (2002), être petite et avoir peu d'influence sur le comportement macroscopique du système. En conséquence, nous postulons la validité de l'équation de REYNOLDS à la micro-échelle pour la suite. Cette équation développée en détails dans la section 3.1 est rappelée sous sa forme stationnaire ci-dessous.

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{q} = 0 \qquad \text{dans } \mathcal{A}_\beta \qquad (3.128a)$$

$$\boldsymbol{q} = -\rho\frac{h^3}{12\mu}\left(1+6\xi\mathrm{Kn}\right)\boldsymbol{\nabla}p \qquad \text{dans } \mathcal{A}_\beta \qquad (3.128b)$$

$$\rho = \varphi(p) \qquad \text{dans } \mathcal{A}_\beta \qquad (3.128c)$$

$$\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n}_{\sigma\beta} = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \qquad (3.128d)$$

où $\mathrm{Kn} = \lambda/h$ est le nombre de KNUDSEN et λ le libre parcours moyen local défini par l'équation (2.5).

À l'échelle macroscopique, l'écoulement est décrit par une équation de type « DARCY » faisant intervenir un tenseur de transmissivité. Un tel modèle a été obtenu dans la section

3.2 en utilisant la méthode de la prise de moyenne volumique, et est rappelé ci-après dans sa forme stationnaire.

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \langle \boldsymbol{q} \rangle = 0 \tag{3.129a}$$

$$\langle \boldsymbol{q} \rangle = -\langle \rho \rangle^{\beta} \frac{\boldsymbol{K}}{\mu} \cdot \boldsymbol{\nabla} \langle p \rangle^{\beta} \tag{3.129b}$$

$$\langle \rho \rangle^{\beta} = \varphi(\langle p \rangle^{\beta}) \tag{3.129c}$$

où $\boldsymbol{K}$ est le tenseur de transmissivité d'un élément local de fracture macroscopique donné par la relation (3.92). Il faut rappeler que pour arriver à ce modèle, plusieurs hypothèses ont été employées. Tout d'abord, à l'échelle d'un élément de surface de taille r_0, l'écoulement est considéré faiblement compressible (masse volumique uniforme), bien que pouvant exhiber des variations substantielles à l'échelle macroscopique L_1 (échelle des défauts de taille directement supérieure à l_β, comme de l'ondulation ou la spirale, mais de taille inférieure ou du même ordre que L_f *a priori*). Un libre parcours moyen représentatif uniforme est défini en conséquence, donné par l'expression (3.50). Enfin, à l'échelle de cet élément de surface, le gradient de pression moyenne est considéré comme uniforme et la microstructure comme pseudo-périodique. Cette dernière hypothèse se traduit par la contrainte $r_0 \ll L_1$, pour que cela soit sans influence notable dans le développement théorique. Cependant, comme la transmissivité varie d'une surface élémentaire à l'autre, on suppose que cette contrainte ne doit pas être satisfaite de façon stricte. Toutes ces hypothèses introduisent bien entendu un certain niveau d'approximation par rapport à ce qu'il se passe réellement dans la fracture au niveau de cet élément de surface. Il faudra vérifier *a posteriori* que ce biais reste modéré et à ce que le comportement mégascopique soit bien reproduit par le modèle à deux échelles.

En présence de glissement et de part l'hétérogénéité structurelle de la fracture, le tenseur de transmissivité $\boldsymbol{K}$ n'est pas intrinsèque et il présentera des variations sur l'ensemble de la fracture. Cette spécificité sera prise en compte pour modéliser l'écoulement à l'échelle mégascopique.

3.3.1.2 Procédure générale de la méthode

La procédure générale de la méthode à deux échelles est présentée sur l'organigramme de la figure 3.14. Sans perte de généralité, on considère une fracture rectangulaire de dimensions L_x et L_y dans les directions x et y respectivement. Les étapes principales de cette procédure sont détaillées ci-dessous :

1. Le champ des ouvertures de la fracture entière, $h(x, y)$, constitue la donnée d'entrée de la méthode à deux échelles. Ce champ des ouvertures peut être obtenu de diverses manières (calcul de contact mécanique entre surfaces rugueuses, mesure directe de l'ouverture, etc.), bien que ceci ne soit d'aucune importance ici, car cette géométrie est considérée comme indéformable (pas d'interaction fluide–structure ni de mouvement relatif entre les deux surfaces). Numériquement, cette donnée se présente sous forme d'une grille régulière structurée de n_x et n_y points dans les directions x et y respectivement. En chacun de ces points discrets, l'ouverture est connue.
2. Ce champ des ouvertures à l'échelle mégascopique est subdivisé en un certain nombre régulier de pavés rectangulaires. Leur nombre total est fixé à $n_p = n_{px} \times n_{py}$, où n_{px} et n_{py} désignent le nombre de pavés dans les directions x et y respectivement. Dans l'exemple de la figure 3.14, on a $n_{px} = 3$ et $n_{py} = 2$. Chaque pavé va ainsi englober une certaine quantité des points définissant la fracture à l'étape 1. Le choix de n_{px} et n_{py} constitue alors un degré de liberté supplémentaire dans la procédure, mais qui doit toutefois être guidé par la géométrie sous-jacente du champ des ouvertures, dans l'optique de satisfaire la contrainte d'échelle $r_0 \ll L_1$, dans laquelle r_0 peut être assimilée à la dimension caractéristique d'un pavé.

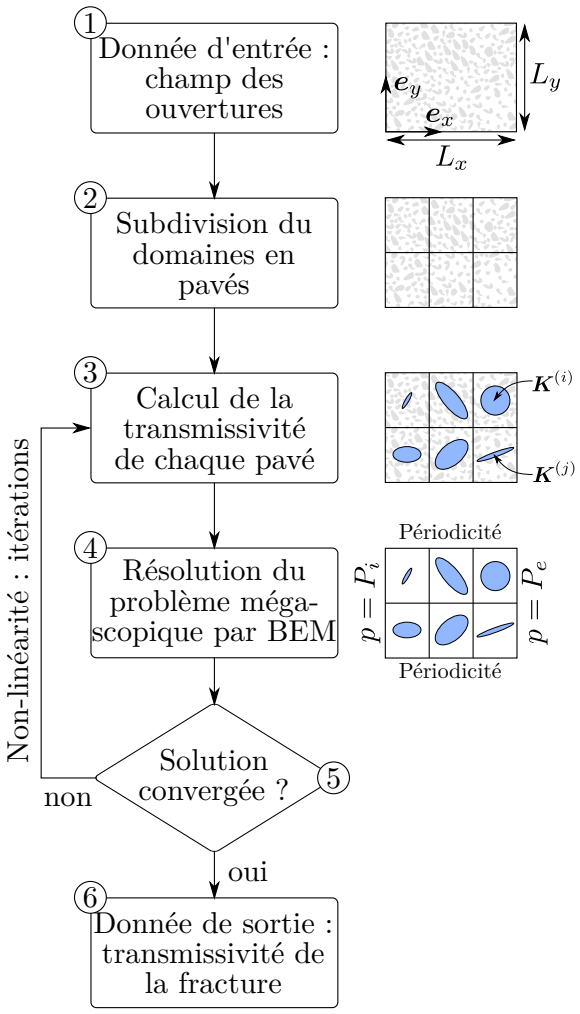


FIGURE 3.14 – Organigramme général de la méthode à deux échelles.

3. Chaque pavé est désormais vu comme un « domaine macroscopique local » avec sa propre masse volumique considérée uniforme sur un pavé, mais pouvant varier de l'un à l'autre. Sur chaque pavé, un tenseur de transmissivité est alors calculé en résolvant le problème de fermeture (3.87) puis en utilisant l'équation (3.92) (sur la figure 3.14, ces tenseurs sont représentés schématiquement par des ellipses, donnant leurs valeurs et orientation principales). Il est également possible d'utiliser la forme décomposée du tenseur de transmissivité (3.105), en résolvant successivement les problèmes (3.100) à (3.102) et en utilisant les relations (3.106). Chaque tenseur est alors fonction de la microstructure locale et du libre parcours moyen représentatif local $\bar{\lambda}$, donné par l'équation (3.50). À l'échelle mégascopique, le champ de tenseurs est alors hétérogène, potentiellement anisotrope et uniforme par morceaux. D'un point de vue numérique, le calcul des tenseurs est une opération parfaitement parallèle, la valeur de l'un étant indépendante de celle des autres. Ce découplage permet d'accélérer les calculs.

4. L'écoulement dans le champ de tenseurs hétérogène, anisotrope et uniforme par morceaux calculé à l'étape précédente est résolu à l'échelle mégascopique en utilisant une méthode d'éléments finis de frontière qui sera présentée en détails par la suite (sections 3.3.2 et 3.3.3). L'information tensorielle à l'échelle macroscopique constitue donc l'échelle locale du problème mégascopique. À noter que la méthode d'éléments finis de frontière employée ici permettra de préserver le caractère hétérogène et complètement anisotrope du champ de tenseurs. La résolution du problème à l'échelle de la fracture requiert l'application de conditions aux limites. Comme présenté sur la figure 3.14, une différence de pression est créée selon la direction x par imposition

des pressions interne P_i et externe P_e sur les faces extrêmes de la fracture. Dans la direction y, une condition de périodicité est utilisée.

5. Le problème traité ici est non-linéaire. En effet, la masse volumique uniforme sur chaque pavé varie de l'un à l'autre (ainsi que le libre parcours moyen représentatif), et la valeur des tenseurs de transmissivité en dépend. Pour estimer la valeur de $\bar{\lambda}$ sur un pavé, il est nécessaire de connaitre la pression moyenne sur le pavé, disons $\widehat{p}$, définie comme la moyenne superficielle du champ de pression interne calculé par la méthode des éléments finis de frontière (voir équation (3.137)). Ensuite, la masse volumique moyenne $\widehat{\rho} = \varphi(\widehat{p})$ sur le pavé est calculée à partir de la loi d'état du gaz. Le libre parcours moyen représentatif est déterminé en conséquence en utilisant l'équation (3.50). Numériquement, un processus itératif de Picard est utilisé pour traiter la non-linéarité (Huyakorn et Pinder, 1983). En partant d'une estimation initiale, les tenseurs de transmissivité et le champ de pression moyenne sont mis à jour d'itération en itération en bouclant dans les étapes 3 et 4. Ce processus est répété jusqu'à ce que convergence soit obtenue sur le champ de pression moyenne calculé. À noter que dans le cas d'un écoulement sans glissement, les tenseurs de transmissivité sont intrinsèques et ont besoin d'être calculés qu'une seule fois.
6. Une fois la convergence atteinte, le débit massique total au travers de la fracture est aisément obtenu avec la méthode des éléments finis de frontière. La transmissivité apparente du contact, K, dans la direction x est déduite de la loi de Darcy (3.32), décrivant l'écoulement d'un gaz parfait entre deux plaques planes et parallèles (Zimmerman et Bodvarsson, 1996; Beskok et Karniadakis, 1999).

$$Q = \bar{\rho}\frac{K}{\mu}\frac{L_y}{L_x}\Delta p \tag{3.32}$$

avec Q le débit massique total, $\Delta p = P_i - P_e$ la différence de pression imposée et $\bar{\rho} = \varphi(\bar{p})$ la masse volumique moyenne, liée par la loi des gaz parfaits à la pression moyenne $\bar{p} = (P_i + P_e)/2$ sur la fracture.

En résumé, la présente méthode sépare effectivement le problème en deux échelles qui peuvent être traitées séparément. Tout d'abord, l'information microscopique est incorporée dans des tenseurs de transmissivité locaux, permettant de construire l'information macroscopique sur toute la fracture. Ensuite, en utilisant cette information macroscopique, le problème d'écoulement en résultant est résolu pour en déduire le coefficient de transmissivité apparent de la fracture dans son ensemble.

3.3.2 Introduction sur la méthode des éléments finis de frontière

Avant de présenter la méthode des éléments finis de frontière adaptée à la méthode à deux échelles de la section précédente, il convient de l'introduire appliquée à l'équation de Laplace, qui en constitue une pièce maîtresse. Il s'agit d'une méthode numérique de résolution des problèmes aux limites de la même famille que la méthode des éléments finis dite « classique ». Elle présente un intérêt par rapport à cette dernière lorsqu'il n'est pas particulièrement utile de connaître les inconnues de l'équation à l'intérieur du domaine d'étude. Le problème est alors ramené sur la frontière du domaine, le réduisant ainsi d'une dimension (par exemple, un problème bidimensionnel est ramené à l'étude d'un problème unidimensionnel).

On considère un domaine homogène $\mathcal{S}$ de frontière $\mathcal{C}$ présenté sur la figure 3.15. Dans ce domaine, la pression p satisfait à l'équation de Laplace (3.130a). Des conditions aux limites sont imposées pour définir le problème au limite. Ainsi, sur une portion $\mathcal{C}^{(1)}$ de $\mathcal{C}$, une condition aux limites de Dirichlet s'applique (3.130b), la valeur du potentiel (ici la pression) est connue et prend la valeur f (qui est une fonction scalaire quelconque). Sur une autre portion de la frontière $\mathcal{C}^{(2)}$ (avec $\mathcal{C} = \mathcal{C}^{(1)} \cup \mathcal{C}^{(2)}$), une condition de Neumann est appliquée (3.130c), la valeur de la dérivée normale du potentiel est connue et prend la

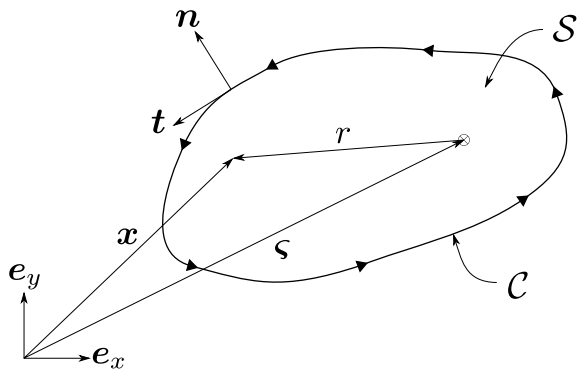


FIGURE 3.15 – Domaine homogène bidimensionnel $\mathcal{S}$ de frontière $\mathcal{C}$ orientée. Des conditions aux limites de DIRICHLET et/ou de NEUMANN s'appliquent sur la frontière.

valeur g (qui est également une fonction scalaire quelconque). La résolution du problème au limite (3.130) consistera alors à déterminer la pression sur la frontière là où sa dérivée normale est connue et *vice versa*.

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = \boldsymbol{\nabla}^2 p = 0 \qquad \text{dans } \mathcal{S} \tag{3.130a}$$

$$p = f \qquad \text{sur } \mathcal{C}^{(1)} \tag{3.130b}$$

$$\frac{\partial p}{\partial \boldsymbol{n}} = g \qquad \text{sur } \mathcal{C}^{(2)} \tag{3.130c}$$

Pour aboutir à la formulation intégrale de frontière du problème (3.130), commençons par pondérer l'équation (3.130a) par une fonction quelconque ϕ suffisamment régulière et demandons à ce que l'intégrale de ce produit sur le domaine soit nulle (méthode des résidus pondérés) :

$$\int_{\mathcal{S}} \phi \boldsymbol{\nabla}^2 p \, \mathrm{d}S = 0 \tag{3.131}$$

D'autre part, on a l'identité vectorielle suivante :

$$\phi \boldsymbol{\nabla}^2 p = \boldsymbol{\nabla} \cdot (\phi \boldsymbol{\nabla} p) - \boldsymbol{\nabla} p \cdot \boldsymbol{\nabla} \phi \tag{3.132}$$

En utilisant l'identité (3.132) dans (3.131), on obtient la forme ci-dessous :

$$\int_{\mathcal{S}} \boldsymbol{\nabla} \cdot (\phi \boldsymbol{\nabla} p) \, \mathrm{d}S = \int_{\mathcal{S}} \boldsymbol{\nabla} p \cdot \boldsymbol{\nabla} \phi \, \mathrm{d}S \tag{3.133}$$

Le processus se poursuit en appliquant le théorème de la divergence sur le membre de gauche de l'équation (3.133) d'une part, puis l'identité (3.132) en intervertissant le rôle de p et ϕ sur le membre de droite d'autre part. Cela donne, après réarrangement des termes :

$$-\int_{\mathcal{S}} p \boldsymbol{\nabla}^2 \phi \, \mathrm{d}S = \oint_{\mathcal{C}} (\phi \boldsymbol{\nabla} p - p \boldsymbol{\nabla} \phi) \cdot \boldsymbol{n} \, \mathrm{d}l \tag{3.134}$$

L'équation (3.134) est la seconde identité de GREEN pour le laplacien. Dans celle-ci, $\boldsymbol{n}$ est un vecteur normal dirigé vers l'extérieur du domaine comme présenté en figure 3.15. La formulation obtenue ne permet pas encore d'être traitée par la méthode des éléments finis de frontière car elle n'est pas purement frontalière, en raison de l'intégrale de surface du membre de gauche. Pour s'en affranchir, on choisit ϕ comme solution élémentaire de l'équation de LAPLACE bidimensionnelle, c'est-à-dire solution de l'équation ci-dessous où $\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\varsigma})$ représente la distribution de DIRAC appliquée à la position $\boldsymbol{\varsigma}$ (voir figure 3.15) :

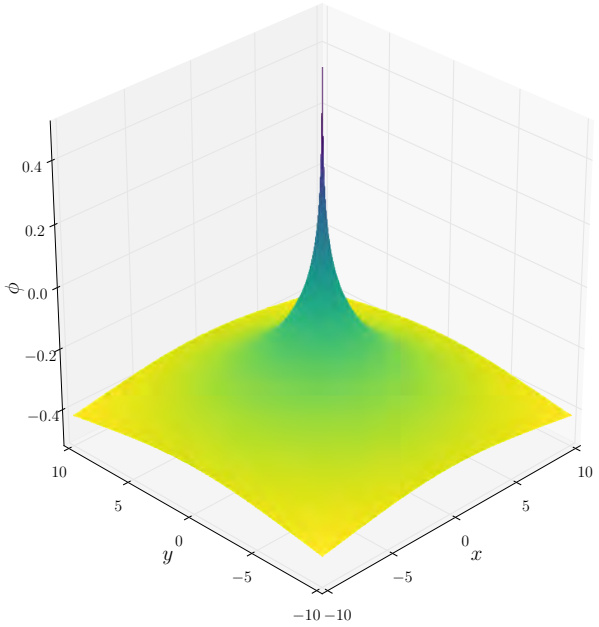


FIGURE 3.16 – Représentation de la solution élémentaire ϕ de l'expression (3.136) avec $\boldsymbol{\varsigma} = 0$, position de la source ponctuelle.

$$\boldsymbol{\nabla}^2 \phi = -\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\varsigma}) \tag{3.135}$$

L'expression de ϕ est alors la suivante (Huyakorn et Pinder, 1983), illustrée sur la figure 3.16 :

$$\phi(r) = -\frac{1}{2\pi} \ln(r) \tag{3.136}$$

avec $r = \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\varsigma}\|$ la distance entre le point d'application de la singularité $\boldsymbol{\varsigma}$ et un point quelconque du domaine $\boldsymbol{x}$. La fonction ϕ s'interprète alors comme la réponse au point $\boldsymbol{x}$ à une sollicitation ponctuelle appliquée en $\boldsymbol{\varsigma}$. De plus, cette fonction est harmonique presque partout sauf lorsque $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\varsigma}$ où elle est singulière.

En insérant l'expression (3.135) dans le terme de gauche de l'équation (3.134) et en utilisant les propriétés de la distribution de DIRAC, on aboutit à la formulation intégrale de frontière du problème de LAPLACE bidimensionnel sur le domaine $\mathcal{S}$:

$$\eta(\boldsymbol{\varsigma}) p(\boldsymbol{\varsigma}) = \oint_{\mathcal{C}} \left(\phi(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\varsigma}) \frac{\partial p(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{n}} - p(\boldsymbol{x}) \frac{\partial \phi(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\varsigma})}{\partial \boldsymbol{n}} \right) \mathrm{d}l \tag{3.137}$$

Dans l'équation (3.137), on a noté $\partial p / \partial \boldsymbol{n} = \boldsymbol{\nabla} p \cdot \boldsymbol{n}$ la dérivée dans la direction normale du champ de pression (et réciproquement pour ϕ). D'autre part, η est un coefficient numérique qui dépend de la position d'application de la singularité (Beer *et al.*, 2008) :

$$\eta = \begin{cases} 1 & \text{si } \boldsymbol{\varsigma} \in \mathcal{S} \\ 0 & \text{si } \boldsymbol{\varsigma} \notin \mathcal{S} \end{cases} \tag{3.138}$$

Il reste alors à résoudre le problème (3.137) pour déterminer le potentiel et sa dérivée normale en chaque point de la frontière du domaine.

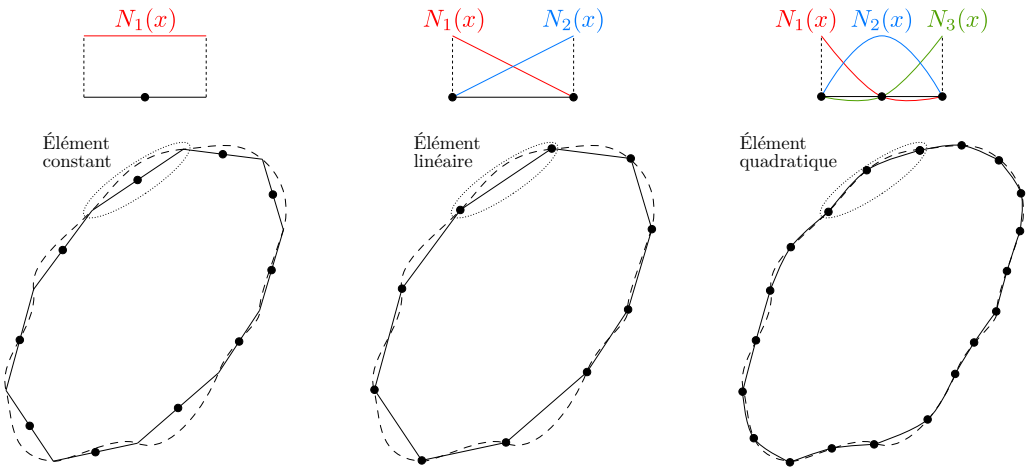


FIGURE 3.17 – Discrétisation de la frontière réelle d'un domaine (traits pointillés) par dix éléments de différents types, de gauche à droite : éléments constants ; éléments linéaires ; éléments quadratiques. Les nœuds des éléments sont les points noirs. Les fonctions de base polynomiales N_j associées aux éléments sont également présentées.

3.3.2.1 Discrétisation du problème par la méthode des éléments finis de frontière

Il est bien souvent impossible de trouver de manière analytique le champ de potentiel et sa dérivée normale sur la frontière, solution de l'équation (3.137), pour un domaine $\mathcal{S}$ quelconque. Il faut alors résoudre le problème de manière approchée en faisant intervenir la méthode des éléments finis de frontière. La frontière est dans un premier temps discrétisée en un total de m_e éléments finis (voir par exemple la figure 3.17). Sur chaque élément, les fonctions inconnues sont représentées de la façon suivante :

$$p = \sum_{j=1}^{m_n} N_j(x) p_j \quad , \quad \frac{\partial p}{\partial \boldsymbol{n}} = \sum_{j=1}^{m_n} N_j(x) \left(\frac{\partial p}{\partial \boldsymbol{n}} \right)_j \tag{3.139}$$

avec m_n le nombre de nœuds de l'élément considéré, $N_j(x)$ sont les fonctions de base de l'élément et p_j (resp. $(\partial p/\partial \boldsymbol{n})_j$) sont les valeurs de p (resp. $\partial p/\partial \boldsymbol{n}$) au nœud j.

Ensuite, on suppose que l'équation intégrale (3.137) peut être représentée comme la somme des contributions de chaque élément du maillage. En utilisant les relations (3.139), on obtient :

$$\eta p = \sum_{k=1}^{m_e} \sum_{j=1}^{m_n(k)} \int_{\mathcal{C}_k} \left(\phi N_{j,k} \left(\frac{\partial p}{\partial \boldsymbol{n}} \right)_{j,k} - \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{n}} N_{j,k} p_{j,k} \right) \mathrm{d}l_k \tag{3.140}$$

Dans l'équation (3.140), la notation j,k désigne une grandeur à considérer pour le nœud d'indice j de l'élément k. D'autre part, le nombre de nœuds $m_n(k)$ peut dépendre de l'élément considéré k. On place ensuite le point de collocation $\boldsymbol{\varsigma}$ de la source sur un nœud particulier d'indice i dans l'équation (3.140). En prenant alors $\eta = 1$, on obtient :

$$p_i = \sum_{k=1}^{m_e} \sum_{j=1}^{m_n(k)} \int_{\mathcal{C}_k} \left(\phi_i N_{j,k} \left(\frac{\partial p}{\partial \boldsymbol{n}} \right)_{j,k} - \left(\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{n}} \right)_i N_{j,k} p_{j,k} \right) \mathrm{d}l_k \tag{3.141}$$

Pour un problème bien posé, sur un nœud où la pression est connue, sa dérivée normale est inconnue et inversement. L'équation (3.141) représente donc une équation comportant autant d'inconnues qu'il y a de nœuds dans le maillage. Pour obtenir un système d'équation pour p et $\partial p/\partial n$, on place alors successivement le point de collocation sur tous les nœuds du maillage. Dans la suite de notre problème, nous considérons des éléments finis constants (la solution est constante sur chaque élément qui ne comporte alors qu'un unique nœud

en son centre, ce qui mène à une unique fonction de base $N_1 = 1$). Le système d'équation alors obtenu peut s'écrire sous forme matricielle de la manière suivante (en utilisant la convention de sommation d'Einstein) :

$$p_i = G_{ij} \left(\frac{\partial p}{\partial n} \right)_j - H_{ij} p_j \tag{3.142}$$

ou encore, en utilisant le symbole de Kronecker :

$$(H_{ij} + \delta_{ij})\, p_j = G_{ij} \left(\frac{\partial p}{\partial n} \right)_j \tag{3.143}$$

avec $i \in [1; \cdots; m_e]$ et $j \in [1; \cdots; m_e]$. De plus, les éléments de matrices G_{ij} et H_{ij}, qui relatent l'effet sur l'élément j d'une source placée sur le nœud i, sont donnés par :

$$G_{ij} = \int_{\mathcal{C}_j} \phi_i \, \mathrm{d}l_j \quad , \quad H_{ij} = \int_{\mathcal{C}_j} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{n}} \right)_i \mathrm{d}l_j \tag{3.144}$$

Il est à noter que les matrices $[G]$ et $[H]$ (d'éléments G_{ij} et H_{ij} respectivement) sont généralement denses. Avec le choix des éléments constants, l'évaluation des intégrales (3.144) peut se faire analytiquement (Huyakorn et Pinder, 1983; Beer *et al.*, 2008), ce qui est un avantage en terme de mise en œuvre numérique (voir en annexe E pour leurs expressions). Dans les cas contraires, pour des éléments finis de plus haut degré, il est nécessaire de procéder à une intégration numérique à l'aide d'une méthode de quadrature par exemple. Cette dernière méthode peut poser des difficultés supplémentaires pour le calcul des termes diagonaux qui nécessitent une intégration singulière.

Dans l'équation (3.142), les vecteurs des valeurs nodales p_j et $(\partial p/\partial n)_j$ représentent à eux deux $2m_e$ coordonnées, parmi lesquelles un nombre m_e sont inconnues. Il est alors nécessaire de réarranger le système d'équations (3.142) de façon à avoir toutes les inconnues du problème d'un même côté de l'égalité, pour ensuite pouvoir le résoudre.

3.3.2.2 Détermination des champs internes

Après résolution du problème (3.137) (ou de sa version discrète (3.143)), la valeur du potentiel et de sa dérivée normale est connue en tout point de la frontière $\mathcal{C}$. Il est alors possible dans ce cas de déterminer les valeurs du potentiel à l'intérieur du domaine $\mathcal{S}$ directement à partir de l'équation (3.137) en plaçant $\boldsymbol{\varsigma}$ dans le domaine $\mathcal{S}$. Sous forme discrète utilisant des éléments constants, c'est l'équation (3.142) qui est utilisée. l'indice i fait cette fois-ci référence à un point placé dans le domaine tandis que l'indice j désigne ici encore une valeur nodale.

De même, la dérivée du potentiel au point $\boldsymbol{\varsigma}$ dans une direction quelconque $\boldsymbol{\chi}$ est donnée par Brebbia et Chang (1979); Beer *et al.* (2008) :

$$\frac{\partial p(\boldsymbol{\varsigma})}{\partial \boldsymbol{\chi}} = \oint_{\mathcal{C}} \left(\frac{\partial \phi(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\varsigma})}{\partial \boldsymbol{\chi}} \frac{\partial p(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{n}} - p(\boldsymbol{x}) \frac{\partial^2 \phi(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\varsigma})}{\partial \boldsymbol{\chi} \partial \boldsymbol{n}} \right) \mathrm{d}l \tag{3.145}$$

L'équation (3.145) permet par exemple de remonter au débit linéique dans la direction $\boldsymbol{\chi}$, cette grandeur étant reliée linéairement à $\partial p/\partial \boldsymbol{\chi}$ (par exemple, $\boldsymbol{q}_{\boldsymbol{\chi}} = -k \partial p/\partial \boldsymbol{\chi}$, avec k une coefficient de conductance). De manière analogue au traitement réalisé pour la discrétisation de l'équation (3.137) aboutissant à l'équation (3.142), la discrétisation de (3.145) donne :

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \chi} \right)_i = E_{ij} \left(\frac{\partial p}{\partial n} \right)_j - F_{ij} p_j \tag{3.146}$$

Les éléments de matrices E_{ij} et F_{ij}, qui relatent l'effet de l'élément j au point d'indice i (où est placée une source), sont donnés par :

$$E_{ij} = \int_{\mathcal{C}_j} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\chi}}\right)_i \mathrm{d}l_j \quad , \quad F_{ij} = \int_{\mathcal{C}_j} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial \boldsymbol{\chi} \partial \boldsymbol{n}}\right)_i \mathrm{d}l_j \tag{3.147}$$

De nouvelles intégrales sont donc à calculer et pour des éléments constants, cela peut être fait analytiquement. Ainsi, le détail des calculs est donné en annexe E.

3.3.3 Adaptation de la méthode des éléments finis de frontière pour un domaine aux propriétés hétérogènes et anisotropes

On s'intéresse dans cette section à l'adaptation de la méthode des éléments finis de frontière pour la résolution de l'équation de diffusion anisotrope stationnaire (3.148), apparaissant dans la méthode à deux échelles (étape 4 de la figure 3.14). En combinant l'équation de conservation de la masse et l'expression du flux des relations (3.129), on a :

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot (-\boldsymbol{\Gamma} \cdot \boldsymbol{\nabla} p) = 0 \tag{3.148}$$

avec p la pression et $\boldsymbol{\Gamma}$ représentant le tenseur de conductance, qui s'exprime en fonction de la masse volumique ρ, de la viscosité dynamique μ et du tenseur de transmissivité $\boldsymbol{K}$ comme $\boldsymbol{\Gamma} = \rho \boldsymbol{K}/\mu$. Ainsi, le terme entre parenthèses dans l'équation (3.148) représente le vecteur de flux massique par unité de largeur $\boldsymbol{q}$, conformément au modèle macroscopique d'écoulement (3.91). Par simplicité d'écriture dans cette partie, nous abandonnons les notations formelles de la méthode de la prise de moyenne volumique utilisées dans la section 3.2 pour désigner une quantité macroscopique. L'équation (3.148) peut se réécrire de la façon suivante en développant la divergence :

$$(\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\Gamma}) \cdot \boldsymbol{\nabla} p + \boldsymbol{\Gamma}^{\mathrm{T}} : \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\nabla} p = 0 \tag{3.149}$$

À ce stade, il convient de préciser la nature du problème à traiter. Nous nous intéressons au problème de l'écoulement en fracture soumise à des conditions limites de Dirichlet en pression dans la direction x et à des conditions de périodicité dans la direction y comme présenté dans la partie gauche de la figure 3.18. La fracture est alors subdivisée en pavés, chacun possédant son propre tenseur de transmissivité $\boldsymbol{K}$ qui y est uniforme. On a donc dans le cas général un pavage de tenseurs hétérogènes. De plus, sur chaque pavé, le fluide est considéré comme localement incompressible (la masse volumique y est uniforme), en conséquence, le tenseur $\boldsymbol{\Gamma}$ est également uniforme sur chaque pavé. Enfin, le tenseur de transmissivité étant *a priori* plein et symétrique, il en est de même pour le tenseur de conductance. Sous ces hypothèses, l'équation (3.149) se réduit à la forme suivante (sur chaque pavé) :

$$\boldsymbol{\Gamma} : \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\nabla} p = \Gamma_{xx} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + 2\Gamma_{xy} \frac{\partial^2 p}{\partial x \partial y} + \Gamma_{yy} \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = 0 \tag{3.150}$$

Les tenseurs de transmissivités $\boldsymbol{K}$ de chaque pavé sont exprimés dans une base commune $(\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y)$. De plus, il sont symétriques (Lasseux et Valdes Parada, 2017). Pour que le modèle ait un sens physique, ils doivent également être définis positifs (Durlofsky, 1991) (c'est-à-dire que l'on a les relations $K_{xy} = K_{yx}$, $K_{xx} > 0$, $K_{yy} > 0$ et $\det \boldsymbol{K} > 0$), auquel cas il serait possible d'avoir un écoulement dans le sens du gradient de pression (des faibles vers les hautes pressions).

En résumé, entre deux pavés adjacents i et j de domaines respectifs $\mathcal{S}^{(i)}$ et $\mathcal{S}^{(j)}$ et de frontière commune $\mathcal{A}_{ij}$, on a le problème suivant :

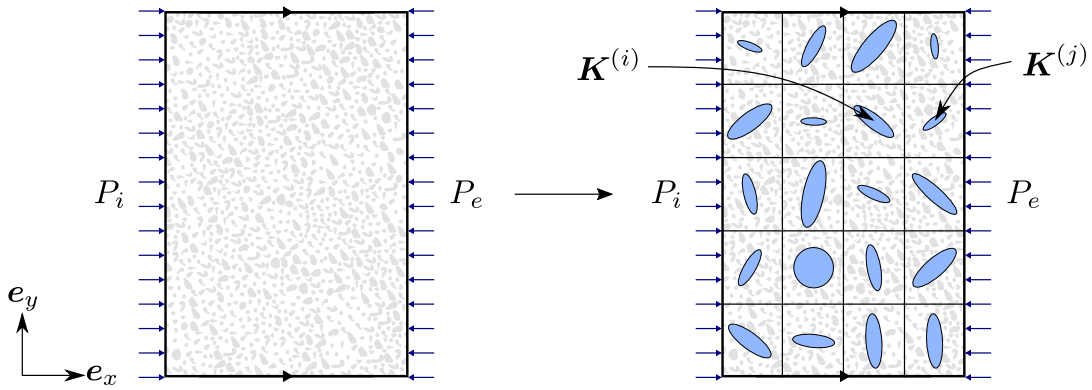


FIGURE 3.18 – Subdivision en pavés (ici 20) pour le problème de l'écoulement en fracture soumise à des conditions limites de DIRICHLET en x et des conditions de périodicité en y.

$$\boldsymbol{\Gamma}^{(i)} : \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\nabla} p_i = 0 \qquad \text{dans } \mathcal{S}^{(i)} \tag{3.151a}$$

$$\boldsymbol{\Gamma}^{(j)} : \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\nabla} p_j = 0 \qquad \text{dans } \mathcal{S}^{(j)} \tag{3.151b}$$

$$p_i = p_j \qquad \text{sur } \mathcal{A}_{ij} \tag{3.151c}$$

$$\boldsymbol{n}^{(i)} \cdot \left(\boldsymbol{\Gamma}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\nabla} p_i\right) = -\boldsymbol{n}^{(j)} \cdot \left(\boldsymbol{\Gamma}^{(j)} \cdot \boldsymbol{\nabla} p_j\right) \qquad \text{sur } \mathcal{A}_{ij} \tag{3.151d}$$

avec $\boldsymbol{n}^{(i)}$ et $\boldsymbol{n}^{(j)}$ désignant les vecteurs normaux à la frontière $\mathcal{A}_{ij}$ et respectivement sortants aux pavés i et j. L'équation (3.151c) caractérise l'équilibre des pressions à l'interface $\mathcal{A}_{ij}$ tandis que l'équation (3.151d) y énonce la continuité des flux normaux $q_n^{(i)}$ et $q_n^{(j)}$.

3.3.3.1 Transformation des domaines

Pour résoudre le problème (3.151) par la méthode des éléments finis de frontière, il est nécessaire de déterminer des solutions élémentaires de l'équation anisotrope (3.150), à la manière des équations (3.135) et (3.136). Cette façon de procéder est bien documentée dans la littérature (voir par exemple Brebbia et Chang (1979); Huyakorn et Pinder (1983)). Une autre manière de procéder existe et permet, par différentes transformations successives, de réécrire l'équation (3.150) comme une équation de LAPLACE sur chaque pavé (Rafiezadeh et Ataie-Ashtiani, 2012, 2013; Bourniquel, 2017). Cela permet de réutiliser le formalisme présenté dans la section 3.3.2, c'est donc cette méthode qui sera présentée dans la suite de cette section.

Dans ce qui suit, le raisonnement est présenté pour un pavé mais s'applique pour chacun d'entre eux utilisant leurs propriétés respectives (géométrie, tenseurs, etc.). Le processus qui va suivre est représenté schématiquement sur la figure 3.19 pour deux pavés voisins (possédant une frontière commune).

On cherche dans un premier temps à exprimer l'équation (3.150) dans un nouveau repère $(\boldsymbol{e}_{x\star}, \boldsymbol{e}_{y\star})$ qui est le repère principal et où le tenseur $\boldsymbol{\Gamma}_\star$ est diagonal, éliminant ainsi le terme faisant intervenir la dérivée partielle croisée. La première transformation recherchée est alors une rotation d'angle θ. Ainsi, un point de coordonnées $\boldsymbol{X} = x\boldsymbol{e}_x + y\boldsymbol{e}_y$ dans la base $\mathcal{B} = (\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y)$ aura pour coordonnées $\boldsymbol{X}_\star = x_\star \boldsymbol{e}_{x\star} + y_\star \boldsymbol{e}_{y\star}$ dans la base principale $\mathcal{B}_\star = (\boldsymbol{e}_{x\star}, \boldsymbol{e}_{y\star})$. La changement de repère peut alors s'écrire :

$$\boldsymbol{X}_\star = \mathfrak{R}^{-1}\boldsymbol{X} \tag{3.152}$$

où $\mathfrak{R}$ est la matrice de passage d'une rotation de la base $\mathcal{B}$ dans la base $\mathcal{B}_\star$ telle qu'on ait :

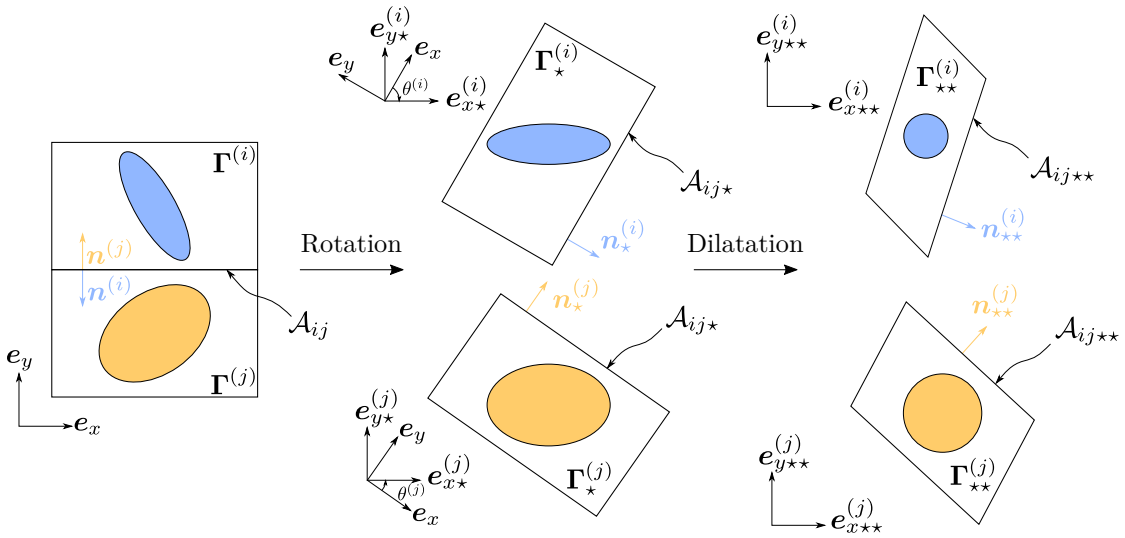


FIGURE 3.19 – Transformations successives de deux domaines voisins i et j.

$$\mathfrak{R} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \quad , \quad \mathfrak{R}^{-1} = \mathfrak{R}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \tag{3.153}$$

La transformation des opérateurs est alors :

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial x_\star}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x_\star} + \frac{\partial y_\star}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y_\star} = \cos(\theta)\frac{\partial}{\partial x_\star} - \sin(\theta)\frac{\partial}{\partial y_\star} \tag{3.154a}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial x_\star}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x_\star} + \frac{\partial y_\star}{\partial y}\frac{\partial}{\partial y_\star} = \sin(\theta)\frac{\partial}{\partial x_\star} + \cos(\theta)\frac{\partial}{\partial y_\star} \tag{3.154b}$$

ce qui donne :

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \cos^2(\theta)\frac{\partial^2}{\partial {x_\star}^2} - 2\cos(\theta)\sin(\theta)\frac{\partial^2}{\partial x_\star \partial y_\star} + \sin^2(\theta)\frac{\partial^2}{\partial {y_\star}^2} \tag{3.155a}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \sin^2(\theta)\frac{\partial^2}{\partial {x_\star}^2} + 2\cos(\theta)\sin(\theta)\frac{\partial^2}{\partial x_\star \partial y_\star} + \cos^2(\theta)\frac{\partial^2}{\partial {y_\star}^2} \tag{3.155b}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x \partial y} = \cos(\theta)\sin(\theta)\frac{\partial^2}{\partial {x_\star}^2} + \left(\cos^2(\theta) - \sin^2(\theta)\right)\frac{\partial^2}{\partial x_\star \partial y_\star} - \cos(\theta)\sin(\theta)\frac{\partial^2}{\partial {y_\star}^2} \tag{3.155c}$$

En utilisant les équations (3.155), l'équation (3.150) se réécrit dans le nouveau repère :

$$\begin{aligned} &\left(\cos^2(\theta)\Gamma_{xx} + 2\cos(\theta)\sin(\theta)\Gamma_{xy} + \sin^2(\theta)\Gamma_{yy}\right)\frac{\partial^2 p}{\partial {x_\star}^2} + \\ &\left(\sin^2(\theta)\Gamma_{xx} - 2\cos(\theta)\sin(\theta)\Gamma_{xy} + \cos^2(\theta)\Gamma_{yy}\right)\frac{\partial^2 p}{\partial {y_\star}^2} + \\ &2\left(\cos(\theta)\sin(\theta)\left(\Gamma_{yy} - \Gamma_{xx}\right) + \left(\cos^2(\theta) - \sin^2(\theta)\right)\Gamma_{xy}\right)\frac{\partial^2 p}{\partial x_\star \partial y_\star} = 0 \end{aligned} \tag{3.156}$$

Si on choisit θ comme étant l'angle principal entre la direction $\boldsymbol{e}_{x\star}$ et $\boldsymbol{e}_x$, alors le coefficient de la dérivée partielle croisée s'annule et l'équation (3.156) devient :

$$\Gamma_1\frac{\partial^2 p}{\partial {x_\star}^2} + \Gamma_2\frac{\partial^2 p}{\partial {y_\star}^2} = 0 \tag{3.157}$$

avec Γ_1 et Γ_2 les conductances principales telles que $\Gamma_1 \geqslant \Gamma_2$ et l'angle principal θ qui s'expriment :

$$\Gamma_1 = \frac{\Gamma_{xx} + \Gamma_{yy}}{2} + \sqrt{\left(\frac{\Gamma_{xx} - \Gamma_{yy}}{2}\right)^2 + \Gamma_{xy}^2} \tag{3.158a}$$

$$\Gamma_2 = \frac{\Gamma_{xx} + \Gamma_{yy}}{2} - \sqrt{\left(\frac{\Gamma_{xx} - \Gamma_{yy}}{2}\right)^2 + \Gamma_{xy}^2} \tag{3.158b}$$

$$\tan(2\theta) = \frac{2\Gamma_{xy}}{\Gamma_{xx} - \Gamma_{yy}} \tag{3.158c}$$

Dans ce nouveau repère, le tenseur $\boldsymbol{\Gamma}_\star$ est diagonal et s'écrit :

$$\boldsymbol{\Gamma}_\star = \begin{bmatrix} \Gamma_1 & 0 \\ 0 & \Gamma_2 \end{bmatrix} \tag{3.159}$$

Concernant les conditions limites sur la frontière $\mathcal{A}_{ij}$ (transformée en $\mathcal{A}_{ij\star}$), la pression reste inchangée par rotation du domaine aux points qui se correspondent dans le repère physique et dans le repère principal. Il en va de même pour les flux normaux car aucune distorsion du domaine n'est engendrée par la rotation (Rafiezadeh et Ataie-Ashtiani, 2012, 2013), c'est-à-dire qu'il est possible de montrer que $q_n = q_{n\star}$, où $q_{n\star}$ désigne le flux normal à la frontière dans le repère principal.

On cherche désormais à exprimer l'équation (3.157) dans un nouveau repère $(\boldsymbol{e}_{x\star\star}, \boldsymbol{e}_{y\star\star})$ où le tenseur $\boldsymbol{\Gamma}_{\star\star}$ est sphérique, réduisant ainsi l'équation (3.157) à une équation de Laplace. La seconde transformation recherchée est alors une dilatation d'un facteur α suivant la coordonnée $x_\star$. Un point de coordonnées $\boldsymbol{X}_\star = x_\star \boldsymbol{e}_{x\star} + y_\star \boldsymbol{e}_{y\star}$ dans la base $\mathcal{B}_\star$ aura pour coordonnées $\boldsymbol{X}_{\star\star} = x_{\star\star}\boldsymbol{e}_{x\star\star} + y_{\star\star}\boldsymbol{e}_{y\star\star}$ dans la base dilatée $\mathcal{B}_{\star\star} = (\boldsymbol{e}_{x\star\star}, \boldsymbol{e}_{y\star\star})$. Le changement de repère peut alors s'écrire :

$$\boldsymbol{X}_{\star\star} = \mathfrak{D}^{-1}\boldsymbol{X}_\star \tag{3.160}$$

où $\mathfrak{D}$ est la matrice de passage d'une dilatation de la base $\mathcal{B}_\star$ dans la base $\mathcal{B}_{\star\star}$ telle qu'on ait :

$$\mathfrak{D} = \begin{bmatrix} 1/\alpha & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad , \quad \mathfrak{D}^{-1} = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{3.161}$$

À ce stade, il faut noter que l'équation (3.160) permet d'exprimer les coordonnées des points et des vecteurs tangentiels dans la nouvelle base dilatée. Pour préserver l'orthogonalité entre les vecteurs tangentiels et les vecteurs normaux dans ce nouveau repère, ces derniers doivent êtres transformés de la façon suivante, à un facteur de normalisation près :

$$\boldsymbol{n}_{\star\star} \propto \mathfrak{D}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{n}_\star \tag{3.162}$$

De manière analogue à la transformation par rotation (3.155), la dilatation mène à l'expression suivante pour la transformation des opérateurs :

$$\frac{\partial^2}{\partial {x_\star}^2} = \alpha^2 \frac{\partial^2}{\partial {x_{\star\star}}^2} \tag{3.163a}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial {y_\star}^2} = \frac{\partial^2}{\partial {y_{\star\star}}^2} \tag{3.163b}$$

En insérant les équations (3.163) dans l'équation (3.157) et en choisissant la valeur du coefficient α telle que :

$$\alpha = \sqrt{\frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}} \tag{3.164}$$

l'équation (3.157) se réécrit comme une équation de LAPLACE dans le repère dilaté.

$$\Gamma_2 \left(\frac{\partial^2 p}{\partial {x_{\star\star}}^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial {y_{\star\star}}^2} \right) = \Gamma_2 \boldsymbol{\nabla}^2_{\star\star} p = 0 \tag{3.165}$$

La combinaison d'une rotation suivie d'une dilatation a permis de transformer l'équation (3.150) anisotrope en une équation de LAPLACE (3.165), de conductance équivalente Γ_2, homogène et isotrope sur le domaine transformé. Le tenseur de conductance est ainsi sphérique et s'écrit alors $\boldsymbol{\Gamma}_{\star\star} = \Gamma_2 \boldsymbol{I}$. Concernant les conditions limites sur la frontière transformée $\mathcal{A}_{ij\star\star}$, la pression reste toujours inchangée par dilatation du domaine. Ça n'est cette fois-ci plus le cas pour les flux normaux car la transformation par dilatation engendre une distorsion et les vecteurs normaux sont modifiés (Rafiezadeh et Ataie-Ashtiani, 2012, 2013). On a donc $q_n = q_{n\star} \neq q_{n\star\star}$. Il est alors nécessaire de trouver une relation entre ces flux normaux dans les repères principal et dilaté, afin de pouvoir exprimer les conditions d'équilibre des flux normaux à la frontière entre deux pavés adjacents. Tout d'abord, on note $\boldsymbol{q}_\star = q_{x\star} \boldsymbol{e}_{x\star} + q_{y\star} \boldsymbol{e}_{y\star}$ et $\boldsymbol{q}_{\star\star} = q_{x\star\star} \boldsymbol{e}_{x\star\star} + q_{y\star\star} \boldsymbol{e}_{y\star\star}$ un vecteur flux exprimé dans la base $\mathcal{B}_\star$ et $\mathcal{B}_{\star\star}$ respectivement. La transformation de dilatation (3.160) permet d'écrire ce vecteur flux dans la base $\mathcal{B}_{\star\star}$ à partir de ses composantes dans la base $\mathcal{B}_\star$ comme :

$$q_{x\star\star} = \alpha q_{x\star} \tag{3.166a}$$
$$q_{y\star\star} = \quad q_{y\star} \tag{3.166b}$$

Par définition des flux normaux et tangentiels, on a les relations ci-dessous, en notant $\boldsymbol{n}_{\star\star}$ et $\boldsymbol{t}_{\star\star}$ les vecteurs normaux et tangentiels respectivement.

$$q_{n\star\star} = \boldsymbol{q}_{\star\star} \cdot \boldsymbol{n}_{\star\star} = q_{x\star\star} n_{x\star\star} + q_{y\star\star} n_{y\star\star} \tag{3.167a}$$
$$q_{t\star\star} = \boldsymbol{q}_{\star\star} \cdot \boldsymbol{t}_{\star\star} = q_{x\star\star} t_{x\star\star} + q_{y\star\star} t_{y\star\star} \tag{3.167b}$$

En remarquant que $\boldsymbol{n}_{\star\star}$ et $\boldsymbol{t}_{\star\star}$ sont orthogonaux entre eux et de norme unitaire, l'inversion de la relation ci-dessus permet d'obtenir :

$$q_{x\star\star} = q_{n\star\star} n_{x\star\star} + q_{t\star\star} t_{x\star\star} \tag{3.168a}$$
$$q_{y\star\star} = q_{n\star\star} n_{y\star\star} + q_{t\star\star} t_{y\star\star} \tag{3.168b}$$

D'autre part, on a également dans le repère principal :

$$q_{n\star} = \boldsymbol{q}_\star \cdot \boldsymbol{n}_\star = q_{x\star} n_{x\star} + q_{y\star} n_{y\star} \tag{3.169}$$

Enfin, il reste à établir une relation entre les vecteurs normaux dans les différents repères en utilisant la relation (3.162), avec C un coefficient de normalisation restant à définir et permettant d'obtenir une norme unitaire pour $\boldsymbol{n}_{\star\star}$.

$$C n_{x\star\star} = \frac{1}{\alpha} n_{x\star} \tag{3.170a}$$
$$C n_{y\star\star} = \quad n_{y\star} \tag{3.170b}$$

Nous pouvons désormais introduire les relations (3.166), (3.168) et (3.170) dans l'équation (3.169), ce qui permet d'obtenir :

$$\begin{aligned} q_{n\star} &= \frac{1}{\alpha} q_{x\star\star} \alpha C n_{x\star\star} + q_{y\star\star} C n_{y\star\star} \\ &= C \left(q_{x\star\star} n_{x\star\star} + q_{y\star\star} n_{y\star\star} \right) \\ &= C \left(n_{x\star\star}^2 + n_{y\star\star}^2 \right) q_{n\star\star} + C \left(n_{x\star\star} t_{x\star\star} + n_{y\star\star} t_{y\star\star} \right) q_{t\star\star} \\ &= C q_{n\star\star} \end{aligned} \tag{3.171}$$

Pour arriver à l'équation (3.171), le fait que $\boldsymbol{n}_{\star\star}$ soit unitaire ($\|\boldsymbol{n}_{\star\star}\| = 1$) et que $\boldsymbol{n}_{\star\star}$ et $\boldsymbol{t}_{\star\star}$ soient orthogonaux ($\boldsymbol{n}_{\star\star} \cdot \boldsymbol{t}_{\star\star} = 0$) a été utilisé. Pour obtenir l'expression de C, on utilise la relation (3.170) et le fait que le vecteur normal dans le repère principal soit unitaire, c'est-à-dire :

$$\|\boldsymbol{n}_{\star}\|^2 = n_{x\star}^2 + n_{y\star}^2 = C^2 \left\{ (\alpha n_{x\star\star})^2 + n_{y\star\star}^2 \right\} = 1 \tag{3.172}$$

soit encore :

$$C = \frac{1}{\sqrt{(\alpha n_{x\star\star})^2 + n_{y\star\star}^2}} \tag{3.173}$$

Les relations (3.171) et (3.173) permettent d'obtenir une relation entre les flux normaux dans le repère principal, $q_{n\star}$, et dans le repère dilaté, $q_{n\star\star}$. Dans ce dernier repère dilaté où la pression satisfait à l'équation de Laplace, le flux normal peut s'écrire en fonction de la dérivée normale de la pression et de la conductance équivalente du milieu comme (Lafe *et al.*, 1981) :

$$q_{n\star\star} = -\Gamma_2 \frac{\partial p}{\partial \boldsymbol{n}_{\star\star}} \tag{3.174}$$

De plus, à la frontière entre deux domaines, le flux normal se conserve. En tenant compte des propriétés de transport équivalentes de chaque domaine, on a alors (Lafe *et al.*, 1981) :

$$\Gamma_2^{(i)} C^{(i)} \frac{\partial p_i}{\partial \boldsymbol{n}_{\star\star}^{(i)}} = -\Gamma_2^{(j)} C^{(j)} \frac{\partial p_j}{\partial \boldsymbol{n}_{\star\star}^{(j)}} \tag{3.175}$$

Pour résumer, le problème hétérogène et anisotrope (3.151) dans le repère de base $(\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y)$ a été transformé, à l'aide d'une transformation de rotation suivie d'une dilatation propres à chaque pavé, en un problème hétérogène sur l'ensemble de la fracture mais isotrope sur chacun des pavés. Les conditions de continuité de la pression et d'équilibre du flux normal aux interfaces inter-pavés dans le domaine transformé sont exprimées en conséquence. Ce problème s'écrit alors :

$$\boldsymbol{\nabla}_{\star\star}^2 p_i = 0 \qquad \text{dans } \mathcal{S}_{\star\star}^{(i)} \tag{3.176a}$$

$$\boldsymbol{\nabla}_{\star\star}^2 p_j = 0 \qquad \text{dans } \mathcal{S}_{\star\star}^{(j)} \tag{3.176b}$$

$$p_i = p_j \qquad \text{sur } \mathcal{A}_{ij\star\star} \tag{3.176c}$$

$$\Gamma_2^{(i)} C^{(i)} \frac{\partial p_i}{\partial \boldsymbol{n}_{\star\star}^{(i)}} = -\Gamma_2^{(j)} C^{(j)} \frac{\partial p_j}{\partial \boldsymbol{n}_{\star\star}^{(j)}} \qquad \text{sur } \mathcal{A}_{ij\star\star} \tag{3.176d}$$

Dans les équations (3.176), $\mathcal{S}_{\star\star}^{(i)}$ et $\mathcal{S}_{\star\star}^{(j)}$ désignent respectivement les domaines transformés $\mathcal{S}^{(i)}$ et $\mathcal{S}^{(j)}$ et $\mathcal{A}_{ij\star\star}$ la transformée de l'interface $\mathcal{A}_{ij}$ entre deux pavés (par simplicité, la notation $\mathcal{A}_{ij\star\star}$ a été conservée pour les deux domaines i et j bien que géométriquement, l'interface $\mathcal{A}_{ij}$ ne se transforme pas de la même manière selon le domaine considéré en raison des propriétés différentes entre ces derniers qui induisent des transformations différentes). La méthode des éléments finis de frontière peut désormais être adaptée pour résoudre ce problème, c'est l'objet de la section suivante.

3.3.3.2 Mise en œuvre de la méthode des éléments finis de frontière

Le problème hétérogène et anisotrope (3.151) à résoudre dans le domaine originel est transformé en le problème hétérogène mais isotrope (3.176) pour chaque pavé. Ainsi, après application des transformations respectives à chaque pavé, il est possible de mettre en œuvre la méthode des éléments finis de frontière pour le laplacien introduite dans la

section 3.3.2 pour chacun des pavés, et d'utiliser les bonnes conditions d'équilibre et de compatibilité aux interfaces entre pavés voisins pour obtenir la solution du problème. En clair, cela revient à déterminer, dans les repères transformés, la pression p et sa dérivée normale $\partial p/\partial \boldsymbol{n}_{\star\star}$ sur la frontière de chaque pavé en assurant les conditions de raccord entre les pavés. Pour cela, après s'être placé dans les domaines transformés respectifs pour chaque pavé, on peut y déterminer les matrices $[G]$ et $[H]$ locales correspondantes. Le système global d'équations aura alors la forme diagonale par blocs suivante (Rafiezadeh et Ataie-Ashtiani, 2012), dans laquelle m_e correspond au nombre total d'éléments du problème, n_p est le nombre de pavés et où il est sous-entendu la notation $[H']$ comme désignant la matrice $[H]+[I]$, conformément à l'équation (3.143).

$$\begin{bmatrix} [H']^{(1)} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & [H']^{(2)} & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & [H']^{(n_p)} \end{bmatrix}_{(m_e,m_e)} \begin{Bmatrix} \{p\}^{(1)} \\ \{p\}^{(2)} \\ \vdots \\ \{p\}^{(n_p)} \end{Bmatrix}_{(m_e)} = \begin{bmatrix} [G]^{(1)} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & [G]^{(2)} & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & [G]^{(n_p)} \end{bmatrix}_{(m_e,m_e)} \begin{Bmatrix} \{\partial p/\partial n_{\star\star}\}^{(1)} \\ \{\partial p/\partial n_{\star\star}\}^{(2)} \\ \vdots \\ \{\partial p/\partial n_{\star\star}\}^{(n_p)} \end{Bmatrix}_{(m_e)} \tag{3.177}$$

Si m_i désigne le nombre de paires d'éléments connectés à l'interface entre deux pavés voisins (c'est-à-dire le nombre de paires d'éléments inter-pavés), alors le système (3.177) comporte m_e équations à m_e+2m_i inconnues. On a donc plus d'inconnues que d'équations. L'application de m_i conditions de compatibilité (3.176c) et de m_i conditions d'équilibre (3.176d) dans le système permet d'éliminer $2m_i$ inconnues (à chaque fois, au niveau d'une paire d'éléments, une inconnue est exprimée en fonction d'une autre). On procède pour cela de la manière suivante, en supposant que deux éléments d'indices globaux i et j soient voisins :

— On supprime la j-ème colonne de la matrice globale $[H']$ et on l'ajoute à la i-ème colonne. On supprime également la j-ème ligne du vecteur global $\{p\}$.

— On supprime la j-ème colonne de la matrice globale $[G]$, on la multiplie par le facteur $-\Gamma_2^{(i)}C^{(i)}/\Gamma_2^{(j)}C^{(j)}$, puis on l'ajoute à la i-ème colonne. On supprime également la j-ème ligne du vecteur global $\{\partial p/\partial n_{\star\star}\}$.

Ce processus mène donc à un nouveau système de m_e équations à m_e inconnues s'écrivant de la façon suivante :

$$[H']_{(m_e,m_e-m_i)}\{p\}_{(m_e-m_i)} = [G]_{(m_e,m_e-m_i)}\{\partial p/\partial n_{\star\star}\}_{(m_e-m_i)} \tag{3.178}$$

Selon les conditions limites prescrites sur la frontière (la pression ou sa dérivée normale), des inconnues peuvent se trouver des deux côtés de l'égalité (3.178). Il faut alors réarranger le système de façon à faire apparaître toutes les inconnues du problème d'un même côté de l'égalité en les rassemblant dans le vecteur noté $\{x\}$. Ceci fait, il reste alors à résoudre le système linéaire obtenu.

$$[A]\{x\} = \{b\} \tag{3.179}$$

Une fois le système résolu, les valeurs de la pression et de sa dérivée normale sont connues sur chaque élément fini dans le domaine transformé de chaque pavé. On peut déterminer, toujours dans les repères transformés, le champ de pression interne à chaque pavé par l'équation (3.137) et le champ du vecteur flux interne par l'équation (3.145). On remonte enfin à leurs expressions dans le repère de base en procédant, dans l'ordre, aux transformations de dilatation inverse puis aux transformations de rotation inverse.

3.3.4 Aspects numériques

Un programme a été développé pour la méthode à deux échelles, permettant de déterminer la fuite stationnaire à l'échelle de l'ensemble de la fracture. Par la suite, il sera désigné indifféremment par code BEM ou méthode à deux échelles. Après avoir subdivisé la fracture en un ensemble régulier de pavés rectangulaires, la frontière de chaque pavé est discrétisée en un certain nombre d'éléments finis de frontière comme présenté sur la figure 3.20. Ce maillage doit être le plus régulier possible pour assurer une précision suffisante de la solution (la longueur des éléments disposés dans les directions x et y doit être similaire).

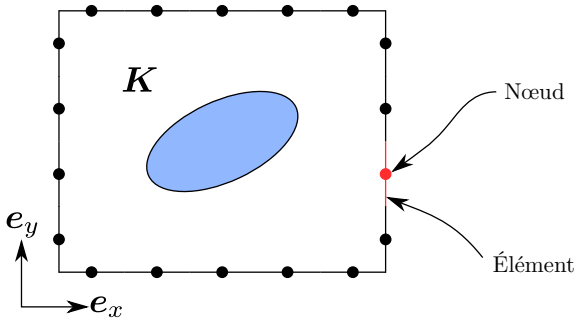


FIGURE 3.20 – Exemple de discrétisation de la frontière d'un pavé avec 5 éléments sur les faces de direction x et 4 éléments sur celles de direction y, ce qui fait un total de 18 éléments finis de frontière.

Ensuite, le système linéaire à résoudre (3.179) est non symétrique, une situation courante dans la méthode des éléments finis de frontière (Beer *et al.*, 2008). De plus, il est relativement creux (selon le nombre de pavés et d'éléments utilisés) et possède une structure typique. Par exemple, si l'on arrange le vecteur des valeurs nodales en une partie « pression » et une partie « dérivée normale » tel que $\{x\} = \{\{p\}, \{\partial p/\partial n_{\star\star}\}\}$, la matrice $[A]$ possède une structure semblable à celle de la figure 3.21. La résolution de ce système passe donc par l'emploi d'un solveur approprié. Pour cela, le choix s'est porté sur MUMPS (Amestoy *et al.*, 2001, 2006). Il s'agit d'un solveur direct massivement parallèle procédant par factorisation LU de la matrice par une méthode multi-frontale. D'autre part, comme dans le cas de la simulation directe 3.1, la non-linéarité du problème est traitée par un processus itératif de PICARD. En partant d'une estimation initiale de la masse volumique sur chaque pavé (ou de la pression moyenne), le champ de tenseur de transmissivité est calculé. La matrice et le second membre sont mis à jour et une solution en est déterminée, permettant une nouvelle estimation de la masse volumique moyenne sur chaque pavé. Ce processus est répété jusqu'à convergence.

Enfin, pour limiter la taille du système à résoudre, à l'échelle de la fracture, seuls les amas de pavés percolants sont conservés, à la manière du code de simulation directe de la section 3.1. En effet, en raison de la présence de contact, il est possible que certains pavés ne transportent aucun fluide, c'est-à-dire qu'ils aient un tenseur de transmissivité nul. Cette situation est traitée à l'aide de l'algorithme de Hoshen et Kopelman (1976).

3.3.5 Exemples de problèmes résolus

3.3.5.1 Validation numérique de la méthode à deux échelles

Cette section présente la validation numérique de la méthode à deux échelles dans une situation où la transmissivité de la fracture peut être calculée analytiquement. Cette validation permet de s'assurer du fondement de la méthode numérique développée. Les situations où il est possible de déterminer analytiquement la transmissivité du contact à partir du champ de transmissivités locales sont assez rares. À l'image des exemples de la section 3.2, placer les tenseurs de transmissivités locaux en configuration sérielle ou

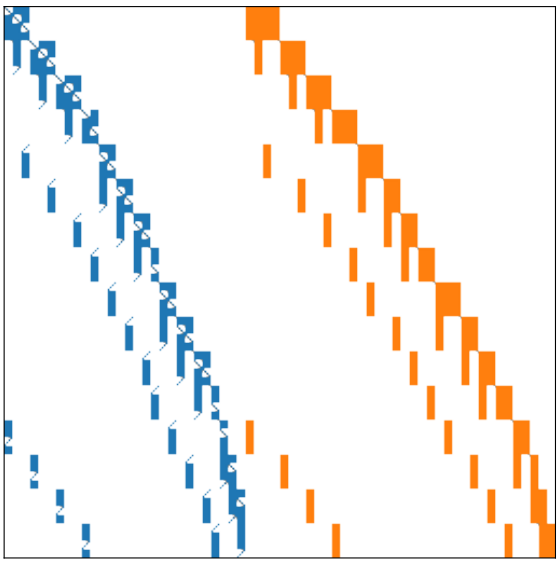
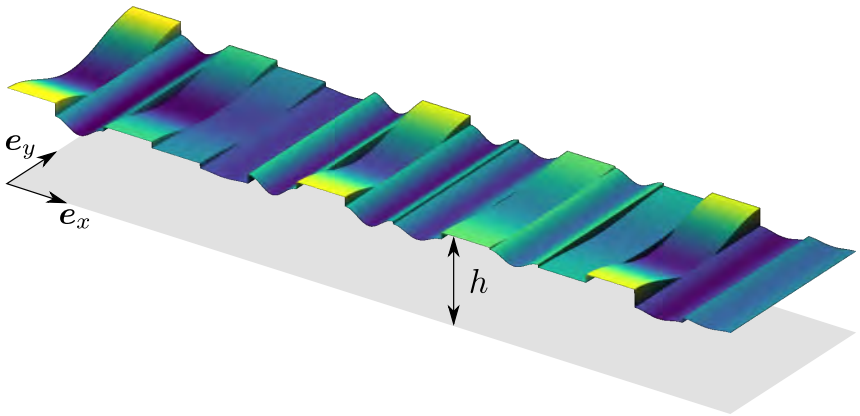
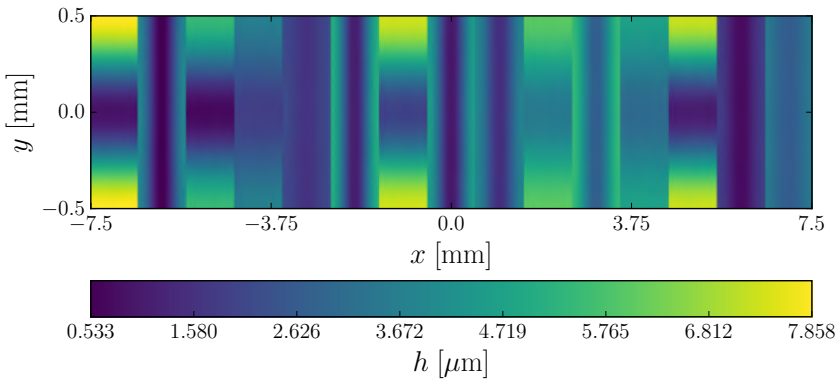


FIGURE 3.21 – Exemple de la structure de la matrice $[A]$ pour un domaine subdivisé en 4×4 pavés, chacun étant discrétisé par 16 éléments finis de frontière. En bleu la partie « pression » et en orange la partie « dérivée normale ». La matrice est ainsi creuse à environ 90%.



(a) Vue 3D.



(b) Vue 2D.

FIGURE 3.22 – Champ des ouvertures $h(x, y)$ de la surface synthétique « cosinus » faite de quinze pavés, ici en série dans la direction x (rapport d'aspect distordu).

Pavé	χ	h_0 [µm]	Υ	K_{xx} [µm^3]	K_{yy} [µm^3]
1	y	4,385	0,792	13,64	0,454
2	x	2,253	0,763	0,083	1,786
3	y	3,098	0,764	4,646	0,215
4	y	2,774	0,318	2,049	1,296
5	x	1,918	0,147	0,551	0,607
6	x	3,138	0,636	0,584	4,138
7	y	4,656	0,574	12,57	2,653
8	x	2,829	0,637	0,426	3,036
9	x	2,723	0,429	0,925	2,147
10	y	4,757	0,258	9,863	7,305
11	x	4,114	0,332	4,108	6,758
12	y	3,864	0,214	5,136	4,182
13	y	4,211	0,727	11,15	0,753
14	x	1,371	0,430	0,118	0,274
15	x	3,073	0,127	2,302	2,476

TABLEAU 3.2 – Valeurs numériques des paramètres utilisés pour générer les quinze pavés de la surface « cosinus » de la figure 3.22 (numéro de pavé croissant de la gauche vers la droite).

parallèle répond à cette requête. L'écoulement est alors unidimensionnel. Pour cela, on considère une surface synthétique faite de quinze pavés alignés comme présenté sur la figure 3.22. Chacun des quinze pavés est un carré de côté $L = 1$ mm et l'ouverture y varie uniquement dans la direction χ (soit x ou y) de façon sinusoïde selon la relation (3.180).

$$h(\chi) = h_0 \left(1 + \Upsilon \cos\left(\frac{2\pi\chi}{L}\right)\right) \tag{3.180}$$

Pour chaque pavé, l'ouverture moyenne h_0, l'amplitude Υ et l'orientation χ sont choisies aléatoirement. Les valeurs utilisées sont données dans le tableau 3.2. Le tenseur de transmissivité est donc diagonal sur chaque pavé et ses composantes sans glissement sont données par les relations ci-dessous (semblables aux équations (3.118) et (3.119) de la section 3.2).

$$K_{\parallel} = \frac{2\left(1-\Upsilon^2\right)^{5/2}}{2+\Upsilon^2}\frac{h_0^3}{12} \quad , \quad K_{\perp} = \frac{3\Upsilon^2+2}{2}\frac{h_0^3}{12} \tag{3.181}$$

avec les symboles $\parallel$ et $\perp$ désignant respectivement la direction parallèle et orthogonale à la direction χ. Pour des valeurs de $0 \leqslant \Upsilon \leqslant 1$, on note que $K_{\perp} \geqslant K_{\parallel}$. Les valeurs numériques de ces composantes sont données dans le tableau 3.2 dans le système de coordonnées global de la figure 3.22 (c'est-à-dire que pour chaque pavé, $K_{xx} = K_{\parallel}$ si $\chi \equiv x$ et $K_{xx} = K_{\perp}$ si $\chi \equiv y$, avec les relations inverses pour K_{yy}). Lorsqu'un gradient de pression est appliqué selon la direction x ou y, la fracture de la figure 3.22 peut alors être assimilée à un jeu de tenseurs placés en configuration sérielle ou parallèle respectivement. De ce fait, les transmissivités de la fracture en configuration sérielle, K_s, et en configuration parallèle, K_p, sont données par la moyenne harmonique et la moyenne arithmétique du champ de transmissivité respectivement (Zimmerman et Bodvarsson, 1996). Pour la configuration étudiée, cela donne :

$$K_s = \left\langle {K_{xx}}^{-1} \right\rangle^{-1} \quad , \quad K_p = \langle K_{yy} \rangle \tag{3.182}$$

En utilisant les valeurs numériques du tableau 3.2, on obtient $K_s = 5{,}103 \cdot 10^{-10}$ mm^3 et $K_p = 2{,}539 \cdot 10^{-9}$ mm^3.

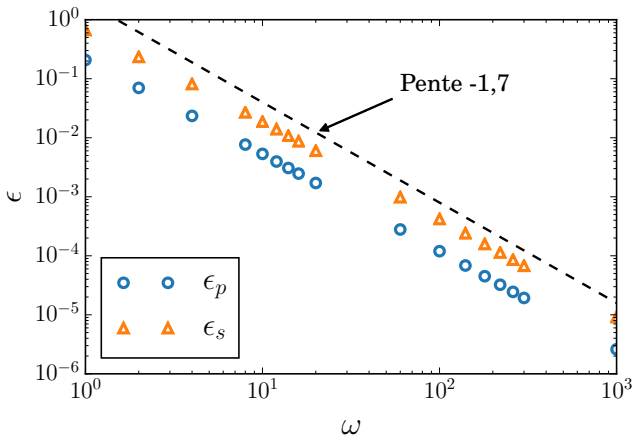


FIGURE 3.23 – Évolution des écarts relatifs des équations (3.183) entre les solutions analytiques et les solutions calculées par la méthode à deux échelles, en fonction de la densité du maillage ω.

On cherche maintenant à comparer les transmissivités obtenues par la méthode à deux échelles en configuration sérielle ou parallèle (notées K_s^{BEM} et K_p^{BEM} respectivement) avec les solutions analytiques correspondantes. Pour cela, on définit les écarts relatifs entre la solution analytique et la solution calculée dans la configuration sérielle, ϵ_s, et parallèle, ϵ_p, comme :

$$\epsilon_s = \frac{\left|K_s^{\text{BEM}} - K_s\right|}{K_s} \quad , \quad \epsilon_p = \frac{\left|K_p^{\text{BEM}} - K_p\right|}{K_p} \tag{3.183}$$

La figure 3.23 reporte les variations de ces écarts relatifs en fonction de la densité du maillage, ω, définie comme le nombre d'éléments finis de frontière par unité de longueur d'un côté de pavé L. Comme attendu, plus le maillage est raffiné et plus les écarts diminuent, l'écart en configuration parallèle étant toujours plus faible que celui en configuration sérielle dans cet exemple. En prenant 8 éléments par côté, on atteint 1% d'écart relatif en configuration parallèle. En configuration sérielle, il faut prendre 16 éléments par côté pour atteindre un écart similaire. Comme dépeint par la ligne en pointillés, le schéma d'éléments finis de frontière avec des éléments constants utilisé dans ce travail présente une convergence super-linéaire, approximativement d'ordre 1,7 en ω, ce qui paraît honorable. Il est sous-entendu que cet ordre est entièrement imputable au schéma BEM, car suffisamment de points ont été choisis pour discrétiser la surface et donner des valeurs exactes de transmissivités, calculées par résolution du problème de fermeture sur chaque pavé (voir la figure 3.7a où la convergence est exponentielle).

Pour compléter cette section, les champs internes (pression et flux) sont représentés pour les deux configurations sur la figure 3.24. Dans les deux cas, on retrouve bien l'écoulement unidimensionnel attendu. La figure 3.25 présente l'évolution du champ de pression de la figure 3.24 le long de l'écoulement (sur la droite $y = 0$ en configuration sérielle 3.25a, et $x = 0$ en configuration parallèle 3.25b). On remarque que la pression varie linéairement par morceaux (par pavé), ce qui est conforme avec le développement du modèle macroscopique de la section 3.2. En effet, l'écoulement est considéré incompressible à l'échelle d'un pavé, résultant bien en un gradient de pression constant par morceaux. Ceci valide la méthode à deux échelles, aussi bien le calcul local des tenseurs que la résolution par le schéma d'éléments finis de frontière.

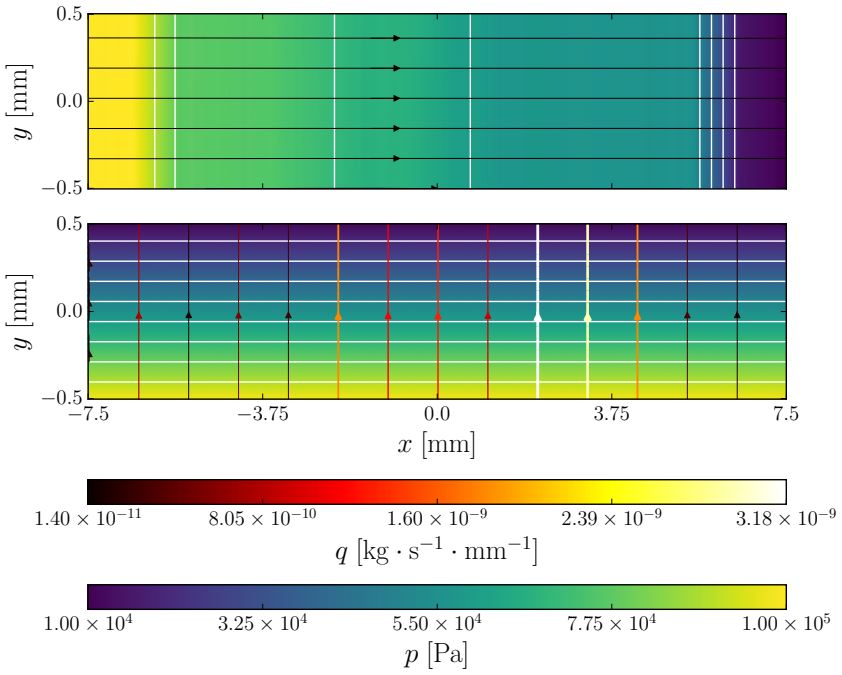
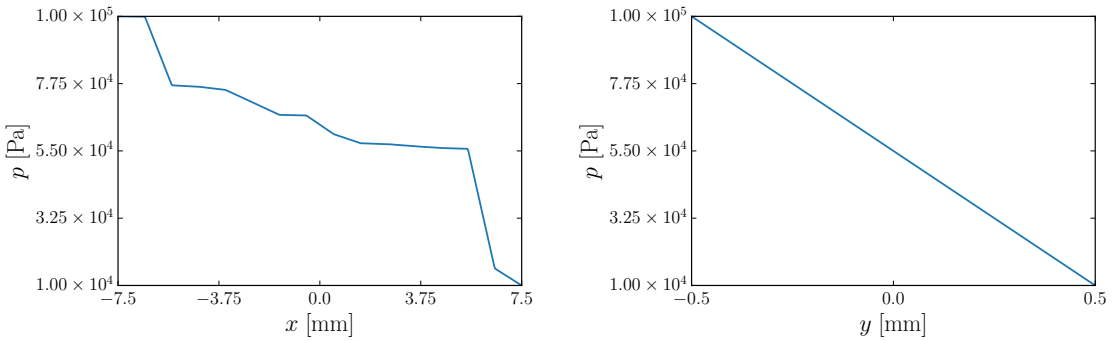


FIGURE 3.24 – Champs internes calculés par la méthode à deux échelles en configuration d'écoulement sérielle (haut) et parallèle (bas). Le champ de pression est présenté avec les couleurs allant du bleu au jaune, les lignes blanches correspondent aux isobares. Les lignes fléchées sont les lignes de courant du vecteur flux massique par unité de largeur, leur couleur indiquant la norme du vecteur.



(a) Ligne $y = 0$ en configuration sérielle.

(b) Ligne $x = 0$ en configuration parallèle.

FIGURE 3.25 – Champ de pression le long de lignes particulières de la figure 3.24.

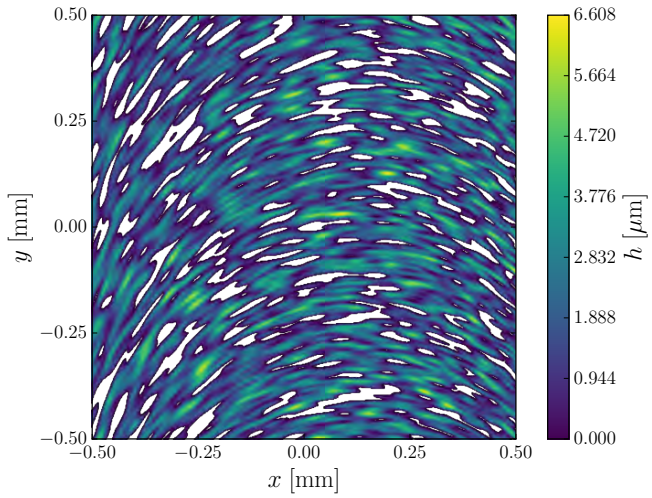


FIGURE 3.26 – Champ des ouvertures gaussien anisotrope, avec un taux de portance $\varepsilon_\sigma = 17\%$. Les zones blanches désignent des zones de contact.

3.3.5.2 Exemple dans une fracture synthétique

On illustre maintenant la méthode à deux échelles dans une fracture synthétique. Afin d'obtenir un comportement fortement anisotrope à l'échelle mégascopique, la surface de la figure 3.26 est utilisée. Il s'agit d'une surface gaussienne corrélée où l'orientation préférentielle des rugosités varie « continûment » selon x (l'effet de rotation des rugosités est clairement observable). Pour générer une telle surface, l'orientation de la fonction de corrélation gaussienne est variée linéairement selon x, passant de 70 ° à l'extrémité gauche à −40 ° à celle de droite (voir la méthode en annexe D). On rappelle que l'on considère le champ des ouvertures comme périodique en y, et que l'on applique des conditions limites en pression, P_i et P_e, aux extrémités selon x. Afin de visualiser l'impact du glissement sur la transmissivité apparente, ces conditions limites en pression sont variées, faisant ainsi varier le nombre de KNUDSEN moyen de la fracture, $\overline{\mathrm{Kn}}$. Nous faisons également varier le nombre de pavés utilisés pour subdiviser la fracture, en prenant successivement 2×2, 4×4, 8×8 et 16×16 pavés. Le nombre d'éléments finis sur le pourtour de chaque pavé est de 64, une valeur suffisante pour atteindre la convergence.

Les résultats obtenus sont présentés en figure 3.27. Tout d'abord, la figure 3.27a présente le champ de pression calculé pour une valeur de $\overline{\mathrm{Kn}} \approx 0{,}1$ (donné par la relation (3.35)) ainsi que les lignes isobares, représentées par les lignes blanches. Ici, $\overline{\mathrm{Kn}}$ est donc le nombre de KNUDSEN représentatif sur l'ensemble de la fracture. Les lignes de courant sont également présentées, leur couleur représentant localement la norme du vecteur débit massique par unité de largeur $\boldsymbol{q}$. On observe bien un écoulement anisotrope « tournant » avec les motifs de rugosité, et des chemins préférentiels où le débit est plus important. On note également que les isobares ne sont pas orthogonales aux lignes de courant, du fait des propriétés tensorielles des lois macroscopiques.

La figure 3.27b représente qualitativement le champ des tenseurs de conductance $\mathbf{\Gamma}$ par les valeurs principales (taille des lignes) et les directions principales (orientation des lignes) dans la configuration à 8×8 pavés. La couleur correspond au niveau de raréfaction sur un pavé $\xi\overline{\mathrm{Kn}} = \xi\bar{\lambda}_i/h_0$, où $\bar{\lambda}_i$ est le libre parcours moyen représentatif sur le pavé i (utilisé lors du calcul des tenseurs) et h_0 est l'ouverture caractéristique de la fracture, donnée par l'équation (3.36). On remarque bien un champ anisotrope, image de la microstructure sous-jacente.

La figure 3.27c donne l'évolution de la transmissivité normalisée de la fracture pour les quatre pavages différents ainsi que par la simulation directe, en fonction du nombre de KNUDSEN représentatif sur la fracture, défini par l'équation (3.35). On note dans chaque

	K_0 [mm^3]		
Pavés	avec K_{xy}	sans K_{xy}	Écart
2×2	$4{,}382 \cdot 10^{-10}$	$4{,}398 \cdot 10^{-10}$	3,7%
4×4	$4{,}516 \cdot 10^{-10}$	$4{,}653 \cdot 10^{-10}$	3,1%
8×8	$4{,}779 \cdot 10^{-10}$	$5{,}135 \cdot 10^{-10}$	7,5%
16×16	$4{,}649 \cdot 10^{-10}$	$5{,}033 \cdot 10^{-10}$	8,3%

TABLEAU 3.3 – Transmissivités intrinsèques K_0 calculées par la méthode à deux échelles en tenant compte ou non des termes non-diagonaux K_{xy} des tenseurs de transmissivité des pavés. L'écart relatif entre les deux transmissivités est donné en prenant la valeur obtenue avec les tenseurs pleins comme référence.

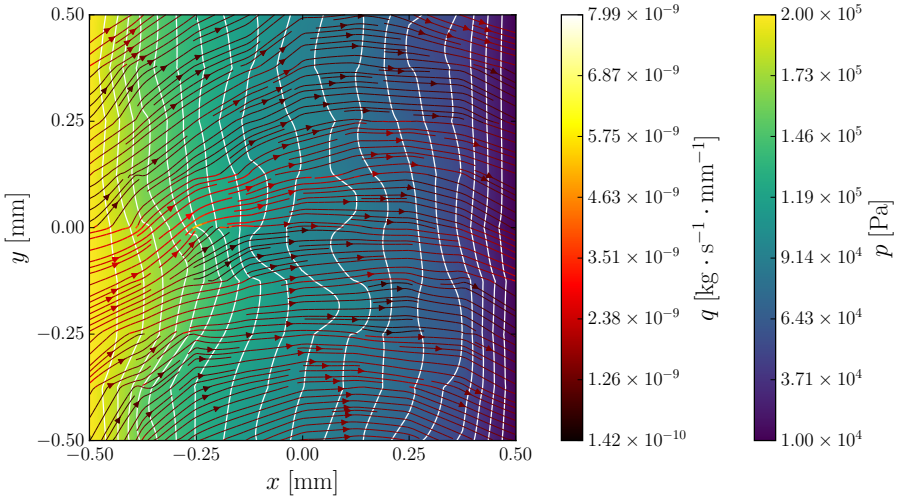
cas une variation presque linéaire à l'échelle mégascopique. De plus, les résultats obtenus pour les quatre pavages sont en raisonnable accord entre eux et avec la DNS. Étonnamment, le pavage 2×2, *a priori* assez grossier, semble être proche des résultats obtenus avec les pavages plus fins. La figure 3.27d présente des résultats similaires sous forme dimensionnelle. La transmissivité apparente avec glissement est tracée en fonction du libre parcours moyen représentatif sur la fracture, $\bar{\lambda} = h_0 \overline{\mathrm{Kn}}$. À petit $\bar{\lambda}$, la transmissivité se rapproche d'une valeur constante, la transmissivité intrinsèque.

Pour clore cet exemple, il est intéressant de regarder comment se comporte la méthode à deux échelles lorsque, sur chaque pavé, on néglige les composantes extra-diagonales des tenseurs de transmissivité dans le calcul (c'est-à-dire $K_{xy} = 0$). Il s'agit d'une situation simplificatrice assez courante dans la littérature lorsque l'on a effectivement $K_{xy} \ll K_{xx}, K_{yy}$. Le tableau 3.3 regroupe les transmissivités intrinsèques mégascopiques de la fracture, calculées pour les quatre pavés sur la surface 3.26, en négligeant ou non les termes extra-diagonaux K_{xy} des tenseurs de transmissivité des pavés. Comme le montre la dernière colonne, l'écart relatif entre ces deux situations est non négligeable, pouvant aller jusqu'à 8% pour la surface étudiée ici, fortement anisotrope. Pour d'autres surfaces, il est possible qu'un écart encore plus important soit possible. Cela démontre l'intérêt de conserver des tenseurs pleins pour la détermination de la transmissivité mégascopique, comme le fait la méthode à deux échelles présentée dans cette section.

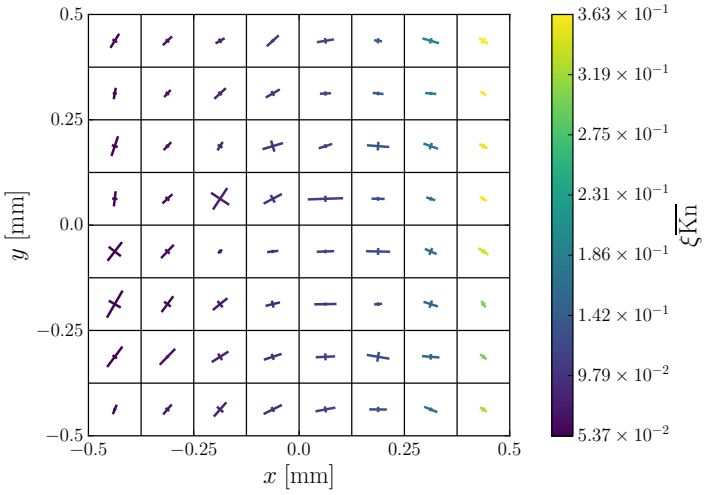
3.4 Résumé des procédures de calcul et exemple applicatif

3.4.1 Organigramme de modélisation

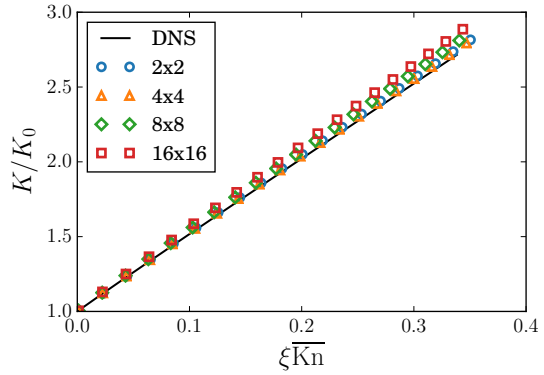
Un résumé de la méthodologie globale de modélisation numérique de l'étanchéité des joints métalliques est présenté en figure 3.28. La procédure commence par l'obtention de la topographie des deux surfaces antagonistes par mesure de leur état de surface, $z_1(x, y)$ et $z_2(x, y)$ (voir figure 3.1). Un calcul de déformation mécanique est ensuite effectué lors de la mise en contact des surfaces, permettant d'en déduire le champ des ouvertures $h(x, y)$ pour un effort de serrage donné. Ce calcul de déformation peut être réalisé avec différentes méthodes numériques telles que la méthode des éléments finis (FEM), ou bien à l'aide d'un modèle réduit simplifié (MR), présenté en annexe G. Il est également envisageable de remplacer ces deux premières étapes par une mesure directe *in situ* du champ des ouvertures, on s'affranchit alors de la modélisation numérique du contact mécanique. Toutefois, cette alternative reste pour le moment partiellement hors d'atteinte, notamment en raison des résolutions spatiales requises. Une fois le champ des ouvertures de la fracture connu, deux possibilités sont offertes pour y calculer l'écoulement et déterminer sa transmissivité mégascopique : une résolution par simulation directe de l'équation de REYNOLDS (DNS, voir section 3.1) ou par l'utilisation de la méthode à deux échelles (BEM, voir section 3.3).



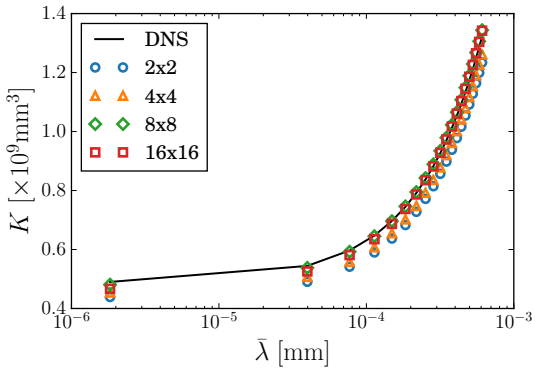
(a) Pression et lignes de courant.



(b) Champ de tenseur et Knudsen sur chaque pavé.



(c)



(d)

Figure 3.27 – 3.27a : champ de pression et lignes de courant calculées à $\overline{\mathrm{Kn}} \approx 0{,}1$ avec le pavage de 8×8. Les lignes blanches sont les isobares et q est la norme du vecteur débit massique linéique $\boldsymbol{q}$. 3.27b : champ qualitatif des tenseurs de conductance sur la portée (représentés par leurs axes principaux et direction principale). La couleur correspond au nombre de Knudsen moyen $\overline{\mathrm{Kn}} = \bar{\lambda}_i / h_0$. 3.27c : évolution de la transmissivité normalisée avec le nombre de Knudsen représentatif sur la fracture selon les pavages. 3.27d : évolution de la transmissivité apparente en fonction du libre parcours moyen représentatif sur la portée.

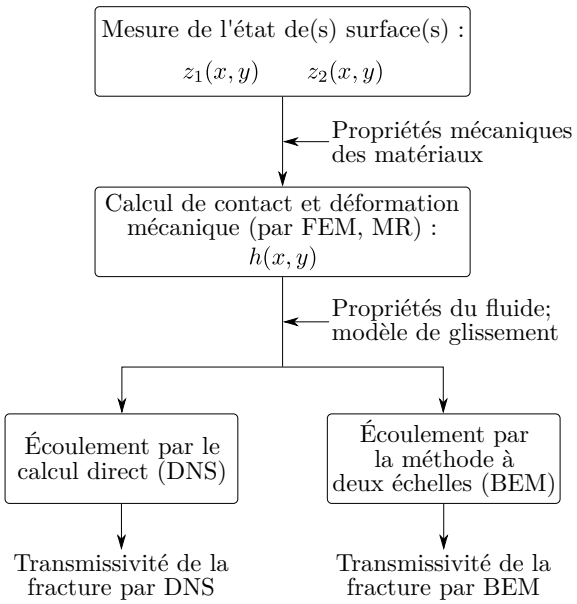


FIGURE 3.28 – Organigramme de la procédure globale de modélisation numérique de la fuite.

3.4.2 Illustrations sur des surfaces modèles

Pour illustrer la procédure complète de modélisation numérique, tant d'un point de vue contact qu'écoulement, on la présente sur des surfaces modèles synthétiques. L'annexe F présente le cas d'une surface fractale auto-affine. Dans ce qui suit, le profil de la surface, z_2, est décrit comme une combinaison de caractéristiques typiques (modes) que possède une surface spiralée :

$$z_2 = z_s + z_{cw} + z_{rw} + z_n \tag{3.184}$$

avec z_s le profil de spirale, z_{cw} l'ondulation circonférentielle (dans la direction des stries), z_{rw} l'ondulation radiale (dans la direction orthogonale aux stries) et z_n les aspérités du profil, qui suivent une loi normale. Une illustration en est donnée sur la figure 3.29.

Les expressions des modes sont données comme des fonctions sinusoïdales par :

$$z_s = \Upsilon_s \sin\left(\frac{2\pi(x-x_0)}{L_x} n_s - \frac{2\pi(y-y_0)}{L_y} + \varphi_s\right) \tag{3.185a}$$

$$z_{cw} = \Upsilon_{cw} \sin\left(\frac{2\pi(y-y_0)}{L_y} n_{cw} + \varphi_{cw}\right) \tag{3.185b}$$

$$z_{rw} = \Upsilon_{rw} \sin\left(\frac{2\pi(x-x_0)}{L_x} n_{rw} + \varphi_{rw}\right) \tag{3.185c}$$

$$z_n \sim \mathcal{N}(0, {\sigma_h}^2) \tag{3.185d}$$

où Υ_i est un paramètre d'amplitude, n_i est le nombre de périodes, φ_i est la phase à l'origine et σ_h est la hauteur moyenne quadratique des aspérités. Les valeurs numériques de ces paramètres sont données dans le tableau 3.4, en plus de $\sigma_h = 1$ µm. La surface est créée sous forme « déroulée » selon la direction des stries. Ses dimensions géométriques sont fixées à $L_x \times L_y = 2$ mm $\times$ 85 mm, $x_0 = 12{,}5$ mm (correspondant au rayon interne de la surface sous forme non-déroulée) et $y_0 = 0$ mm.

La surface possède alors un rapport d'aspect important (environ 42). Afin de pouvoir effectuer un calcul de contact par éléments finis sous `Abaqus`, une discrétisation modérée de la surface rigide est utilisée (500 points selon x et 360 selon y). En effet, en plus de la surface du joint qui va entrer en contact avec la surface rugueuse rigide ci-dessus, le massif du joint

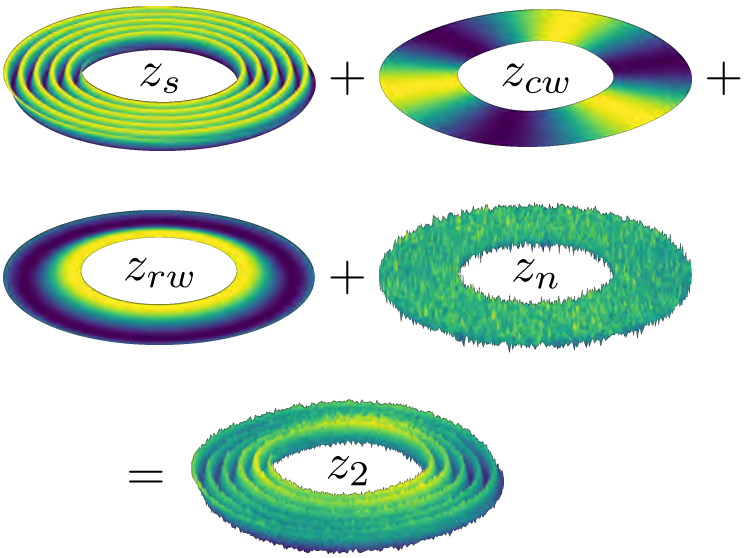


FIGURE 3.29 – Illustration schématique sous forme « non-déroulée » des différents modes composants une surface spiralée.

Valeur de i	s	cw	rw
Υ_i [µm]	2	0,5	1
n_i	10	3	0,8
φ_i [rad]	0	$\pi/2$	$\pi/3$

TABLEAU 3.4 – Valeurs des différents paramètres Υ_i, n_i et φ_i des équations (3.185) pour $i = s, cw, rw$.

doit être discrétisé lors du calcul par éléments finis, pouvant rapidement mener à un nombre important de degrés de liberté à manipuler. Quelques précisions supplémentaires sur le calcul par `Abaqus`, celui-ci est effectué avec la surface non-déroulée (au format polaire), avec un schéma d'intégration explicite. Le joint est modélisé par un matériau de type aluminium au comportement élasto-plastique (les propriétés sont données en annexe G). Sa surface est discrétisée aussi finement ou deux fois plus finement que la surface rugueuse rigide selon le cas étudié (500×360 éléments ou $1\,000 \times 720$ éléments respectivement). En tenant compte de la discrétisation supplémentaire du massif, cela mène respectivement à 11 et 45 millions de degrés de liberté.

3.4.2.1 Cas sans aspérités

On s'intéresse d'abord au cas où la surface rugueuse est dépourvue d'aspérités ($z_n = 0$). La rugosité totale est alors de $R_t = 7$ µm. On effectue dans un premier temps le calcul de déformation par éléments finis sous `Abaqus v.2016` (résolution identique à la surface) et par le modèle réduit (voir annexe G). Ces résultats sont présentés en figure 3.31 pour quelques valeurs de l'enfoncement adimensionnel du profil w/R_t. On observe un bon accord entre le modèle réduit et les éléments finis dans la description de l'ouverture. Le calcul par éléments finis semble ne pas détecter certaines zones de contact contrairement au modèle réduit (voir autour des zones blanches à fort écrasement). Dans ces zones, l'ouverture y est faible et n'aura certainement pas d'impact significatif sur la fuite globale. D'autre part, le seuil de percolation est atteint pour un enfoncement adimensionnel de 1,05 pour le modèle réduit et 0,9 pour les éléments finis. Sur les résultats obtenus par éléments finis, il apparait que ce seuil de percolation est contrôlé par les bords du contact (constrictions critiques aux extrémités selon x), où la matière est fortement cisaillée par un contact de type « poinçon ». Pour évaluer l'impact global des ces constrictions, on exclut en x les

huit premiers et derniers micromètres du champ des ouvertures lors du calcul d'écoulement (suppression de deux bandes verticales aux extrémités). Le champ résultant possède alors un seuil de percolation repoussé à un enfoncement de 1,6 au lieu de 0,9 précédemment ! Lors des calculs suivants, ce nouveau champ sera dénoté « FEM2 ».

Pour poursuivre la comparaison des modèles de contact, on trace sur la figure 3.30 l'évolution de la pression d'assise, grandeur mégascopique, en fonction de l'écrasement adimensionnel pour les deux méthodes de calcul de contact. On constate une bonne corrélation entre les méthodes jusqu'à $w/R_t \approx 0{,}7$. Au-delà, un écart persiste. Cet écart réside probablement dans la façon simplifiée de calculer les pressions de contact locales dans le modèle réduit, en les assimilant à la dureté du matériau, là où aucune restriction n'est imposée lors du calcul par éléments finis.

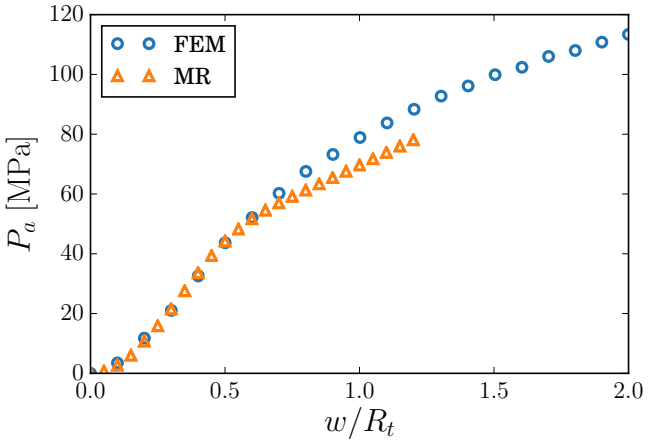
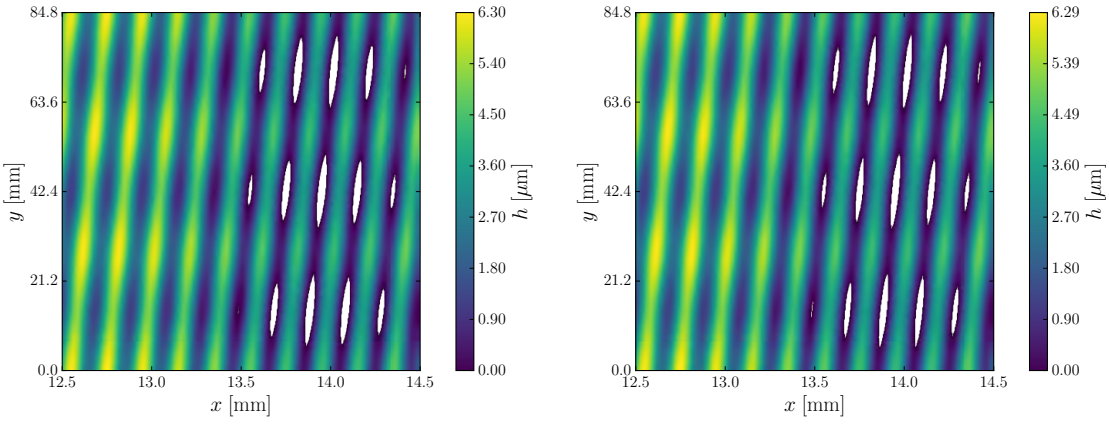


FIGURE 3.30 – Évolution de la pression d'assise en fonction de l'écrasement, obtenue par les éléments finis (FEM) et le modèle réduit (MR) pour la surface sans aspérités.

L'écoulement est ensuite calculé par simulation directe et par la méthode à deux échelles dans ces topographies, et les résultats comparés. Les simulations sont faites en considérant un écoulement d'hélium, un modèle glissant de premier ordre et en appliquant les conditions limites $P_i = 10^5$ Pa et $P_e = 1$ Pa. Pour la méthode à deux échelles, un pavage de 50×72 pavés est utilisé. Cela permet d'avoir 5 pavés par strie dans la direction x afin d'y décrire correctement l'écoulement. En revanche, 72 pavés selon y semble assez peu et mène à des pavés ayant un rapport d'aspect de 30, ce qui peut altérer en partie la qualité de la solution numérique dans la méthode des éléments finis de frontière (Brebbia et Chang, 1979). Cette restriction sur le nombre de pavés est due au faible nombre de points de la surface dans la direction y (360) qui ne permet pas d'en augmenter le nombre, et au fait qu'il faille avoir suffisamment de points toutefois pour calculer les tenseurs de transmissivité.

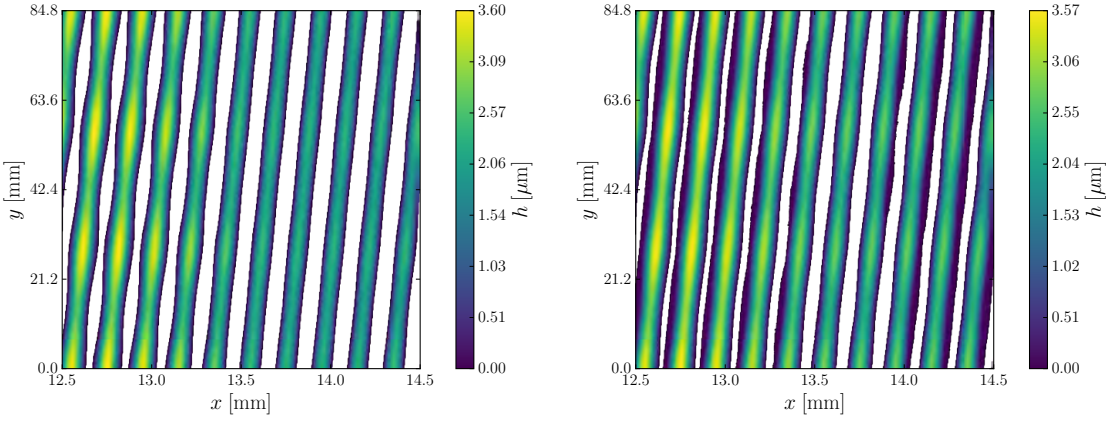
La figure 3.32 présente les champs internes à la fracture (pression du fluide et lignes de courant), calculés par la simulation directe et la méthode à deux échelles, sur la surface obtenue par le modèle réduit à $w/R_t = 0{,}5$ de la figure 3.31. Selon le cas, les zones blanches représentent des zones de contact ou des pavés non-percolants (ceci est relié aux zones de contact sous-jacentes). Le caractère spiralé de l'écoulement est recouvré, montrant la capacité de la méthode à deux échelles à reproduire ce type d'écoulement. Comme précisé précédemment, il faut pour cela un nombre suffisant de pavés sous chaque strie, ce qui peut devenir contraignant si ce nombre est trop important (augmentation de la taille du système à résoudre).

La transmissivité apparente calculée pour les différents modèles de contact et d'écoulement est présentée en figure 3.33, en fonction de l'enfoncement adimensionnel ou de la pression d'assise. On note d'abord une variation de presque sept ordres de grandeur de la transmissivité sur la plage d'enfoncement étudiée. La chute brutale vers $w/R_t \approx 0{,}15$



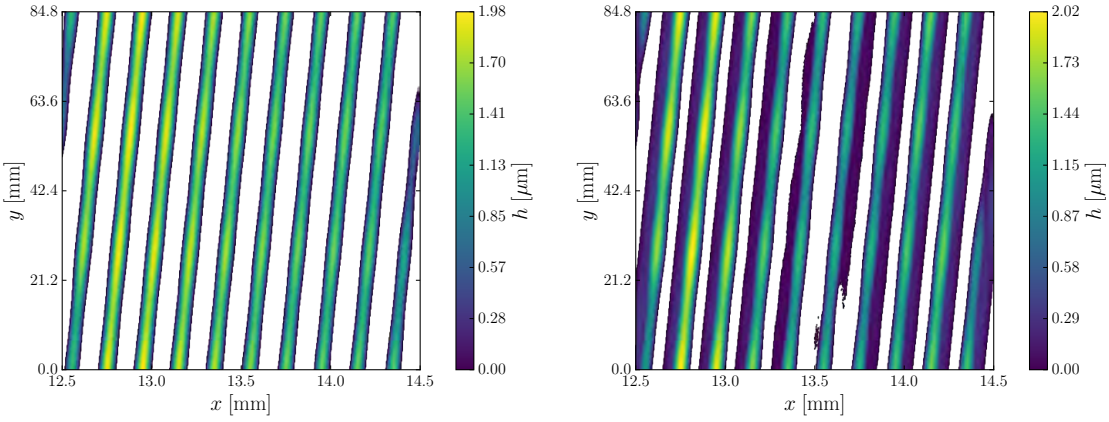
(a) MR – $w/R_t = 0{,}1$

(b) FEM – $w/R_t = 0{,}1$



(c) MR – $w/R_t = 0{,}5$

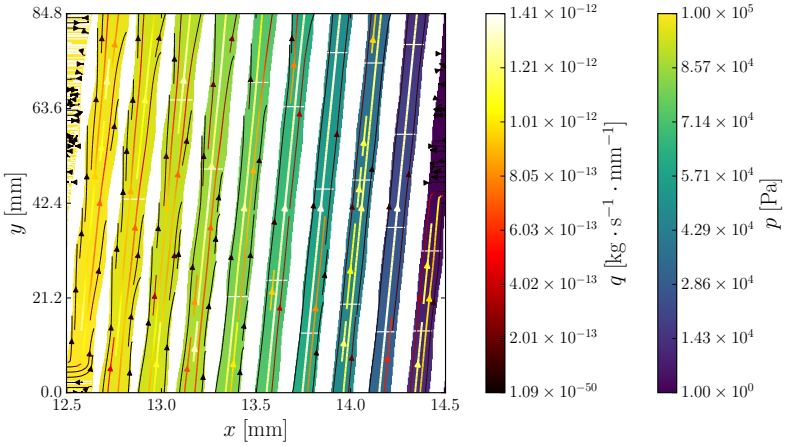
(d) FEM – $w/R_t = 0{,}5$



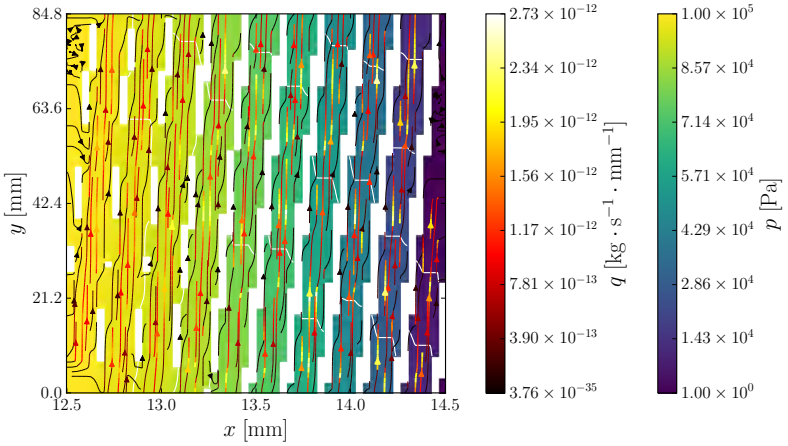
(e) MR – $w/R_t = 1$

(f) FEM – $w/R_t = 1$

FIGURE 3.31 – Évolution du champ des ouvertures en fonction de l'enfoncement adimensionnel selon le modèle numérique de contact utilisé (FEM avec `Abaqus` ou MR) pour le profil sans aspérités. Les zones blanches sont des zones de contact.



(a) DNS pour la surface MR – $w/R_t = 0{,}5$.



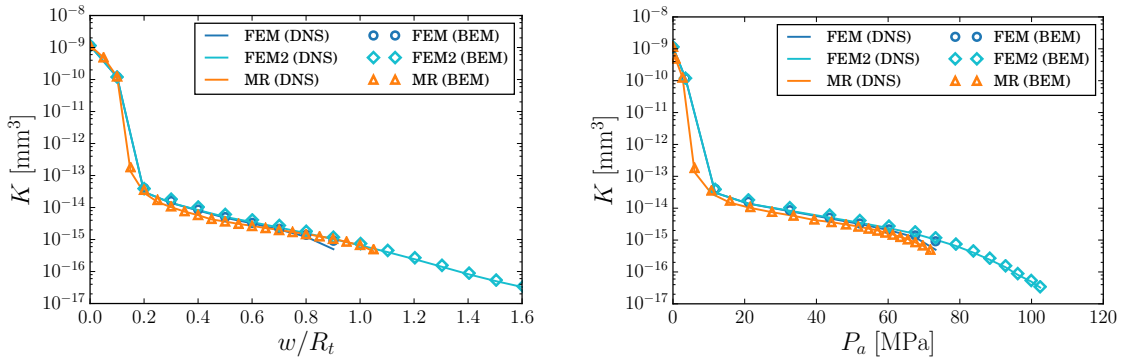
(b) BEM pour la surface MR – $w/R_t = 0{,}5$.

FIGURE 3.32 – Champs internes calculés (pression et lignes de courant) par la simulation directe (DNS) et par la méthode à deux échelles (BEM) sur le champ des ouvertures obtenu par le modèle réduit à $w/R_t = 0{,}5$.

correspond à un changement de régime de l'écoulement, passant du régime de fuite radiale (écoulement majoritairement selon x) au régime spiralé (écoulement majoritairement dans les stries). Ensuite, un bon accord en transmissivité est observé entre le champ des ouvertures calculé par la méthode des éléments finis ou par le modèle réduit, signe que ce dernier se comporte de manière plutôt satisfaisante. Le champ des ouvertures nommé « FEM2 » possède un comportement différent de « FEM » à fort écrasement (supérieur à 0,8), et a plutôt propension à poursuivre sur la tendance (représentation en pression d'assise). La fuite semble donc très dépendante de la présence des bandes de huit micromètres aux extrémités, retirée dans « FEM2 ». Cela soulève plusieurs interrogations :

— À quel point les résultats par éléments finis peuvent-ils être considérés comme une référence ?
— Proche du seuil de percolation, la fuite globale du joint pour ce type d'essais est-elle contrôlée par le comportement aux extrémités ? En particulier, la sollicitation de type « poinçon » est-elle représentative d'une situation d'étanchéité réelle ? La réponse à cette dernière question est vraisemblablement négative, le contact étant plutôt de type « parabolique » sur des systèmes d'étanchéité réels (écrasement de type plan sur cylindre).
— Si oui, comment améliorer le modèle réduit pour mieux prendre en compte cette situation ?

Dans tous les cas, il semble qu'il faille enrichir le modèle réduit pour décrire le comportement à fort écrasement (ou de manière équivalente, à forte pression d'assise), correspondant à de très faibles niveaux de fuite. On note pour finir que la méthode à deux échelles reproduit de manière satisfaisante les résultats de la simulation directe, l'écart moyen étant situé autour de 10%. Les écarts les plus importants sont observés proches des seuils de transition de régime de fuite radiale–spirale (vers $w/R_t \approx 0{,}15$, écart proche 40%), et au seuil de percolation (écart de 90% sur FEM et 20% sur MR). Ceci est dû au fait que proche de ces transitions, l'écoulement est gouverné par des constrictions qu'il est délicat de capter convenablement par le changement d'échelle dans la méthode à deux échelles. Une piste d'amélioration serait de raffiner localement le pavage proche de ces constrictions.



(a) (b)

FIGURE 3.33 – Transmissivité apparente glissante en fonction de l'enfoncement adimensionnel ou de la pression d'assise. La légende indique d'abord le modèle de contact utilisé (FEM ou MR), puis entre parenthèses, la méthode pour le calcul d'écoulement (DNS ou BEM).

3.4.2.2 Cas avec aspérités

On réalise maintenant le même exercice que précédemment en introduisant désormais les aspérités sur la surface rugueuse. La rugosité totale de la surface est alors de $R_t = 14{,}3$ µm. Les champs des ouvertures obtenus par éléments finis (utilisation d'une résolution

identique, nommée « FEM », et double à celle de la surface rugueuse, nommée « FEMHR ») et par le modèle réduit sont présentés en figure 3.35 pour quelques valeurs de l'enfoncement. Un accord raisonnable entre le modèle réduit et les éléments finis (ici avec la discrétisation la plus fine) est trouvé dans la description de l'ouverture, y compris sous les stries. Les zones de contact demeurent cependant légèrement différentes ; le calcul par éléments finis laisse persister un nombre important de passages radiaux par rapport au modèle réduit. L'ouverture y est faible mais présente sur toute la longueur, l'impact sur la fuite globale reste à déterminer, en particulier à fort écrasement. D'autre part, le seuil de percolation est atteint pour un enfoncement de 0,8 pour le modèle réduit et les éléments finis « basse résolution », et 0,75 pour les éléments finis « haute résolution ».

On trace sur la figure 3.34 l'évolution de la pression d'assise en fonction de l'écrasement adimensionnel pour les deux méthodes de calcul de contact. On constate une bonne corrélation entre les méthodes jusqu'à $w/R_t \approx 0{,}4$. Au-delà, un écart permanent persiste entre les éléments finis et le modèle réduit, qui surestime ici la pression. On remarque également que doubler la résolution du maillage du joint a un impact faible dans la prédiction de la pression d'assise par éléments finis (FEM et FEMHR). Cette grandeur mécanique macroscopique semble convergée et bien décrite par la plus faible résolution utilisée.

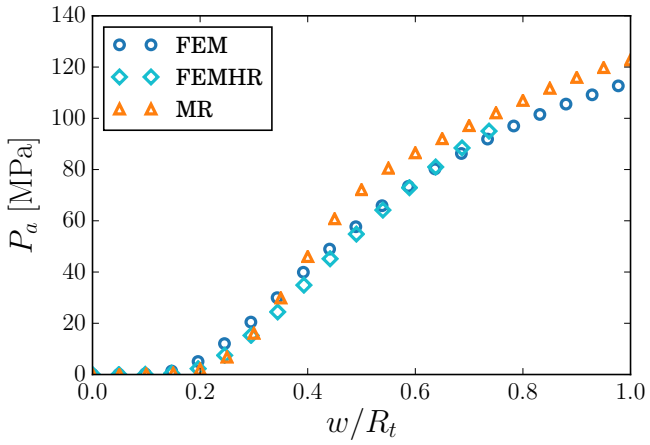
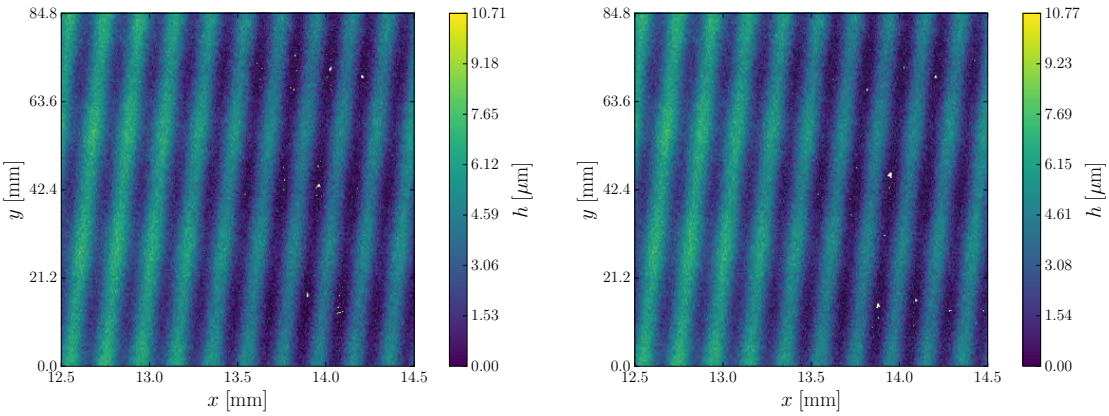


FIGURE 3.34 – Évolution de la pression d'assise en fonction de l'écrasement, obtenue par les éléments finis et le modèle réduit pour la surface avec aspérités.

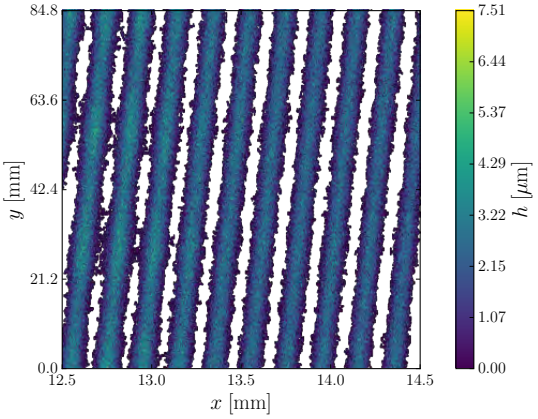
L'écoulement est ensuite calculé par simulation directe et par la méthode à deux échelles dans ces topographies, et les résultats comparés. Les mêmes conditions (fluide, conditions limites, pavage) que dans le cas sans aspérités sont utilisées. La figure 3.36 présente les champs internes à la fracture (pression du fluide et lignes de courant), calculés par la méthode à deux échelles, sur la surface obtenue par le modèle réduit et les éléments finis pour $w/R_t = 0{,}5$. Avec le modèle réduit, le caractère spiralé de l'écoulement est obtenu car aucun passage radial ne subsiste. Avec les éléments finis, l'écoulement est mixte, une majeure partie passe par la spirale et une autre radialement, en particulier proche de la sortie. On a donc ici une différence notable *a priori* selon le modèle de contact utilisé.

La transmissivité apparente calculée pour les différents modèles de contact et d'écoulement est présentée en figure 3.37, en fonction de l'enfoncement adimensionnel ou de la pression d'assise. On note d'abord une variation de sept ordres de grandeur de la transmissivité sur la plage d'enfoncement étudiée. En raison des aspérités, la transition entre régime de fuite radiale et spirale se fait ici plus progressivement que dans le cas sans aspérités. On observe ensuite à fort enfoncement un écart d'un ordre de grandeur en transmissivité entre le modèle réduit et les éléments finis basse résolution (FEM). Cet écart est en partie comblé par l'augmentation de la finesse du maillage du joint (courbe FEMHR). Bien que le calcul de contact par éléments finis ayant convergé en pression d'assise avec le maillage le plus grossier, ça n'est pas le cas en transmissivité. Cela montre la sensibilité importante

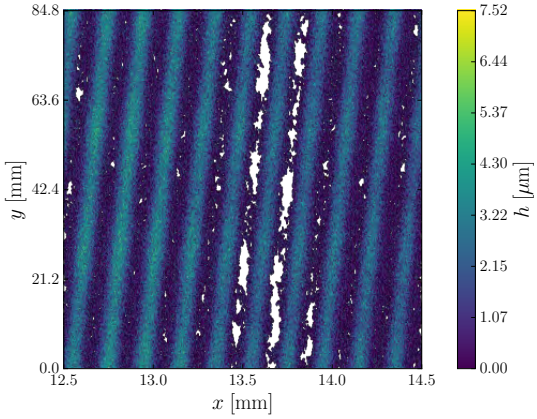


(a) MR – $w/R_t = 0{,}25$

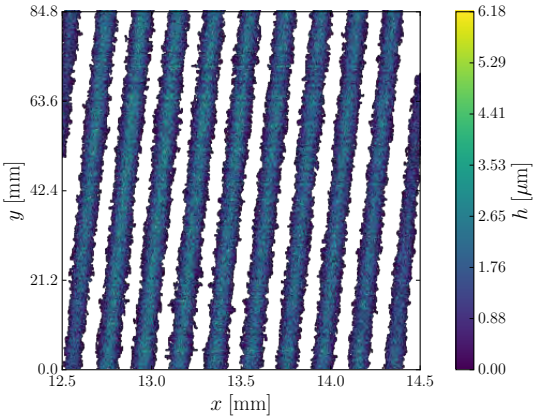
(b) FEMHR – $w/R_t = 0{,}25$



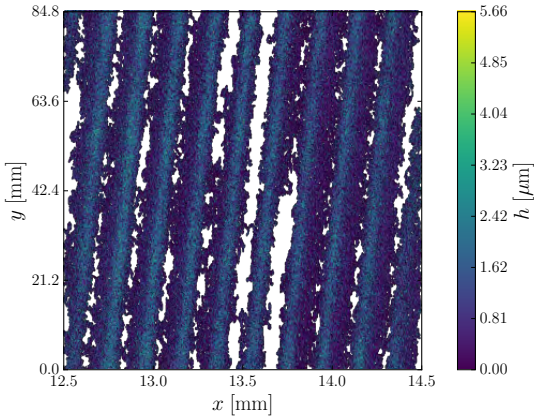
(c) MR – $w/R_t = 0{,}5$



(d) FEMHR – $w/R_t = 0{,}5$

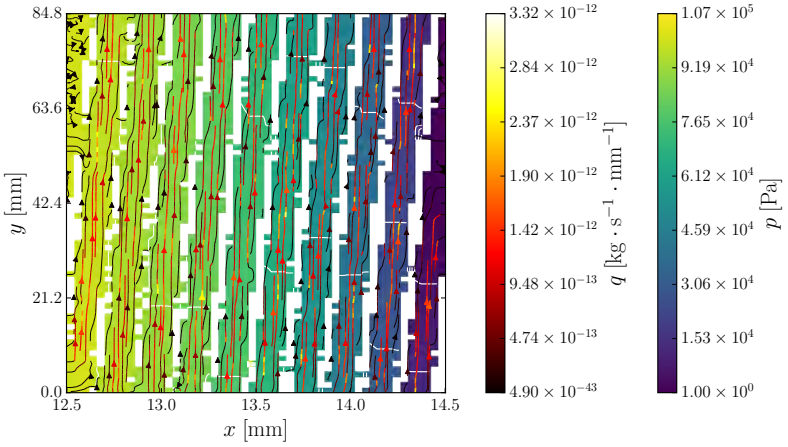


(e) MR – $w/R_t = 0{,}75$

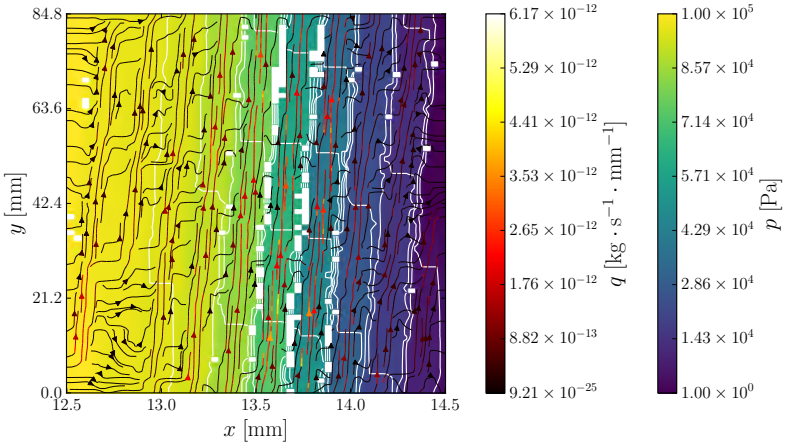


(f) FEMHR – $w/R_t = 0{,}75$

FIGURE 3.35 – Évolution du champ des ouvertures en fonction de l'enfoncement adimensionnel selon le modèle numérique de contact utilisé (FEMHR ou MR) pour le profil avec aspérités. Les zones blanches sont des zones de contact.



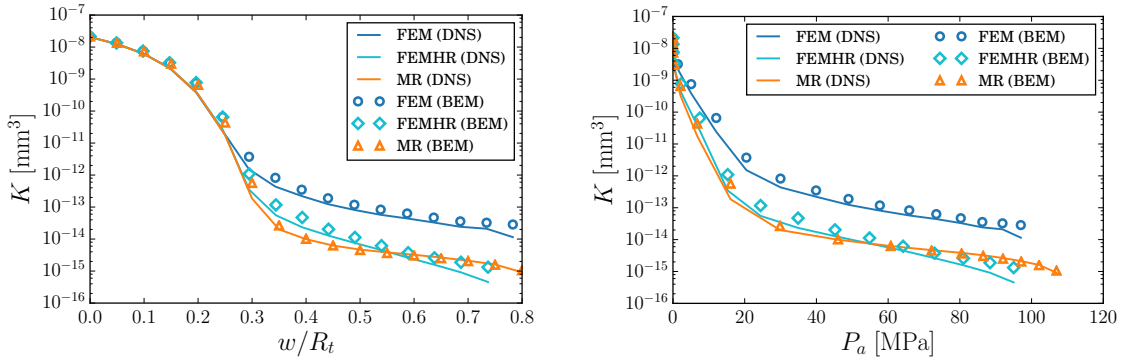
(a) BEM pour la surface MR – $w/R_t = 0{,}5$.



(b) BEM pour la surface FEMHR – $w/R_t = 0{,}5$.

FIGURE 3.36 – Champs internes calculés (pression et lignes de courant) par la méthode à deux échelles (BEM) sur le champ des ouvertures obtenu par le modèle réduit et les élément finis à haute résolution à $w/R_t = 0{,}5$.

de la transmissivité globale à la description microscopique du champ des ouvertures. Il est donc, de ce fait, difficile de prédire si le modèle réduit est satisfaisant par rapport aux éléments finis, il faudrait pour cela raffiner davantage le maillage pour s'assurer de la convergence. Après s'en être assuré, il restera vraisemblablement à améliorer la description faite du contact par le modèle réduit aux fortes charges, pour décrire les passages radiaux qui persistent (voir figure 3.35). La méthode à deux échelles reproduit de manière satisfaisante les résultats de la simulation directe, en particulier pour le modèle réduit. Pour les éléments finis, la BEM semble systématiquement surestimer la transmissivité. Ceci est possiblement dû aux passages radiaux qui persistent sur toute la longueur de la surface, qui forment un jeu de « constrictions », et dont l'effet est décrit de manière imprécise par le changement d'échelle. Comme dans le cas sans aspérités, les écarts les plus importants entre DNS et BEM sont observés proches des seuils de transition de régime de fuite radiale–spirale (vers $w/R_t \approx 0{,}25$, écart proche 100%), et au seuil de percolation (écart montant à 200% sur FEM). Enfin, à pression d'assise donnée, une comparaison des figures 3.33 et 3.37 montre que la transmissivité de la surface avec des aspérités est plus importante que sans aspérités.



(a) (b)

FIGURE 3.37 – Transmissivité apparente glissante en fonction de l'enfoncement adimensionnel ou de la pression d'assise. La légende indique d'abord le modèle de contact utilisé (FEM, FEMHR ou MR), puis entre parenthèses, la méthode pour le calcul d'écoulement (DNS ou BEM).

3.4.2.3 Temps d'analyse

Au niveau du temps de calcul pris par la simulation directe ou la méthode à deux échelles, il apparait dépendant de la machine utilisée et de la manière de programmer. Néanmoins, la comparaison de ces temps est effectuée sur un exemple de surface fractale en annexe F. Une réduction allant jusqu'à un facteur 20 du temps d'analyse par la méthode à deux échelles est obtenue pour le pavage le plus fin, rendant celle-ci attractive. Pour la surface spiralée étudiée dans cette section, les résultats sont plus mitigés. En simulation directe, un temps moyen de 40 min (écart-type 13 min) est nécessaire contre 60 min (écart-type 11 min) pour la méthode à deux échelles, plus ou moins comparable. Il s'agit toutefois d'un cas particulier. En effet la surface comporte 180 000 points, soit autant de degrés de liberté en simulation directe. Par la méthode à deux échelles, le pavage et son maillage utilisés mène à 460 000 degrés de liberté, ce qui est contraire à la philosophie même de la méthode qui est de réduire la complexité du problème. Ceci est dû au faible nombre de points que comporte la surface dans la direction y afin de permettre le calcul de déformation par éléments finis. Chaque pavé va donc englober un petit nombre de points (5 selon cette direction), mais avoir un rapport d'aspect important, obligeant un maillage de sa frontière avec un nombre important d'éléments (ici 60 éléments finis de frontière pour les faces selon y, soit un total d'environ 120 éléments par pavé). Lorsque le nombre d'éléments total est

important, l'étape dominante est la construction du système linéaire global, qui est faite en séquentiel. Il est possible de la réaliser en parallèle en calculant d'abord les sous-matrices sur chaque pavé séparément, puis en assemblant la système global. Ceci constitue une perspective d'amélioration du code, permettant *a priori* une forte réduction du temps d'analyse.

3.5 Conclusions

Cette section a présenté la démarche de modélisation de l'écoulement en fracture rugueuse. Tout d'abord, l'équation de Reynolds pour l'écoulement d'un gaz faiblement compressible et incluant une condition limite de glissement de premier ordre est développée à l'échelle microscopique. Cette équation, assimilable à une équation de diffusion, dépend linéairement du nombre de Knudsen local. Ensuite, un modèle macroscopique d'écoulement est développé sur un élément de surface représentatif. Il est montré que que ce modèle possède une forme semblable à l'équation de Reynolds, et fait intervenir un tenseur de transmissivité caractéristique de l'élément de fracture considéré. Ce tenseur n'est pas intrinsèque et peut être entièrement déterminé par la résolution d'un problème de fermeture sur l'élément représentatif. Une décomposition de ce tenseur en fonction des puissances du nombre de Knudsen représentatif permet notamment d'isoler la partie purement visqueuse de ce tenseur des termes de correction de glissement. Tous les tenseurs de cette décomposition sont intrinsèques à la microstructure de l'élément de surface représentatif. La fracture rugueuse possédant un caractère multi-échelle, il est impossible d'en extraire un élément purement représentatif. Une méthode à deux échelles est alors développée dans un troisième temps pour l'analyse de l'écoulement à l'échelle mégascopique. Cette méthode subdivise la fracture en pavés sur lesquels sont déterminés des tenseurs de transmissivité. L'écoulement dans ce champ de tenseur, hétérogène et anisotrope, est alors résolu par une méthode des éléments finis de frontière, permettant de préserver des tenseurs aux axes principaux quelconques. Comme exemples applicatifs, le calcul de l'écoulement dans une surface spiralée modèle (et avec une surface fractale, voir annexe F) est effectué par simulation directe et avec la méthode à deux échelles. Cette dernière reproduit de manière satisfaisante les résultats de la simulations directe, les écarts importants étant observés proches des transitions (radiale–spirale, seuil de percolation), là où l'écoulement est dominé par des constrictions et le changement d'échelle local hasardeux. La méthode à deux échelles apparait comme robuste en régime glissant, en particulier, considérer des propriétés de transport uniformes par morceaux (masse volumique, libre parcours moyen) semble avoir un impact modéré sur la transmissivité apparente globale. Cette méthode permet également un gain de temps dans l'analyse par rapport au calcul direct, qui peut être amélioré davantage.

Chapitre 4

Confrontation de l'approche numérique avec des essais expérimentaux

Ce chapitre offre une confrontation du « modèle numérique d'étanchéité » avec des résultats expérimentaux existant au Laboratoire d'Étanchéité maestral. La partie numérique consiste alors à mesurer la géométrie des surfaces rugueuses, à réaliser un calcul de mécanique du contact pour obtenir le champ des ouvertures, et enfin d'y modéliser l'écoulement par les méthodes numériques développées dans le chapitre 3. Il s'agit alors essentiellement d'un chapitre de synthèse, faisant le lien entre simulation numérique et expérimentation, en vue d'en évaluer la concordance présumée.

4.1 Présentation de l'approche expérimentale des travaux de Tlili

Cette section présente l'approche expérimentale employée par Tlili (2013) dans ses travaux de thèse de doctorat au Laboratoire d'Étanchéité maestral pour la mesure de fuite en hélium au travers d'un contact entre deux surfaces rugueuses.

Les essais consistent en la mesure de fuite au travers d'un contact formé par deux surfaces rugueuses : une portée annulaire usinée en acier et une pastille d'aluminium 1050. La mise sous charge des deux surfaces est assurée par une presse hydraulique instrumentée, permettant d'atteindre une pression d'assise [1] souhaitée pour le contact. Le gaz traceur utilisé est de l'hélium et la mesure de fuite se fait avec un spectromètre de masse. Une vue en coupe du dispositif est présentée sur la figure 4.1, dont les éléments principaux sont colorés :

- En gris, l'outil en acier, qui comporte à sa base une portée annulaire rugueuse obtenue par tournage. Cette portée est d'un rayon interne $r_i = 12{,}5$ mm, d'un rayon externe $r_e = 14{,}5$ mm et possède une rugosité arithmétique de 1,6 µm.
- En bleu, la pastille métallique d'aluminium 1050 obtenue à partir d'une tôle laminée, d'épaisseur 0,5 mm et de rugosité arithmétique de 0,3 µm.
- En vert, la pièce rectifiée en acier, qui permet de réduire le défaut de planéité du support (le parallélisme est quant à lui réduit par la rotule de la presse).
- En jaune, le support en acier, auquel est relié le spectromètre de masse.
- En rouge, le joint torique en nitrile, permettant d'assurer l'étanchéité du montage et pouvoir effectuer le vide dans la chambre secondaire avec le spectromètre.

Lorsque le serrage est effectué sous presse, la portée rugueuse va venir au contact de la pastille métallique et former une chambre primaire, dans laquelle de l'hélium sous pression sera injecté. De l'autre côté de ce contact est située la chambre secondaire, dont l'étanchéité avec le milieu extérieur est réalisée par le joint torique. Cette chambre secondaire est reliée au spectromètre de masse qui y maintient une condition de vide et mesure la fuite traversant le contact. À noter que l'aluminium utilisé flue à température ambiante

1. Rapport de l'effort normal de serrage et de la surface annulaire nominale de contact.

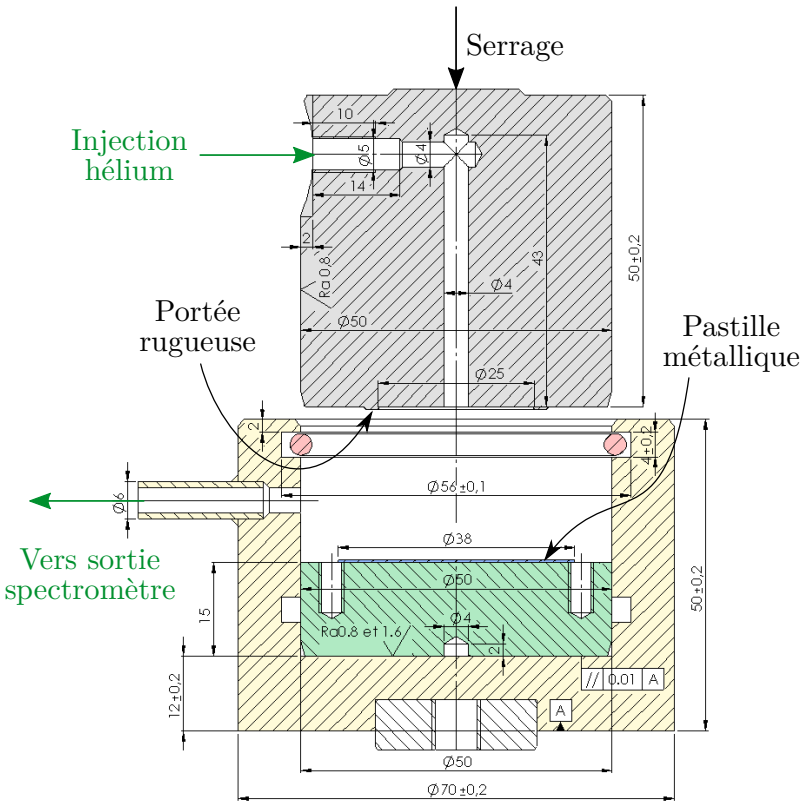


FIGURE 4.1 – Vue en coupe du dispositif expérimental de Tlili (2013). Les constituants principaux sont : l'outil avec la portée rugueuse (gris) ; la pastille métallique (bleu) ; la pièce rectifiée (vert) ; le support (jaune) ; le joint torique (rouge).

sous serrage, ce qui modifie l'ouverture du contact dans le temps. Quelque soit la charge appliquée, Tlili (2013) ne constate plus de déformation de fluage après trente minutes à compter de l'application. Toutefois, il conviendrait à l'avenir d'utiliser des matériaux qui ne fluent pas, pour s'affranchir de cette effet supplémentaire sur la microstructure de l'ouverture du contact.

La procédure expérimentale commence par l'application de la pression d'assise souhaitée par pilotage en effort de la presse. Une pompe à vide et le spectromètre sont ensuite allumés et permettent d'évacuer l'hélium résiduel dans la chambre primaire et secondaire respectivement. Ceci est réalisé pendant trente minutes pour s'affranchir notamment du fluage considéré comme stable après cette durée. L'hélium est ensuite injecté dans la chambre primaire à une pression donnée, et la position des plateaux de la presse est maintenue fixe (pilotage en déplacement) pour compenser l'effet de fond. La fuite mesurée par le spectromètre passe par un régime transitoire avant d'atteindre sa valeur stationnaire au bout de quelques minutes, valeur qui est enregistrée. La pression d'hélium est ensuite augmentée au palier suivant, trois valeurs sont utilisées au total : 2 bar, 11 bar et 51 bar. La pression d'assise est augmentée sur une plage allant de 20 MPa à 110 MPa, pour laquelle la fuite sera mesurée pour les trois pressions d'hélium. Pour chaque valeur de la pression d'assise, la pastille d'aluminium est changée. Ces séries de mesures sont répétées trois fois.

Les résultats obtenus en termes de taux de fuite en fonction de la pression d'assise sur le contact sont donnés sur la figure 1.11 du chapitre 1. Pour faciliter la comparaison avec les simulations, ils peuvent être traduits en transmissivité apparente par utilisation de la loi de DARCY pour le débit de fuite, similaire à l'équation (3.32) :

$$\mathcal{Q} = \bar{p}\frac{K}{\mu}\frac{L_y}{L_x}\Delta p \tag{4.1}$$

4.2 Procédure numérique et confrontation avec l'expérience

4.2.1 Surface rugueuse, contact et écoulement

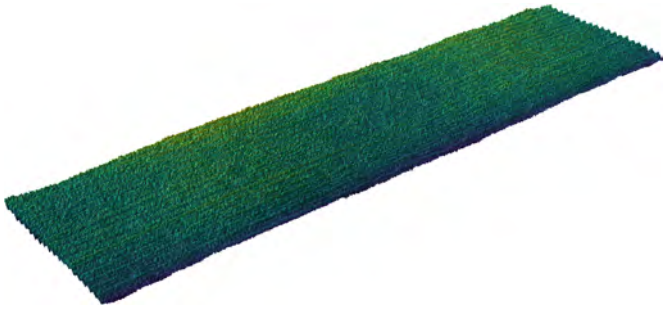
On s'intéresse maintenant à la modélisation numérique du processus expérimental présenté dans la section précédente. Pour cela, la topographie de la portée rugueuse annulaire a été cartographiée à l'aide d'un profilomètre LASER NanoFocus μscan, en effectuant un palpage circulaire (pour un rayon donné, on palpe selon le périmètre, puis on se décale à l'incrément de rayon suivant et ainsi de suite). La surface sous forme déroulée possède des dimensions de 2 mm $\times$ 84 mm. Deux résolutions de mesures ont été utilisées :

— Une basse résolution, composée de $195 \times 961 = 187\,395$ points selon x et y respectivement. On a alors des pas de discrétisation de 10 µm selon x et 87 µm selon y.
— Une plus haute résolution, discrétisée par $970 \times 961 = 932\,170$ points. Cela mène à des pas de discrétisation de 2 µm selon x et 87 µm selon y.

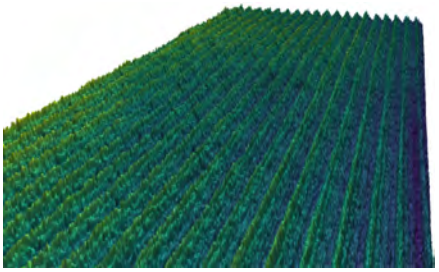
Les surfaces sont ensuite traitées pour ne garder que la zone d'intérêt, puis redressées par un plan des moindres carrés, pour corriger le défaut de planéité. Le résultat est présenté sur la figure 4.2, on observe les stries du profil dues à l'usinage par tournage, ainsi que de l'ondulation dans les directions parallèle (circonférentielle) et perpendiculaire (radiale) aux stries.

Les surfaces sont ensuite mises en contact avec la pastille en aluminium, et le calcul de déformation qui permet d'obtenir le champ des ouvertures est réalisé par le modèle réduit présenté en annexe G. La surface de la pastille est considérée comme parfaitement lisse. Cette hypothèse s'avère simplificatrice à la vue de la rugosité de celle-ci (0,3 µm, non négligeable devant celle de la bride) et de la présence de petits sillons due au procédé de laminage Tlili (2013). On ne tient pas compte également des potentiels effets du fluage dans la modélisation. Le champ des ouvertures calculé est ainsi présenté sur la figure 4.2 pour quelques valeurs de la pression d'assise. Pour la surface à haute résolution, on remarque que l'extrémité droite du profil arrive en contact en premier, et que se forme très rapidement (à faible charge) un canal unique de fuite. Le flux global va donc être essentiellement contrôlé par ce canal *a priori*, formant un passage critique. À plus forte charge, on remarque l'arrivée en contact des différents sommets de stries du profil, ce qui va impulser à l'écoulement un caractère spiralé. Pour la surface à basse résolution, on obtient un profil légèrement différent. En effet, à faible charge, le contact commence par s'établir à l'extrémité gauche de la surface. À plus forte charge, une grande partie du sommet des stries est en contact, ce qui donnera un caractère en partie spiralé à l'écoulement. L'extrémité droite de la surface est également en contact et laisse apparaître un canal de fuite dans cette zone (comme dans le cas à haute résolution). Les différences obtenues entre les deux résolutions restent difficilement explicables, en particulier parce qu'elles se manifestent sur les basses fréquences du profil (différence sur l'ondulation radiale essentiellement). On peut toutefois s'autoriser à évoquer un effet possible d'une variation de température lors du palpage (d'une durée de quelques heures à haute résolution), qui va dilater verticalement la pièce, d'une valeur pouvant potentiellement être de l'ordre du micromètre. Cet effet va alors se manifester sur l'ondulation radiale du palpage. Il conviendrait de confirmer et auquel cas corriger cet effet pour les futures études. En tout état de cause, il y a fort à parier que ces différences entres les deux résolutions vont se traduire par de légères disparités dans le comportement en étanchéité.

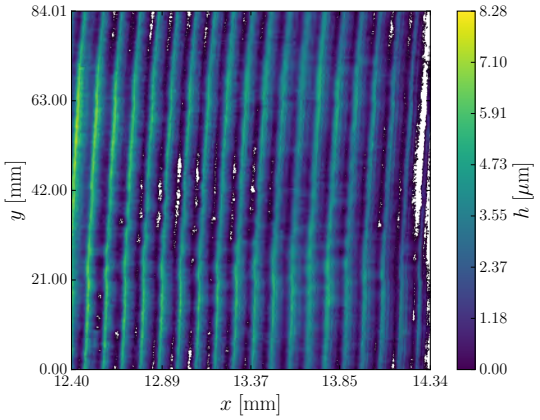
La dernière étape consiste à calculer l'écoulement glissant dans ces champs des ouvertures, en appliquant les mêmes différences de pression qu'expérimentalement. On utilise de plus le modèle de glissement de premier ordre.



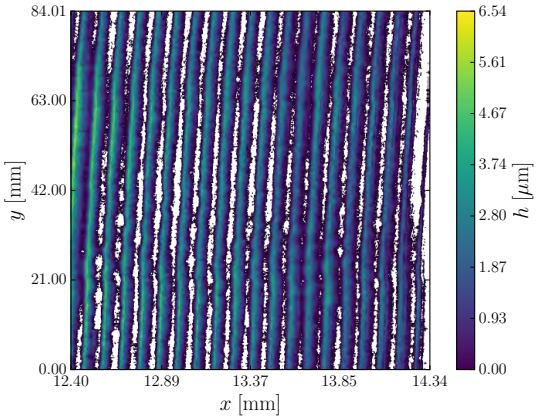
(a) Vue 3D de la surface de la bride à haute résolution.



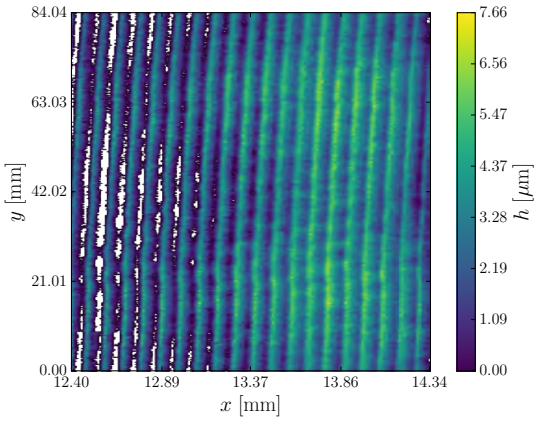
(b) Grossissement sur les stries.



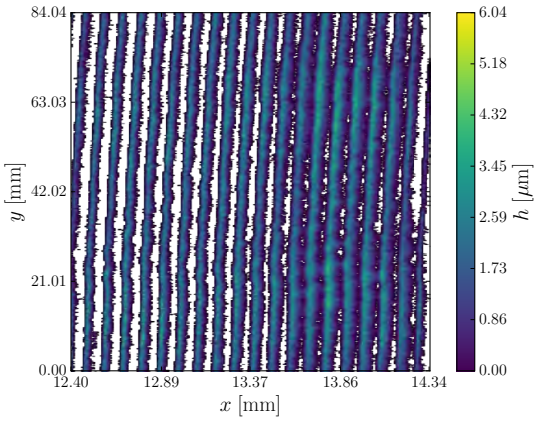
(c) Ouverture à $P_a = 14\,\text{MPa}$ (haute résolution).



(d) Ouverture à $P_a = 58\,\text{MPa}$ (haute résolution).



(e) Ouverture à $P_a = 12\,\text{MPa}$ (basse résolution).



(f) Ouverture à $P_a = 54\,\text{MPa}$ (basse résolution).

FIGURE 4.2 – Vues de la surface rugueuse de la bride sous forme déroulée (faux rapport d'aspect), ainsi que du champ des ouvertures calculé à différentes charges pour les deux résolutions.

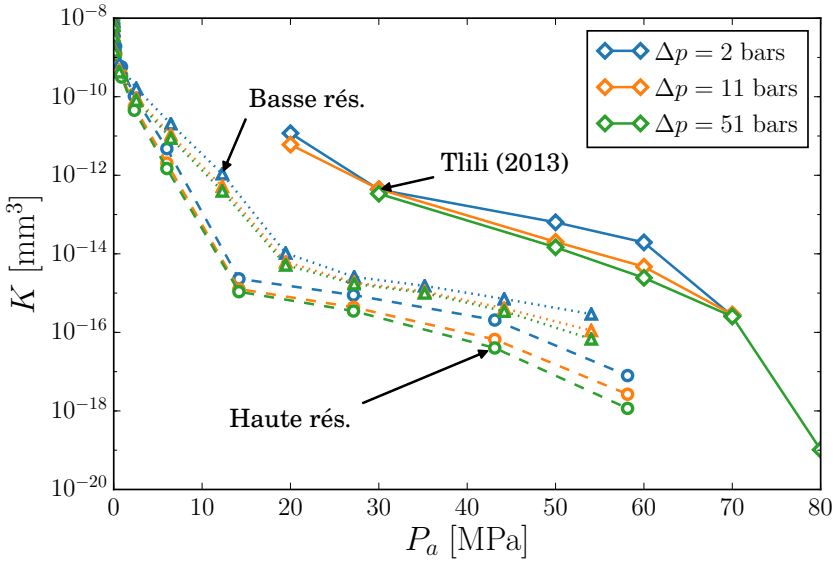


FIGURE 4.3 – Évolution de la transmissivité du contact en fonction de la pression d'assise, pour les trois différences de pression.

4.2.2 Comparaison avec les résultats de Tlili

On peut à présent comparer les résultats expérimentaux de Tlili (2013) aux simulations. Ces derniers sont donnés sous forme de transmissivité sur la figure 4.3. Par soucis de simplicité, on ne présente pour l'écoulement simulé que les résultats obtenus par la simulation directe.

Tout d'abord, on remarque qu'augmenter la différence de pression (et donc la pression moyenne) fait diminuer la transmissivité pour une pression d'assise donnée, dans des proportions non négligeables. Le phénomène est également mis en évidence dans les mêmes proportions sur les essais. Ce résultat est conforme à ce que l'on attend et nous informe quant à la présence et l'impact des effets de raréfaction de l'écoulement sur la fuite. A forte pression, ces effets tendent a être annihilés, et la transmissivité apparente se rapproche de la transmissivité intrinsèque du contact.

Ensuite, on observe immédiatement une sous-estimation de la transmissivité avec les simulations par rapport aux résultats expérimentaux, allant de deux à trois ordres de grandeur selon la pression d'assise. On note néanmoins une tendance semblable de décroissance lente de la transmissivité en fonction de la pression d'assise sur la plage 20 MPa – 60 MPa, correspondant au régime d'écoulement spiralé. Avant cette zone (pour une assise inférieure à 15 MPa – 20 MPa), l'écoulement est dans le régime de fuite radiale et la transmissivité décroît très rapidement avec le serrage. Cela n'est toutefois pas caractérisé expérimentalement car la fuite correspondante dans ce régime dépasse le seuil supérieur de saturation du spectromètre. Concernant les modèles numériques à haute et basse résolution, on observe une bonne correspondance à faible charge, puis à plus forte charge, un écart d'environ un ordre de grandeur persiste. Cela est dû à la différence de morphologie du champ des ouvertures selon la résolution (voir figure 4.2) et apporte la preuve que la mécanique du contact est une étape cruciale pour bien estimer la fuite. Également, le modèle réduit de contact utilisé ne permet pas d'atteindre des pressions d'assise aussi élevées qu'expérimentalement, le seuil de percolation du champ des ouvertures étant atteint avant.

Les résultats du modèle numérique d'étanchéité apparaissent alors ici comme moyennement satisfaisants, par leurs caractères non reproductifs et donc non prédictifs d'une fuite. Pour tenter de réduire cet écart à l'avenir, on discute des différentes sources possibles de celui-ci dans ce qui suit.

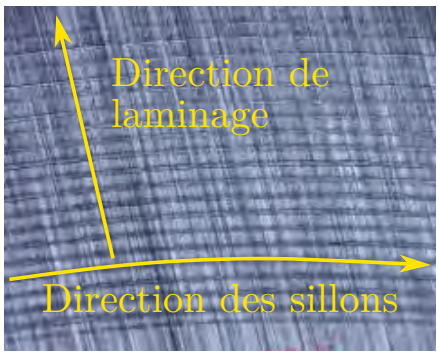


FIGURE 4.4 – Empreinte résiduelle du contact sur la pastille à 50 MPa (d'après (Tlili, 2013)).

Concernant l'aspect expérimental, le montage utilisé apparaît comme assez raide (ensemble presse et montage entièrement en acier), ce qui ne facilite pas la mise en contact de la bride avec la pastille sans un éventuel défaut de parallélisme, bien que cela ait été corrigé au maximum par utilisation d'une rotule. Les pastilles obtenues par laminage présentent un état de surface strié unidirectionnel, d'une rugosité relativement importante. L'empreinte résiduelle après serrage est présentée en figure 4.4, et l'on remarque que les sillons laissés par la surface rugueuse en acier sont entrecoupés par les stries de laminage, favorisant ainsi les fuites radiales. La présence de ces deux imperfections vont avoir tendance à augmenter la fuite mesurée par rapport à un contact « idéal » *a priori*. Le comportement fluant de la pastille en aluminium va également avoir tendance à modifier le champ des ouvertures dans le temps, et donc la fuite (tendance à combler les anfractuosités et donc à diminuer la fuite).

Les caractéristiques précédentes ne sont pas prises en compte dans le modèle numérique de contact mécanique pour des raisons simplificatrices. Pour améliorer la concordance entre les résultats numériques et expérimentaux, il conviendrait d'en enrichir les modèles numériques, ou de s'en affranchir au maximum expérimentalement. Il parait également nécessaire de diminuer les incertitudes du modèle réduit de contact lui-même, discutées dans l'annexe G, pour obtenir la description la plus juste du champ des ouvertures. Avant cela, il semble d'abord primordial de réaliser une cartographie de la surface la plus précise possible, et pour cela de s'affranchir d'éventuels effets de dilatation thermique au cours du palpage de la pièce [2]. Comme le montre la figure 4.2, pour deux mesures distinctes de la surface, le champ des ouvertures calculé peut être radicalement différent, menant à une fuite elle aussi différente. Les surfaces mesurées se caractérisent par un profil bombé dans le sens radial, la différence entre ces deux bombés n'étant *a priori* qu'un artefact de mesure. Une fois ce champ des ouvertures déterminé, la modélisation de l'écoulement y est faite par utilisation de l'équation de la lubrification, corrigée par l'apport d'un glissement aux parois pour tenir compte de la raréfaction de l'écoulement (dans le régime glissant). On pourrait questionner la validité de l'hypothèse des faibles pentes dans un milieu rugueux multi-échelle (voir le chapitre 1), mais la question qui vient à l'esprit est ici plutôt celle du glissement. Compte-tenu de la présence de vide imposée par le spectromètre, il est vraisemblable que localement dans la fracture, la raréfaction (le nombre de KNUDSEN) atteinte soit importante. En conséquence, le simple modèle glissant de premier ordre, limité au régime glissant, se trouve être inapproprié et sous-estime normalement la transmissivité apparente. Néanmoins, en se basant sur les résultats obtenus dans les puces nanofluidiques du chapitre 2, il semble légitime de penser que l'écart avec l'expérience apporté par le modèle de premier ordre soit inférieur à un ordre de grandeur. Cela reste toutefois à confirmer pour des géométries modèles rugueuses autres que des canaux droits, et ne doit pas empêcher le développement de nouveaux modèles d'écoulement, ou l'utilisation de

2. Pour la pièce en acier de la figure 4.1, la variation de hauteur palpée est estimée à $\Delta h \approx 0{,}6\ \mu\text{m} \cdot \text{K}^{-1}$.

méthodes dédiées aux régimes d'écoulement fortement raréfiés, afin d'accroitre la validité physique.

Finalement, chaque étape de la modélisation numérique (palpage, contact et écoulement) apporte son lot d'incertitudes, et chacune des ces contributions est difficilement différentiable des autres dans la déviation globale observée. Il est alors tentant de vouloir les minimiser individuellement. Il en va de même pour les essais, où les facteurs d'incertitude sont multiples et leurs effets doivent être estompés, pour améliorer la compréhension fondamentale des mécanismes de l'étanchéité d'un contact métallique.

4.3 Conclusions

Ce chapitre a présenté une comparaison du modèle numérique d'étanchéité à des résultats d'essais pré-existants (Tlili, 2013). Les simulations numériques présentent un écart important avec les résultats expérimentaux. Ceci est notamment dû à la propagation et l'accumulation d'incertitudes dans le processus de modélisation, qui est séquentiel. Tout d'abord, il est important d'avoir une bonne description de la surface rugueuse pour ensuite effectuer un calcul de mécanique du contact cohérent. La sensibilité sur la fuite a été exposée par simulation de l'écoulement dans ce champ des ouvertures. L'aspect raréfié de l'écoulement est pris en considération par un modèle de glissement de premier ordre. Compte tenu de la forte raréfaction potentielle, ce modèle n'est pas totalement adapté et sous-estime la fuite. Il faudra alors à l'avenir améliorer cette description avec des modèles adaptés aux régimes fortement raréfiés. La partie expérimentale est également entachée d'imperfections (défaut de parallélisme, rugosité « parasite », fluage) qui rendent l'interprétation des mesures plus complexe. Des progrès restent alors à réaliser des deux bords pour permettre une description et une prédiction plus fine de la fuite, en particulier pour les très faibles fuites à fort serrage, d'intérêt majeur en étanchéité. L'étude d'autres motifs de rugosité peut également être envisagée, par exemple une surface spiralée de plus faible rugosité arithmétique (0,4 µm), pour laquelle le chemin de fuite est plus complexe.

Conclusion générale et perspectives

Les joints d'étanchéité métalliques sont utilisés dans bon nombre de domaines industriels et peuvent en conditionner les performances. Dans ces systèmes, la liaison à étancher est formée de deux surfaces métalliques rugueuses mises en contact l'une contre l'autre. L'espace interstitiel libre entre les deux antagonistes forme alors une fracture, aux épontes imperméables. L'efficacité en étanchéité de cette fracture va alors dépendre de sa connectivité, qui peut être contrôlée par un motif de rugosité particulier et un effort de serrage approprié, ainsi que de la nature du fluide à étancher. L'étude de son comportement est en revanche complexe car le problème est multi-physique (contact mécanique, écoulement de fluide, effets thermiques, etc.) et multi-échelle (défaut de surface allant de l'ondulation aux aspérités). Ce travail s'est alors attelé à la modélisation numérique de l'écoulement d'un gaz raréfié en régime glissant dans ce milieu. De façon générale, la modélisation procède par découplage des approches, on détermine d'abord le champ des ouvertures par mise en contact et déformation des surfaces, puis on calcule l'écoulement dans celui-ci. Il n'y a donc pas d'interaction entre le fluide et la structure, et la procédure est séquentielle.

Dans un premier temps et afin de se concentrer sur l'aspect écoulement, en s'affranchissant du calcul du champ des ouvertures, des puces nanofluidiques sont fabriquées par photolithographie en niveaux de gris. Ces puces comportent des structures de type canaux droits ou réseaux hétérogènes de canaux droits, à la géométrie connue et relativement bien maîtrisée. Leurs profondeurs, dans la gamme 100 nm–500 nm, sont choisies pour être semblables à celles rencontrées dans les joints d'étanchéité. Des mesures de fuite en hélium y sont réalisées grâce à un spectromètre de masse, qui produit une condition proche du vide en sortie, alors qu'en entrée, la pression est variée pour atteindre un niveau de pression moyenne désiré sur la puce. Les nombres de Knudsen moyens alors atteints sur ces puces s'échelonnent d'environ $\mathcal{O}\left(10^{-1}\right)$ à $\mathcal{O}\left(10^{3}\right)$. Ces résultats expérimentaux sont ensuite comparés à des simulations de type réseau de pores, utilisant des modèles de glissement de premier ordre ou phénoménologiques de la littérature. On montre que malgré la forte raréfaction atteinte, ces modèles décrivent de manière acceptable la fuite macroscopique et permettent d'obtenir le bon ordre de grandeur. En particulier, on observe un comportement fuite–pression moyenne suivant une loi puissance d'ordre un pour des nombres de Knudsen typiquement dans le régime de transition et au-delà. À plus faible raréfaction, on entrevoit le comportement du second ordre des régimes hydrodynamique et glissant, qu'il conviendrait de révéler davantage en effectuant des mesures à plus haute pression encore. Des améliorations au niveau de la modélisation sont envisageables, notamment par l'introduction des géométries gravées des canaux (de section plutôt parabolique), ou encore par l'emploi de méthodes dédiées aux écoulements fortement raréfiés. Ces expériences et les modélisations qui les accompagnent permettent d'augurer plus sereinement l'étude des écoulements en fracture rugueuse par un modèle glissant de premier ordre, sous des conditions de raréfaction assez importantes. Il conviendrait toutefois de s'assurer de résultats similaires avec des géométries rugueuses modèles autres que des réseaux de canaux droits, et qui soient plus représentatives encore d'un système d'étanchéité.

Les écoulements de gaz raréfiés en fracture rugueuse sont ensuite abordés dans le

cadre de la théorie du glissement. En supposant une micro-géométrie aux faibles pentes, l'équation de Reynolds corrigée du glissement est formellement développée à partir de l'équation de Stokes et d'une condition générale de glissement de premier ordre aux parois. On montre que cette équation est d'ordre deux en la pente des aspérités de la surface et d'ordre un en le nombre de Knudsen. À partir de ce résultat, un processus de changement d'échelle est effectué en usant de la méthode de la prise de moyenne volumique, sous l'hypothèse d'un écoulement faiblement compressible, ce qui permet de déduire un modèle macroscopique d'écoulement à l'échelle d'un élément représentatif de fracture. Ce modèle relie alors le débit massique macroscopique au gradient de la pression moyenne par un tenseur de transmissivité, similairement à une loi de Darcy. Ce dernier peut être entièrement déterminé par résolution d'un problème de fermeture auxiliaire sur l'élément représentatif, et est fonction de la microstructure ainsi que du libre parcours moyen représentatif sur celui-ci, caractérisant la raréfaction. Le tenseur obtenu n'est donc pas intrinsèque à l'ouverture. Une décomposition en série selon les puissances du petit paramètre qu'est le nombre de Knudsen a permis d'en exhiber la partie purement visqueuse des termes de correction de glissement dans une suite de tenseurs. Ces tenseurs sont cette fois-ci intrinsèques au champ des ouvertures et sont déterminés par résolutions de problèmes de fermeture couplés. Par troncature au premier ordre, on établit alors le modèle linéarisé équivalent de Klinkenberg en fracture. On montre sur quelques exemples que l'évolution de la transmissivité apparente en fonction du nombre de Knudsen est croissante et généralement non-linéaire à l'échelle de l'élément représentatif. Cette propriété est le résultat de l'hétérogénéité de la microstructure, entraînant un écoulement qui n'est généralement pas unidimensionnel, de telle sorte que la linéarité microscopique du modèle de glissement n'est pas préservée lors du processus de moyennage.

Pour accéder à la propriété de transport à l'échelle de l'ensemble de la fracture (celle du joint d'étanchéité), une méthode à deux échelles est développée. La première étape consiste à subdiviser la fracture en pavés et à en déterminer leur tenseur de transmissivité propre, qui sera fonction des microstructures et libres parcours moyens sur ceux-ci. Cela constitue la nouvelle échelle locale, où les propriétés sont définies uniformes par morceaux. Ensuite, l'écoulement dans ce champ de tenseurs est résolu par une méthode des éléments finis de frontière pour remonter à la transmissivité apparente à l'échelle de la totalité de la fracture. Par comparaison à la simulation numérique directe sur des fractures modèles, la méthode à deux échelles a montré sa robustesse en fournissant des résultats en bon adéquation avec celle-ci. En particulier, pour les surfaces « raisonnables », un nombre relativement restreint de pavés peut être utilisé pour obtenir une bonne approximation de la transmissivité apparente, montrant la sensibilité limitée quant à l'utilisation de propriétés de transport uniformes par morceaux. Ce modèle permet alors d'estimer la performance en étanchéité d'une fracture en un temps diminué par rapport à une simulation directe. Une réduction allant jusqu'à un facteur vingt est obtenue dans les exemples traités. Néanmoins, des écarts significatifs par rapport à la simulation directe apparaissent lorsque l'écoulement global est dominé par des constrictions critiques (typiquement proche du seuil de percolation). Dans ces cas, il est délicat d'estimer localement et convenablement des transmissivités locales sans raffiner fortement le pavage, ce qui se fait au détriment du temps de calcul de la méthode.

Un exercice applicatif sur une surface spiralée modèle a permis d'illustrer la procédure de modélisation de fuite dans son ensemble. Le champ des ouvertures est d'abord calculé en fonction de l'effort de serrage par éléments finis sous le code `Abaqus` ainsi que par un modèle réduit. L'écoulement y est ensuite calculé par simulation directe et par la méthode à deux échelles. Une forte sensibilité de la fuite est observée selon le modèle de contact utilisé, montrant l'importance de la caractérisation du champ des ouvertures. Dans chaque cas en revanche, on montre un bon accord entre les deux méthodes d'écoulement en terme de fuite obtenue. La particularité des surfaces spiralées qui est de n'avoir plus qu'un chemin de fuite unique à partir d'un certain serrage oblige cependant à opter pour un

pavage assez fin ; de plusieurs pavés sous chaque strie. Cela peut devenir limitant pour des surfaces de grandes dimensions en terme de temps de calcul, rendant la méthode à deux échelles moins attrayante pour ce type de surface. Une programmation plus adéquate, parallélisant certaines tâches, devrait permettre d'amoindrir ce désagrément.

Une comparaison du modèle numérique d'étanchéité avec des résultats expérimentaux antérieurs à été réalisée. Des écarts importants sont observés et la fuite est sous-estimée. Une partie de ces écarts est imputable à chaque étape de la modélisation numérique tels que la mesure de la surface, le modèle de contact et l'écoulement. Pour ce dernier, il est attendu que le modèle glissant de premier ordre sous-estime la fuite (toutes choses égales par ailleurs), compte tenu des fortes raréfactions lors de l'expérience. Une autre part de ces écarts provient de la configuration expérimentale, notamment de la rugosité des pastilles, qui n'est pas considérée dans le modèle numérique. Il faudrait pouvoir s'en affranchir à l'avenir en utilisant des pastilles de rugosité bien inférieure à celle de la portée ou l'intégrer dans le modèle de contact, et également limiter les défauts de mesures suspects.

Certaines perspectives émergent à la lumière de ce travail. Tout d'abord, nous avons vu qu'il était primordial dans l'estimation de la fuite de disposer d'un champ des ouvertures le plus fidèle possible à la réalité. Cela passe par une bonne description du contact entre surfaces rugueuses, de la plus grande à la plus petite échelle. En particulier, les effets de la déformation plastique sur le bouchage prématuré des anfractuosités doivent être perfectionnés. On peut également attirer l'attention sur le comportement au niveau des bords du contact, qui paraissent contrôler le comportement global dans certains cas. Enfin il pourrait être utile pour le modèle de décrire le contact lors de la décharge du système, situation menant à des comportements expérimentaux en fuite différents de ceux lors de la charge, et qu'il est bien souvent utile de connaître en pratique. D'un point de vue des méthodes pour le contact rugueux, l'aspect multi-échelle rend prohibitif l'usage de simulation directe. On peut alors se demander en quelle mesure le développement d'un modèle multi-échelle ou à séparation d'échelles est possible, dans l'idée de ce qui est fait pour les écoulements. Ceci permettrai d'accélérer le calcul du champ des ouvertures. Pour valider la justesse de ces modélisations, une observation expérimentale directe du champ des ouvertures au cours de l'écrasement serait également un plus.

En ce qui concerne les écoulements, il a été observé lors des essais sur les puces que le comportement macroscopique était raisonnablement bien répliqué par un modèle d'ordre un. Il conviendrait de valider ceci dans des géométries rugueuses modèles, davantage représentatives d'un champ des ouvertures joint–bride. Le point majeur d'amélioration concerne l'aspect raréfaction au-delà du régime glissant et la physique à petite échelle. Est-il alors possible de développer des modèles effectifs locaux pour décrire l'écoulement fortement raréfié ? Pour intégrer cet aspect fortement raréfié dans la méthode à deux échelles, une approche hybride est envisageable, dans laquelle l'estimation des tenseurs de transmissivité apparents sur chaque pavé serait réalisée par une méthode probabiliste de type DSMC. Cela permettrait de se libérer de la dépendance à un modèle de glissement au domaine de validité donné.

L'amélioration de la modélisation de l'écoulement en présence de constrictions peut passer par l'emploi d'un pavage adaptif, localement raffiné proche de ces constrictions. Une autre approche très différente consisterait en la construction d'un réseau de pores *ad hoc* sur le champ des ouvertures, permettant une analyse assez fine du comportement proche du seuil de percolation. Enfin, un autre aspect peu abordé dans ce manuscrit concerne l'aspect instationnaire de l'écoulement. L'adaptation des méthodes à cette spécificité et la validation à des résultats expérimentaux permettrait de déduire le coefficient d'emmagasinement, information supplémentaire sur le champ des ouvertures.

Références bibliographiques

Abramowitz, M. et Stegun, I. A. (1964). *Handbook of Mathematical Functions : With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Applied mathematics series. Dover Publications.

Alexander, F. J., Garcia, A. L. et Alder, B. J. (1994). Direct simulation monte carlo for thin-film bearings. *Physics of Fluids*, 6(12):3854–3860.

Amestoy, P. R., Duff, I. S., Koster, J. et L'Excellent, J.-Y. (2001). A fully asynchronous multifrontal solver using distributed dynamic scheduling. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 23(1):15–41.

Amestoy, P. R., Guermouche, A., L'Excellent, J.-Y. et Pralet, S. (2006). Hybrid scheduling for the parallel solution of linear systems. *Parallel Computing*, 32(2):136–156.

Arkilic, E. B., Breuer, K. S. et Schmidt, M. A. (2001). Mass flow and tangential momentum accommodation in silicon micromachined channels. *Journal of Fluid Mechanics*, 437:29–43.

Arkilic, E. B., Schmidt, M. A. et Breuer, K. S. (1997). Gaseous slip flow in long microchannels. *Journal of Microelectromechanical Systems*, 6(2):167–178.

Bayada, G. et Faure, J. B. (1989). A double scale analysis approach of the reynolds roughness comments and application to the journal bearing. *Journal of Tribology*, 111(2): 323–330.

Beer, G., Smith, I. et Duenser, C. (2008). *The Boundary Element Method with Programming*. Springer.

Bentall, R. H. et Johnson, K. L. (1968). An elastic strip in plane rolling contact. *International Journal of Mechanical Sciences*, 10(8):637–663.

Bergström, D. (2012). Rough surface generation & analysis. http://www.mysimlabs.com/surface_generation.html.

Berkowitz, B. (2002). Characterizing flow and transport in fractured geological media : A review. *Advances in Water Resources*, 25(8-12):861–884.

Beskok, A. et Karniadakis, G. E. (1999). A model for flows in channels, pipes, and ducts at micro and nano scales. *Microscale Thermophysical Engineering*, 3(1):43–77.

Bhushan, B. (1998). Contact mechanics of rough surfaces in tribology : multiple asperity contact. *Tribology Letters*, 4(1):1–35.

Blanchard, D. et Ligrani, P. (2007). Slip and accommodation coefficients from rarefaction and roughness in rotating microscale disk flows. *Physics of Fluids*, 19(6):063602.

Bottiglione, F., Carbone, G., Mangialardi, L. et Mantriota, G. (2009a). Leakage mechanism in flat seals. *Journal of Applied Physics*, 106(10):7.

Bottiglione, F., Carbone, G. et Mantriota, G. (2009b). Fluid leakage in seals : An approach based on percolation theory. *Tribology International*, 42(5):731–737.

Bourniquel, J. (2017). *Propriétés de transfert d'un contact métallique : application à l'étanchéité interne de robinetterie industrielle*. Thèse de doctorat, Université de Bordeaux.

Boussinesq, M. J. (1885). *Application des potentiels à l'étude de l'équilibre et du mouvement des solides élastiques*. Mémoires de la société des sciences de l'agriculture et des arts de Lille. Imprimerie L. Danel (Lille).

Brebbia, C. A. et Chang, O. V. (1979). Boundary elements applied to seepage problems in zoned anisotropic soils. *Advances in Engineering Software*, 1(3):95–105.

Brown, S. R., Stockman, H. W. et Reeves, S. J. (1995). Applicability of the reynolds equation for modeling fluid flow between rough surfaces. *Geophysical Research Letters*, 22(18):2537–2540.

Burgdorfer, A. (1959). The influence of the molecular mean free path on the performance of hydrodynamic gas lubricated bearings. *Journal of Basic Engineering*, 81:94–100.

Cai, C., Sun, Q. et Boyd, I. D. (2007). Gas flows in microchannels and microtubes. *Journal of Fluid Mechanics*, 589:305–314.

Candela, T., Renard, F., Bouchon, M., Brouste, A., Marsan, D., Schmittbuhl, J. et Voisin, C. (2009). Characterization of fault roughness at various scales : Implications of three-dimensional high resolution topography measurements. *Pure and Applied Geophysics*, 166(10):1817–1851.

Cercignani, C. (1988). *The Boltzmann Equation and its Applications*. Springer.

Cercignani, C. et Pagani, C. D. (1966). Variational approach to boundary-value problems in kinetic theory. *The Physics of Fluids*, 9(6):1167–1173.

Chang, W. R., Etsion, I. et Bogy, D. B. (1987). An elastic-plastic model for the contact of rough surfaces. *Journal of Tribology*, 109(2):257–263.

Christensen, H. (1970). Stochastic models for hydrodynamic lubrication of rough surfaces. *In Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, volume 184, pages 1013–1026.

Ciavarella, M., Greenwood, J. A. et Paggi, M. (2008). Inclusion of "interaction" in the greenwood and williamson contact theory. *Wear*, 265(5-6):729–734.

Colin, S. (2005). Rarefaction and compressibility effects on steady or transient gas flows in microchannels. *Microfluidics and Nanofluidics*, 1(3):268–279.

Dapp, W. B. et Müser, M. H. (2015). Contact mechanics of and reynolds flow through saddle points : On the coalescence of contact patches and the leakage rate through near-critical constrictions. *EPL (Europhysics Letters)*, 109(4):44001.

Dapp, W. B. et Müser, M. H. (2016). Fluid leakage near the percolation threshold. *Scientific Reports*, 6:19513.

Darcy, H. (1856). *Les fontaines publiques de la ville de Dijon : Exposition et application des principes à suivre et des formules à employer dans les questions de distribution d'eau*. Victor Dalmont.

Dongari, N., Agrawal, A. et Agrawal, A. (2007). Analytical solution of gaseous slip flow in long microchannels. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50(17-18):3411–3421.

Durand, J. (2012). *Approche multi-échelles des problèmes de contact et d'étanchéité*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris.

Durlofsky, L. J. (1991). Numerical calculation of equivalent grid block permeability tensors for heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 27(5):699–708.

Ewart, T., Perrier, P., Graur, I. et Méolans, J. G. (2007). Tangential momemtum accommodation in microtube. *Microfluidics and Nanofluidics*, 3(6):689–695.

Florence, F. A., Rushing, J. A., Newsham, K. E. et Blasingame, T. A. (2007). Improved permeability prediction relations for low permeability sands. *In Rocky Mountain Oil & Gas Technology Symposium*. Society of Petroleum Engineers.

Fluckiger, F. (2005). *Étude statistique de la conductance d'un joint d'étanchéité statique*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse.

Fukui, S. et Kaneko, R. (1988). Analysis of ultra-thin gas film lubrication based on linearized boltzmann equation : First report - derivation of a generalized lubrication equation including thermal creep flow. *Journal of Tribology*, 110(2):253–261.

Gad-el Hak, M. (2006). *MEMS : Introduction and Fundamentals*. Mechanical and Aerospace Engineering Series. Taylor & Francis.

Gao, X.-L. (2003). Elasto-plastic analysis of an internally pressurized thick-walled cylinder using a strain gradient plasticity theory. *International Journal of Solids and Structures*, 40(23):6445–6455.

Gao, X.-L., Jing, X. N. et Subhash, G. (2006). Two new expanding cavity models for indentation deformations of elastic strain-hardening materials. *International Journal of Solids and Structures*, 43(7):2193–2208.

Garcia, N. et Stoll, E. (1984). Monte carlo calculation for electromagnetic-wave scattering from random rough surfaces. *Physical Review Letters*, 52(20):1798–1801.

Geoffroy, S. et Prat, M. (2004). On the leak through a spiral-groove metallic static ring gasket. *Journal of Fluids Engineering*, 126:48–54.

Ghani Razaqpur, A. et Shah, K. R. (1991). Exact analysis of beams on two-parameter elastic foundations. *International Journal of Solids and Structures*, 27(4):435–454.

Graur, I., Veltzke, T., Méolans, J. G., Ho, M. T. et Thöming, J. (2015). The gas flow diode effect : theoretical and experimental analysis of moderately rarefied gas flows through a microchannel with varying cross section. *Microfluidics and Nanofluidics*, 18(3):391–402.

Graur, I. A., Perrier, P., Ghozlani, W. et Méolans, J. G. (2009). Measurements of tangential momentum accommodation coefficient for various gases in plane microchannel. *Physics of Fluids*, 21(10):102004.

Gray, W. G. (1975). A derivation of the equations for multi-phase transport. *Chemical Engineering Science*, 30(2):229–233.

Greenwood, J. A. et Williamson, J. B. P. (1966). Contact of nominally flat surfaces. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 295(1442):300–319.

Hadj Nacer, M. (2012). *Tangential momentum accommodation coefficient in microchannels with different surface materials (measurements and simulations)*. Thèse de doctorat, Université d'Aix-Marseille.

Hadjiconstantinou, N. G. (2003). Comment on cercignani's second-order slip coefficient. *Physics of Fluids*, 15(8):2352–2354.

Hamrock, B. J., Schmid, S. R. et Jacobson, B. O. (2004). *Fundamentals of Fluid Film Lubrication*. Mechanical Engineering. CRC Press.

Hertz, H. (1882). Über die berührung fester elastischer körper. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 92:156–171.

Hoshen, J. et Kopelman, R. (1976). Percolation and cluster distribution. i. cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. *Physical Review B*, 14(8):3438–3445.

Howes, F. A. et Whitaker, S. (1985). The spatial averaging theorem revisited. *Chemical Engineering Science*, 40(8):1387–1392.

Hsia, Y. T. et Domoto, G. A. (1983). An experimental investigation of molecular rarefaction effects in gas lubricated bearings at ultra-low clearances. *Journal of Lubrication Technology*, 105(1):120–129.

Huyakorn, P. S. et Pinder, G. F. (1983). *Computational Methods in Subsurface Flow*. Academic Press.

Hwang, C.-C., Fung, R.-F., Yang, R.-F., Weng, C.-I. et Li, W.-L. (1996). A new modified reynolds equation for ultrathin film gas lubrication. *IEEE Transactions on Magnetics*, 32(2):344–347.

Jacq, C., Nélias, D., Lormand, G. et Girodin, D. (2002). Development of a three-dimensional semi-analytical elastic-plastic contact code. *Journal of Tribology*, 124(4): 653–667.

Jannot, Y. et Lasseux, D. (2012). A new quasi-steady method to measure gas permeability of weakly permeable porous media. *Review of Scientific Instruments*, 83(1):015113.

Johnson, K. L. (1987). *Contact Mechanics*. Cambridge University Press.

Jones, R. et Xenophontos, J. (1977). The vlasov foundation model. *International Journal of Mechanical Sciences*, 19(6):317–323.

Karniadakis, G. E., Beskok, A. et Aluru, N. (2005). *Microflows and Nanoflows : Fundamentals and Simulation*, volume 29 de *Interdisciplinary Applied Mathematics*. Springer.

Kirkpatrick, S. (1973). Percolation and conduction. *Reviews of Modern Physics*, 45:574–588.

Klinkenberg, L. J. (1941). The permeability of porous media to liquids and gases. *In Drilling and Production Practice*, pages 200–213. American Petroleum Institute.

Knudsen, M. (1909). Die gesetze der molekularströmung und der inneren reibungsströmung der gase durch röhren. *Annalen der Physik*, 333(1):75–130.

Koplik, J. (1981). On the effective medium theory of random linear networks. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 14(32):4821.

Lafe, O. E., Liggett, J. A. et Liu, P. L.-F. (1981). Biem solutions to combinations of leaky, layered, confined, unconfined, nonisotropic aquifers. *Water Resources Research*, 17(5):1431–1444.

Landau, L. D. et Lifshitz, E. M. (1989). *Fluid Mechanics*, volume 6 de *Course of theoretical physics*. Pergamon Press.

Lasseux, D. et Valdes Parada, F. J. (2017). Symmetry properties of macroscopic transport coefficients in porous media. *Physics of Fluids*, 29(4).

Lasseux, D., Valdes Parada, F. J., Ochoa Tapia, J. A. et Goyeau, B. (2014). A macroscopic model for slightly compressible gas slip-flow in homogeneous porous media. *Physics of Fluids*, 26(5).

Lasseux, D., Valdes Parada, F. J. et Porter, M. L. (2016). An improved macroscale model for gas slip flow in porous media. *Journal of Fluid Mechanics*, 805:118–146.

Lauga, E., Brenner, M. P. et Stone, H. A. (2007). *Springer Handbook of Experimental Fluid Mechanics*, chapitre Microfluidics : The No-Slip Boundary Condition, pages 1219–1240. Springer.

Ledoux, Y., Lasseux, D., Favreliere, H., Samper, S. et Grandjean, J. (2011). On the dependence of static flat seal efficiency to surface defects. *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, 88(11–12):518–529.

Lefrançois, M. (2004). Metal-to-metal seals : The innovative route in static sealing. *Sealing Technology*, 2004(4):10–13.

Letalleur, N., Plouraboué, F. et Prat, M. (2002). Average flow model of rough surface lubrication : Flow factors for sinusoidal surfaces. *Journal of Tribology*, 124(3): 539–546.

Loeb, L. B. (2004). *The Kinetic Theory of Gases*. Dover Phoenix Editions. Dover Publications.

Lorenz, B. et Persson, B. N. J. (2009). Leak rate of seals : Comparison of theory with experiment. *EPL (Europhysics Letters)*, 86(4):44006.

Love, A. E. H. (1929). The stress produced in a semi-infinite solid by pressure on part of the boundary. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 228(659-669):377–420.

Marie, C. (2002). *Fuite monophasique au travers d'un contact rugueux : contribution à l'étude de l'étanchéité statique*. Thèse de doctorat, Université de Bordeaux I.

Marie, C. et Lasseux, D. (2007). Experimental leak-rate measurement through a static metal seal. *Journal of Fluids Engineering*, 129(6):799–805.

Marie, C., Lasseux, D., Zahouani, H. et Sainsot, P. (2003). An integrated approach to characterize liquid leakage through metal contact seal. *European Journal of Mechanical and Environmental Engineering*, 48(2):81–86.

Maurer, J., Tabeling, P., Joseph, P. et Willaime, H. (2003). Second-order slip laws in microchannels for helium and nitrogen. *Physics of Fluids*, 15(9):2613–2621.

Maxwell, J. C. (1879). On stresses in rarified gases arising from inequalities of temperature. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 170:231–256.

Mayeur, C. (1995). *Modélisation du contact rugueux élastoplastique*. Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon.

Megalingam, A. et Mayuram, M. M. (2012). Elastic-plastic contact analysis of single layer solid rough surface model using fem. *International Journal of Mechanical, Aerospace, Industrial, Mechatronic and Manufacturing Engineering*, 6(1):133–137.

Mitsuya, Y. (1993). Modified reynolds equation for ultra-thin film gas lubrication using 1.5-order slip-flow model and considering surface accommodation coefficient. *Journal of Tribology*, 115(2):289–294.

Moukalled, F., Mangani, L. et Darwish, M. (2016). *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics*, volume 113 de *Fluid Mechanics and Its Applications*. Springer.

Mourzenko, V., Thovert, J.-F. et Adler, P. (1995). Permeability of a single fracture : Validity of the reynolds equation. *Journal de Physique II*, 5(3):465–482.

Naillon, A. (2016). *Écoulements liquide-gaz, évaporation, cristallisation dans les milieux micro et nanoporeux. Études À partir de systèmes modèles micro et nanofluidiques.* Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse.

Naillon, A., Massadi, H., Courson, R., Bekhit, J., Seveno, L., Calmon, P. F., Prat, M. et Joseph, P. (2017). Quasi-static drainage in a network of nanoslits of non-uniform depth designed by grayscale laser lithography. *Microfluidics and Nanofluidics*, 21(8):131.

Navier, C. L. M. H. (1823). *Mémoires de l'Académie des sciences de l'Institut de France*, volume 6, chapitre Mémoire sur les lois du mouvement des fluides, pages 389–440. Gauthier-Villars.

Nitta, I. et Matsuzaki, Y. (2010). Experimental study of the performance of static seals based on measurements of real contact area using thin polycarbonate films. *Journal of Tribology*, 132(2):7.

Nitta, I., Matsuzaki, Y., Tsukiyama, Y., Horita, M. et Sakamoto, S. (2013). Thorough observation of real contact area of copper gaskets using a laser microscope with a wide field of view. *Journal of Tribology*, 135(4):7.

Patir, N. (1978). A numerical procedure for random generation of rough surfaces. *Wear*, 47(2):263–277.

Patir, N. et Cheng, H. S. (1978). An average flow model for determining effects of three-dimensional roughness on partial hydrodynamic lubrication. *Journal of Lubrication Technology*, 100(1):12–17.

Pei, L., Hyun, S., Molinari, J. F. et Robbins, M. O. (2005). Finite element modeling of elasto-plastic contact between rough surfaces. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53(11):2385–2409.

Persson, B. N. J. (2001a). Elastoplastic contact between randomly rough surfaces. *Physical Review Letters*, 87(11):116101.

Persson, B. N. J. (2001b). Theory of rubber friction and contact mechanics. *The Journal of Chemical Physics*, 115(8):3840–3861.

Persson, B. N. J. (2006). Contact mechanics for randomly rough surfaces. *Surface Science Reports*, 61(4):201–227.

Persson, B. N. J. et Yang, C. (2008). Theory of the leak-rate of seals. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 20(31):315011.

Pham, T. T., To, Q. D., Lauriat, G., Léonard, C. et Hoang, V. V. (2012). Effects of surface morphology and anisotropy on the tangential-momentum accommodation coefficient between pt(100) and ar. *Physical Review E*, 86:051201.

Plouraboué, F., Fluckiger, F., Prat, M. et Crispel, P. (2006). Geodesic network method for flows between two rough surfaces in contact. *Physical Review E*, 73:036305.

Plouraboué, F., Geoffroy, S. et Prat, M. (2004). Conductances between confined rough walls. *Physics of Fluids*, 16(3):615–624.

Plouraboué, F., Kurowski, P., Hulin, J.-P., Roux, S. et Schmittbuhl, J. (1995). Aperture of rough cracks. *Physical Review E*, 51:1675–1685.

Polonsky, I. A. et Keer, L. M. (1999). A numerical method for solving rough contact problems based on the multi-level multi-summation and conjugate gradient techniques. *Wear*, 231(2):206–219.

Porodnov, B. T., Suetin, P. E., Borisov, S. F. et Akinshin, V. D. (1974). Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels. *Journal of Fluid Mechanics*, 64(3):417–438.

Prat, M., Plouraboué, F. et Letalleur, N. (2002). Averaged reynolds equation for flows between rough surfaces in sliding motion. *Transport in Porous Media*, 48(3):291–313.

Pérez-Ràfols, F. (2016). *Modelling and Numerical Analysis of Leak Through Metal-to-Metal Seals*. Thèse de doctorat, Luleå University of Technology.

Pérez-Ràfols, F., Larsson, R. et Almqvist, A. (2016a). Modelling of leakage on metal-to-metal seals. *Tribology International*, 94:421–427.

Pérez-Ràfols, F., Larsson, R., Lundström, S., Wall, P. et Almqvist, A. (2016b). A stochastic two-scale model for pressure-driven flow between rough surfaces. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 472(2190).

Quintard, M. et Whitaker, S. (1996). Transport in chemically and mechanically heterogeneous porous media. i : Theoretical development of region-averaged equations for slightly compressible single-phase flow. *Advances in Water Resources*, 19(1):29–47.

Rafiezadeh, K. et Ataie-Ashtiani, B. (2012). Three dimensional flow in anisotropic zoned porous media using boundary element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 36(5):812–824.

Rafiezadeh, K. et Ataie-Ashtiani, B. (2013). Seepage analysis in multi-domain general anisotropic media by three-dimensional boundary elements. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 37(3):527–541.

Saad, Y. (2003). *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. Society for Industrial and Applied Mathematics.

Sahlin, F. (2008). *Lubrication, contact mechanics and leakage between rough surfaces*. Thèse de doctorat, Luleå University of Technology.

Sahoo, P. et Ghosh, N. (2007). Finite element contact analysis of fractal surfaces. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 40(14):4245–4252.

Shen, C. (2005). *Rarefied Gas Dynamics : Fundamentals, Simulations and Micro Flows*. Heat and Mass Transfer. Springer.

Shi, F., Choi, W., Lowe, M. J. S., Skelton, E. A. et Craster, R. V. (2015). The validity of kirchhoff theory for scattering of elastic waves from rough surfaces. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 47(2178):19.

Skjetne, E. et Auriault, J.-L. (1999). Homogenization of wall-slip gas flow through porous media. *Transport in Porous Media*, 36(3):293–306.

Stout, K. J. et Blunt, L. (2000). *Three Dimensional Surface Topography*. Elsevier Science.

Stout, K. J., Davis, E. J. et Sullivan, P. J. (1990). *Atlas of Machined Surfaces*. Springer.

Straughan, W. T. (1990). *Analysis of Plates on Elastic Foundations*. Thèse de doctorat, Texas Tech University.

Sun, Y. H., Chan, W. K. et Liu, N. Y. (2003). A slip model for gas lubrication based on an effective viscosity concept. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part J : Journal of Engineering Tribology*, 217(3):187–195.

Szeri, A. Z. (1998). *Fluid Film Lubrication*. Cambridge University Press.

Teodoru, I.-B. et Muşat, V. (2010). The modified vlasov foundation model : An attractive approach for beams resting on elastic supports. *The Electronic Journal of Geotechnical Engineering*, 15:13.

Tian, X. et Bhushan, B. (1996). A numerical three-dimensional model for the contact of rough surfaces by variational principle. *Journal of Tribology*, 118(1):33–42.

Tlili, A. (2013). *Mécanismes de l'étanchéité statique des joints métalliques*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Saint-Étienne et École Nationale d'Ingénieurs de Saint-Étienne.

Tripp, J. H. (1983). Surface roughness effects in hydrodynamic lubrication : The flow factor method. *Journal of Lubrication Technology*, 105(3):458–463.

Tsang, Y. W. et Tsang, C. F. (1987). Channel model of flow through fractured media. *Water Resources Research*, 23(3):467–479.

Turhan, A. (1992). *A consistent Vlasov model for analysis of plates on elastic foundations using the finite element method*. Thèse de doctorat, Texas Tech University.

Vallet, C. (2008). *Fuite liquide au travers d'un contact rugueux : application à l'étanchéité interne d'appareils de robinetterie*. Thèse de doctorat, Arts et Métiers ParisTech.

Vallet, C., Lasseux, D., Sainsot, P. et Zahouani, H. (2008). Numerical determination of the sealing performance of a rough surface : real versus systhetic fractal surface. *In ASME 2008 Pressure Vessels and Piping Conference*, volume 2, pages 91–100, Chicago, Illinois, USA.

Vallet, C., Lasseux, D., Sainsot, P. et Zahouani, H. (2009). Real versus synthesized fractal surfaces : Contact mechanics and transport properties. *Tribology International*, 42(2):250–259.

Van Dyke, M. (1975). *Perturbation methods in fluid mechanics*. The Parabolic Press.

Veijola, T. et Turowski, M. (2001). Compact damping models for laterally moving microstructures with gas-rarefaction effects. *Journal of Microelectromechanical Systems*, 10(2):263–273.

Wang, Z., Wang, W., Hu, Y. et Wang, H. (2010a). A numerical elastic–plastic contact model for rough surfaces. *Tribology Transactions*, 53(2):224–238.

Wang, Z., Wang, W., Hu, Y. et Wang, H. (2010b). A simplified numerical elastic-plastic contact model for rough surfaces. *In Advanced Tribology : Proceedings of CIST2008 & ITS-IFToMM2008*, pages 159–166.

Ward, J. C. (1964). Turbulent flow in porous media. *Journal of the Hydraulics Division*, 90(5):1–12.

Whitaker, S. (1999). *The Method of Volume Averaging*, volume 13 de *Theory and Applications of Transport in Porous Media*. Springer.

Xue, H. et Fan, Q. (2000). A new analytic solution of the navier-stokes equations for microchannel flows. *Microscale Thermophysical Engineering*, 4(2):125–143.

Zahouani, H., Mezghani, S., Pailler-mattei, C. et Elmansori, M. (2009). Effect of roughness scale on contact stiffness between solids. *Wear*, 266(5-6):589–591.

Zaouter, T. (2015). Étude des écoulements à l'interface joint–rugosité pour les applications de haute étanchéité. Mémoire de D.E.A., Institut National des Sciences Appliquées de Rennes.

Zaouter, T., Lasseux, D. et Prat, M. (2018). Gas slip flow in a fracture : local reynolds equation and upscaled macroscopic model. *Journal of Fluid Mechanics*, 837:413–442.

Zhang, W.-M., Meng, G. et Wei, X. (2012). A review on slip models for gas microflows. *Microfluidics and Nanofluidics*, 13:845–882.

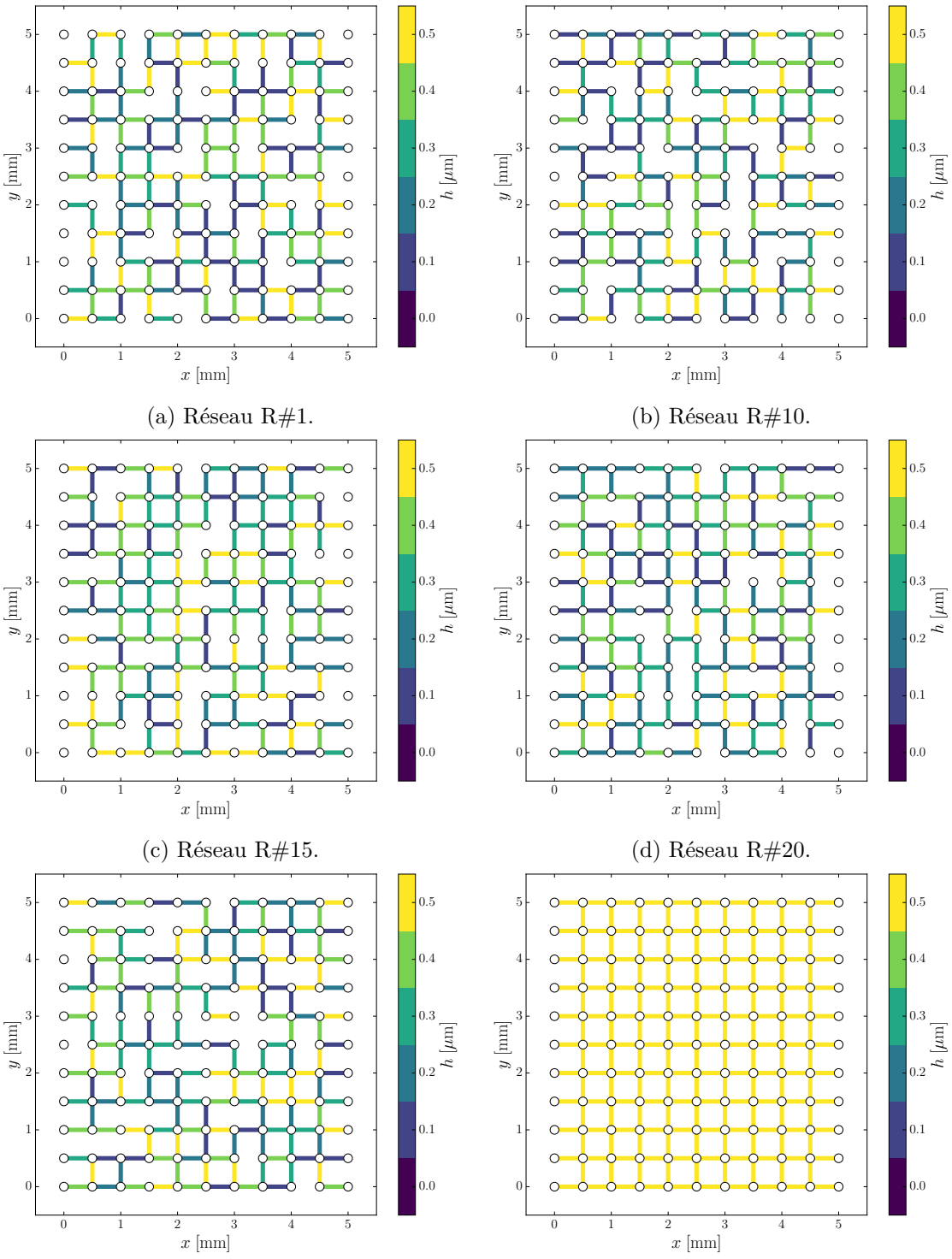
Zimmerman, R. W. et Bodvarsson, G. S. (1996). Hydraulic conductivity of rock fractures. *Transport in Porous Media*, 23(1):1–30.

Annexe A

Compléments sur les réseaux de canaux droits

Quelques compléments d'informations sur les puces de réseaux de canaux droits du chapitre 2 sont apportés dans cette annexe. Les géométries des cinq puces de réseaux hétérogènes sont données sur la figure A.1. On remarque l'arrangement différent des profondeurs gravées des liens selon la réalisation aléatoire ainsi que l'absence de lien entre certains nœuds. On présente également un réseau homogène où chaque lien est de profondeur 500 nm.

La figure A.2 présente les débits massiques traversant les liens des différents réseaux, résultats des simulations par réseau de pores. Les simulations ont été réalisées en considérant un modèle glissant de premier ordre, une pression amont P_i de $2 \cdot 10^5$ Pa et une pression avale P_e de 1 Pa, soit une pression moyenne de $\bar{p} = 10^5$ Pa. On observe alors un comportement variable selon les réseaux. Dans le réseau R#1 par exemple, le flux n'est conduit que par quelques liens en majeure partie. Pour les autres réseaux, le transport se fait de manière plus homogène sur l'ensemble des liens. Pour le réseau homogène R500, on retrouve bien un écoulement globalement unidimensionnel, se faisant dans 11 rangées de canaux en parallèle, les liens transverses ne transportant pas de fluide.



(a) Réseau R#1.

(b) Réseau R#10.

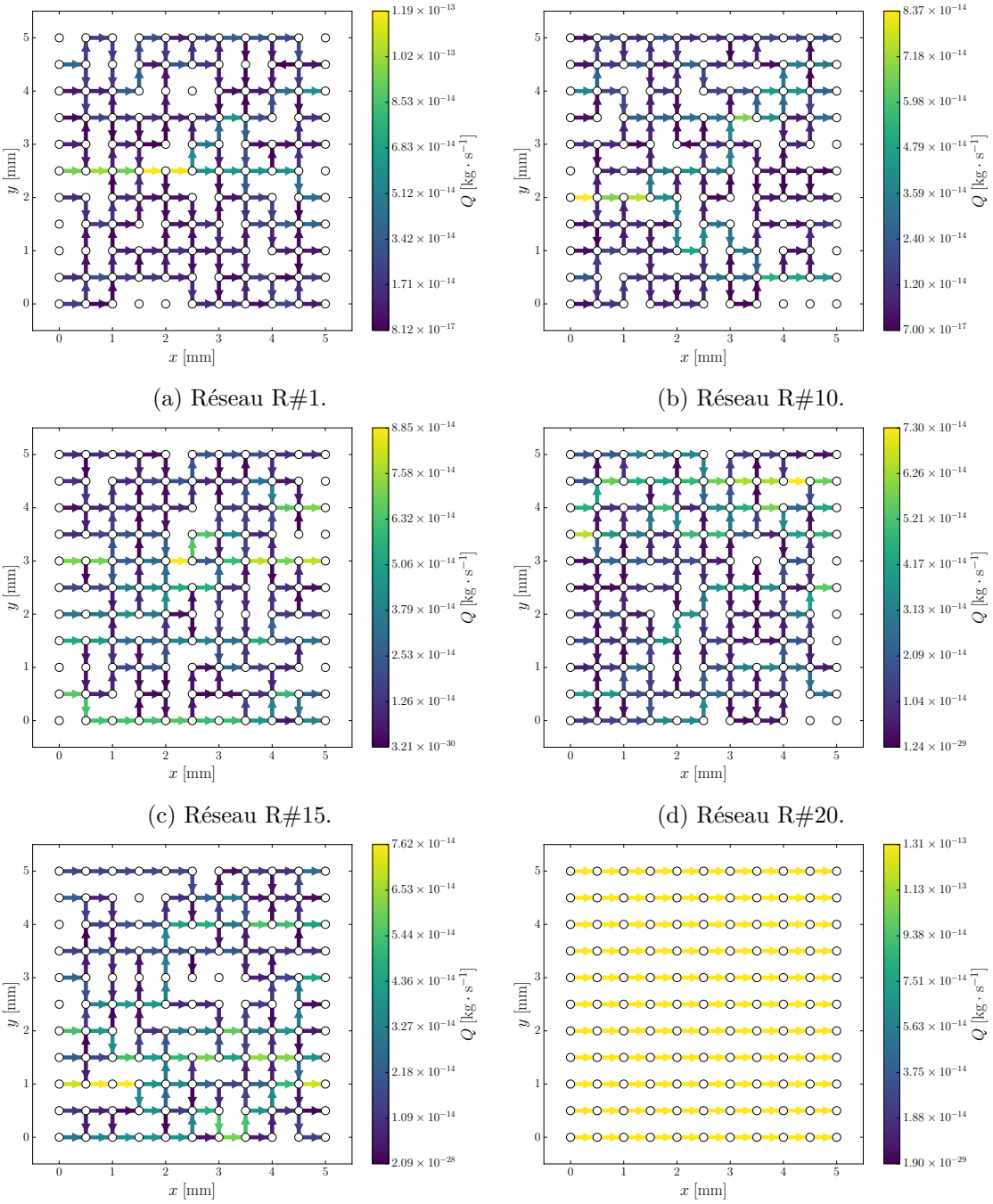
(c) Réseau R#15.

(d) Réseau R#20.

(e) Réseau R#25.

(f) Réseau R500.

FIGURE A.1 – Géométrie des réseaux hétérogènes et d'un réseau homogène. La couleur donne la profondeur gravée des liens.



(a) Réseau R#1.

(b) Réseau R#10.

(c) Réseau R#15.

(d) Réseau R#20.

(e) Réseau R#25.

(f) Réseau R500.

FIGURE A.2 – Débit massique dans les liens des réseaux à $\bar{p} = 10^5$ Pa.

Annexe B

Mesures de fuite dans les puces

Les résultats des mesures de fuite sur les puces sont regroupés dans cette annexe. Ils sont donnés sous forme de conductance adimensionnelle, $\underline{C}$, en fonction du nombre de Knudsen moyen sur la puce, $\overline{\mathrm{Kn}}$. Les deux lots de puces, L070 et L107 sont présentés.

On rappelle que la conductance adimensionnelle est obtenue en normalisant le taux de fuite de la façon suivante :

$$\underline{C} = \frac{\mathcal{Q}}{{h_0}^2 \Delta p} \sqrt{\frac{2M}{RT}} \frac{L_x}{L_y} \tag{B.1}$$

où h_0 est choisie comme l'ouverture intrinsèque caractéristique de la puce (tableau B.1), à partir de la transmissivité intrinsèque obtenue par simulation sur la géométrie idéale des puces (sans considérer les formes réelles des sections de types paraboles, etc.).

On mentionne également la définition du nombre de Knudsen moyen sur la puce :

$$\overline{\mathrm{Kn}} = \frac{\mu}{\bar{p} h_0} \sqrt{\frac{\pi RT}{2M}} \tag{B.2}$$

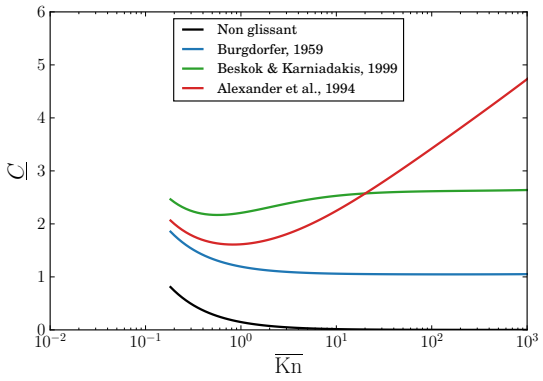
Dans les figures qui suivent, les courbes en traits pleins représentent les résultats obtenus par simulation numérique :

— En noir, le modèle sans glissement.
— En bleu, le modèle glissant de premier ordre de Burgdorfer (1959).
— En vert, le modèle phénoménologique de Beskok et Karniadakis (1999).
— En rouge, le modèle phénoménologique de Alexander *et al.* (1994).

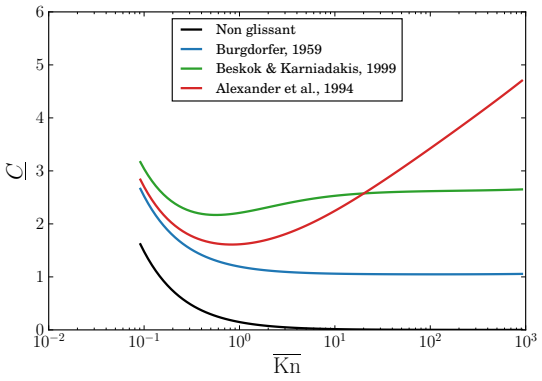
Pour les canaux droits d'ouverture uniforme, il s'agit directement des lois (2.44) à (2.47) pour dix canaux en parallèle. Pour les réseaux, il s'agit de l'implémentation de ces lois dans le modèle de réseau de pores. Les points gris représentent les mesures expérimentales.

Puce	L_x [mm]	L_y [mm]	h_0 [nm]
R100	5	5	28,02
R200	5	5	56,04
R300	5	5	84,06
R400	5	5	112,08
R500	5	5	140,10
R#1	5	5	63,57
R#10	5	5	56,25
R#15	5	5	69,58
R#20	5	5	64,47
R#25	5	5	66,85

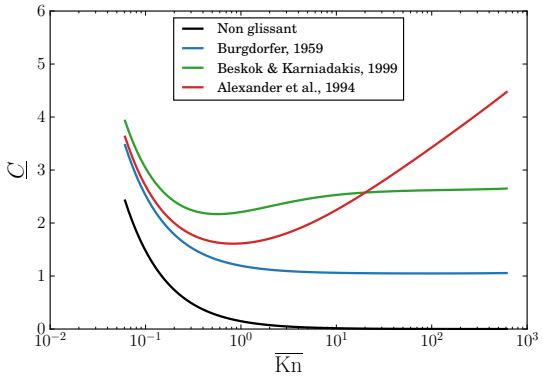
Tableau B.1 – Propriétés des différentes puces.



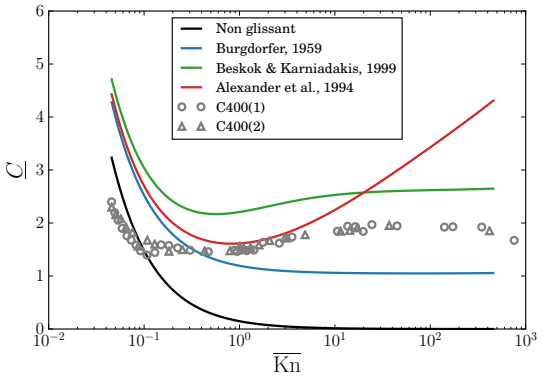
(a) C100 sur L070.



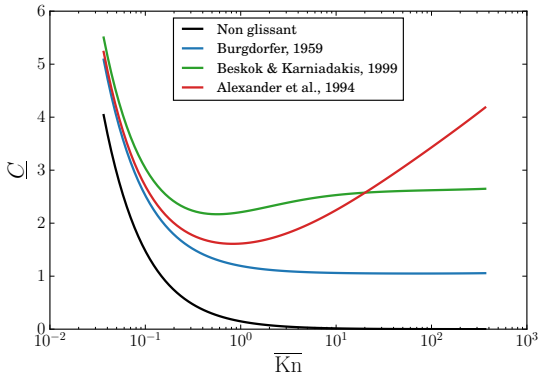
(b) C200 sur L070.



(c) C300 sur L070.

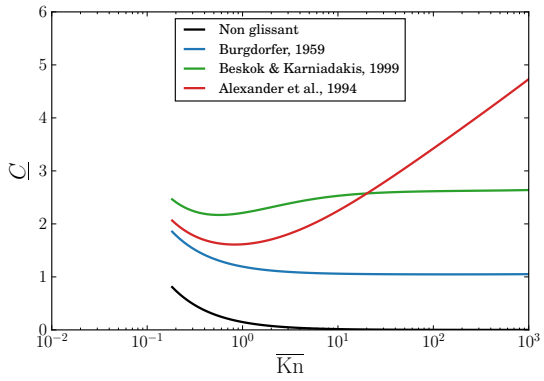


(d) C400 sur L070.

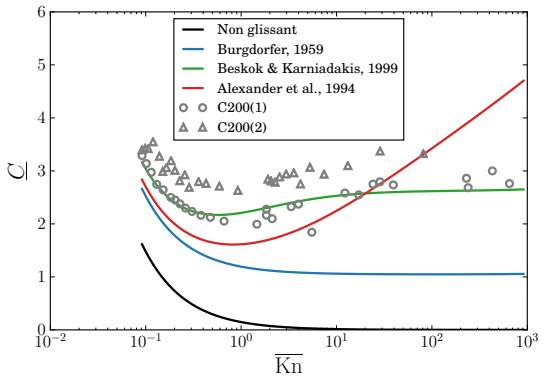


(e) C500 sur L070.

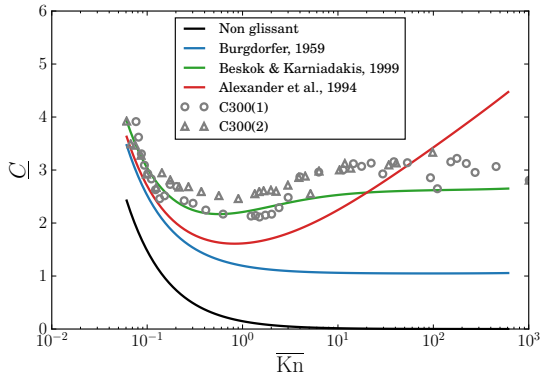
FIGURE B.1 – Canaux droits d'ouverture uniforme du *wafer* L070.



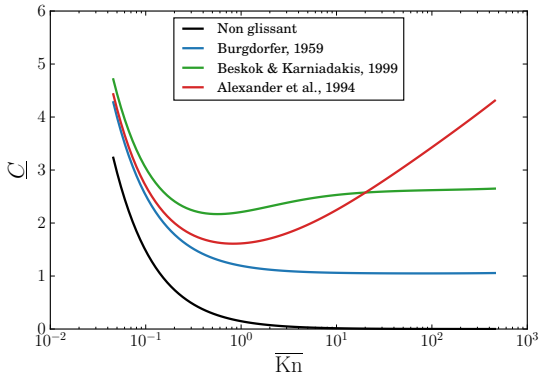
(a) C100 sur L107.



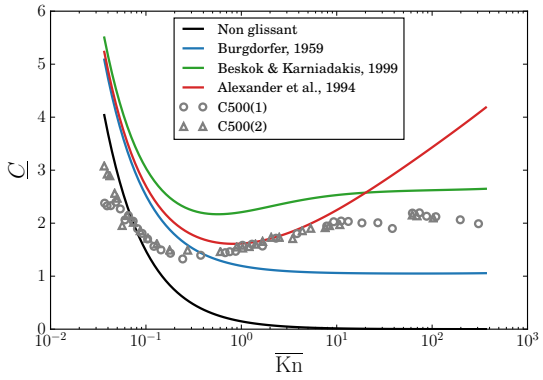
(b) C200 sur L107.



(c) C300 sur L107.

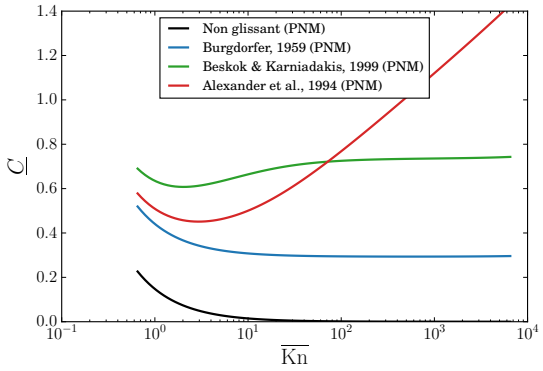


(d) C400 sur L107.

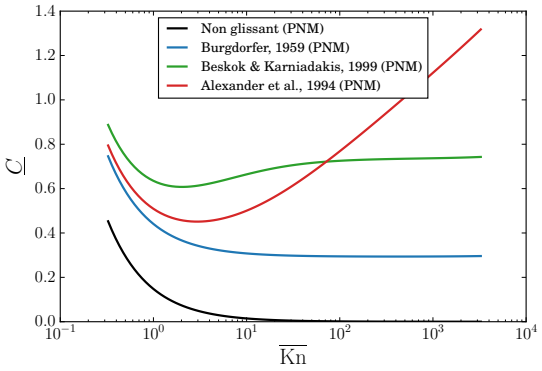


(e) C500 sur L107.

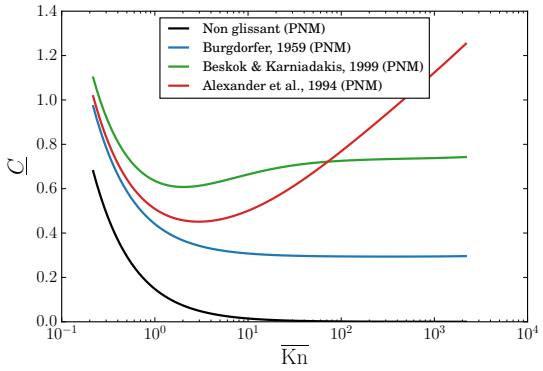
FIGURE B.2 – Canaux droits d'ouverture uniforme du *wafer* L107.



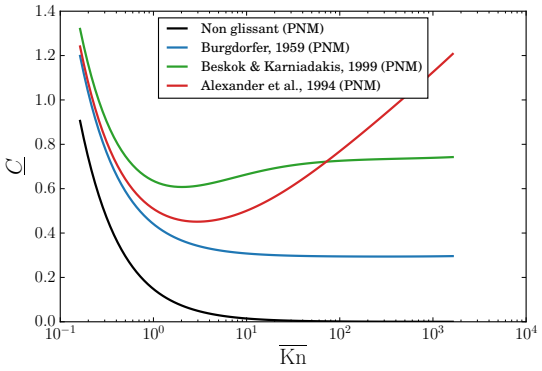
(a) R100 sur L070.



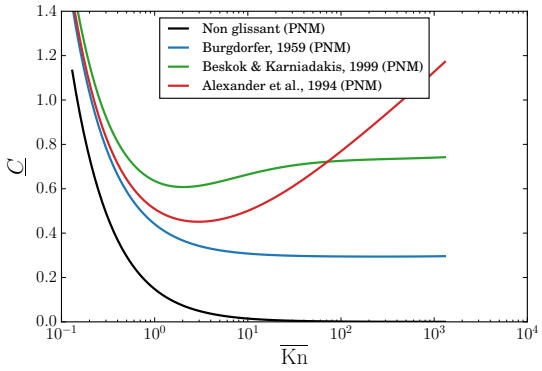
(b) R200 sur L070.



(c) R300 sur L070.

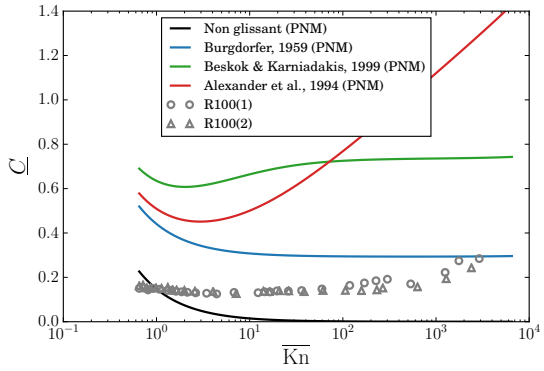


(d) R400 sur L070.

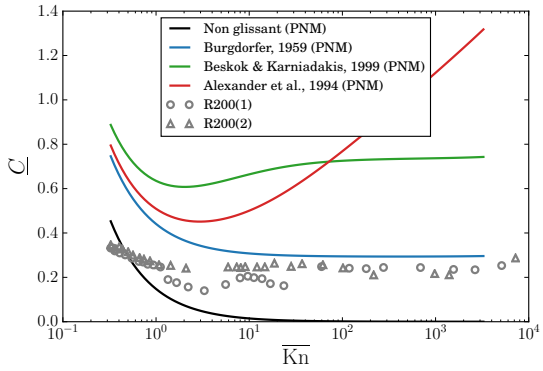


(e) R500 sur L070.

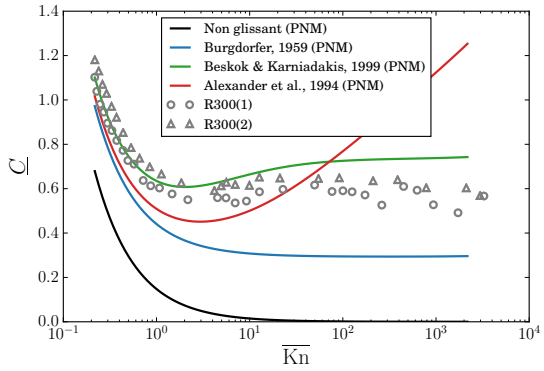
FIGURE B.3 – Réseaux homogènes du *wafer* L070.



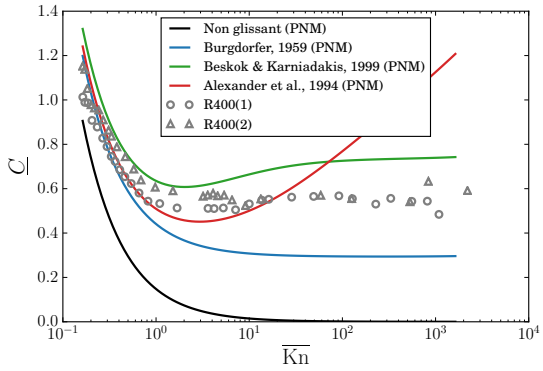
(a) R100 sur L107.



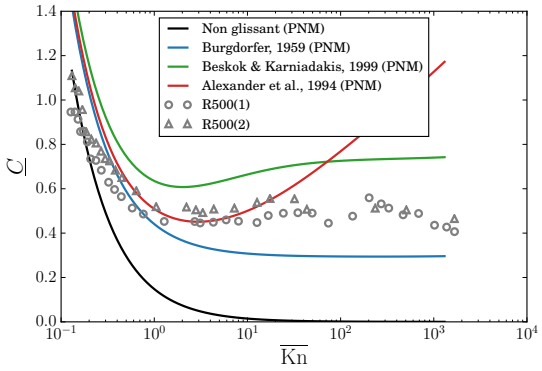
(b) R200 sur L107.



(c) R300 sur L107.

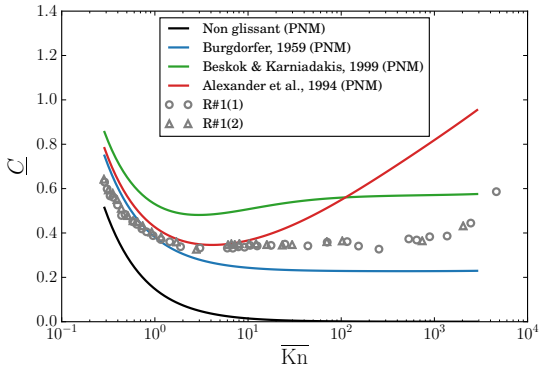


(d) R400 sur L107.

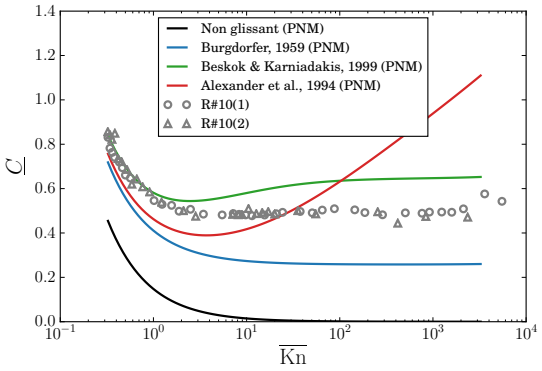


(e) R500 sur L107.

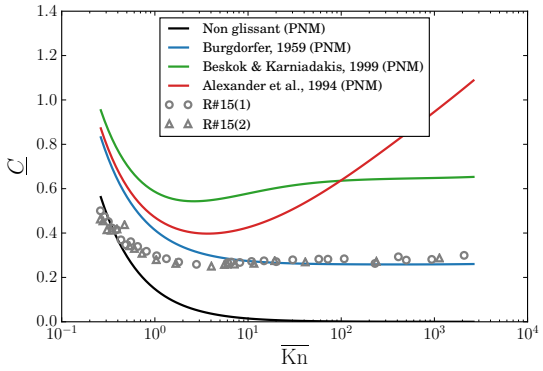
FIGURE B.4 – Réseaux homogènes du *wafer* L107.



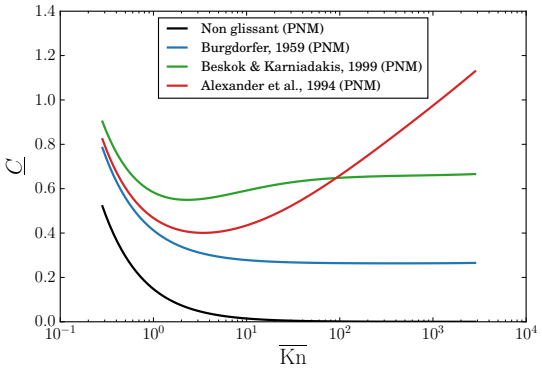
(a) R#1 sur L070.



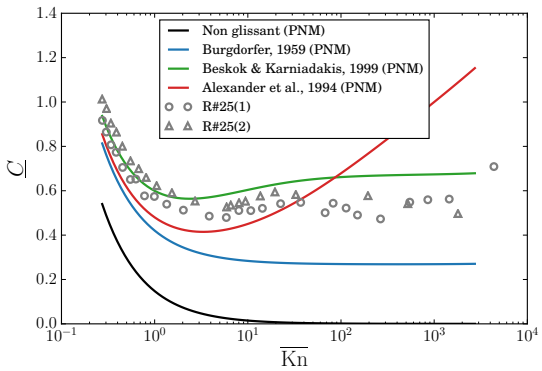
(b) R#10 sur L070.



(c) R#15 sur L070.

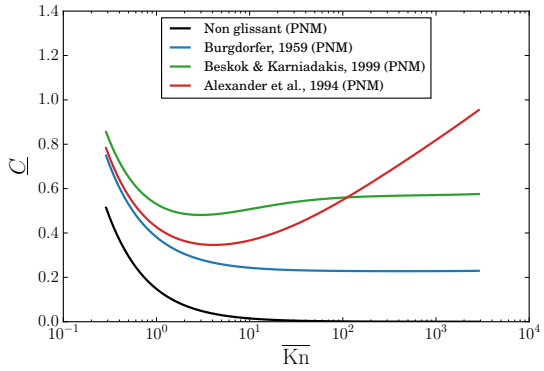


(d) R#20 sur L070.

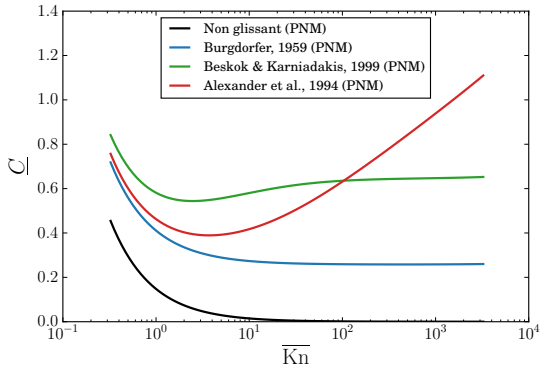


(e) R#25 sur L070.

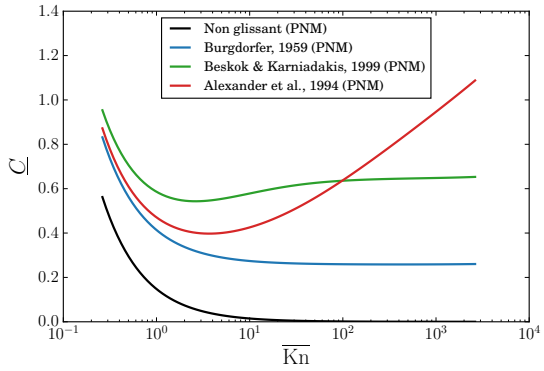
FIGURE B.5 – Réseaux hétérogènes du *wafer* L070.



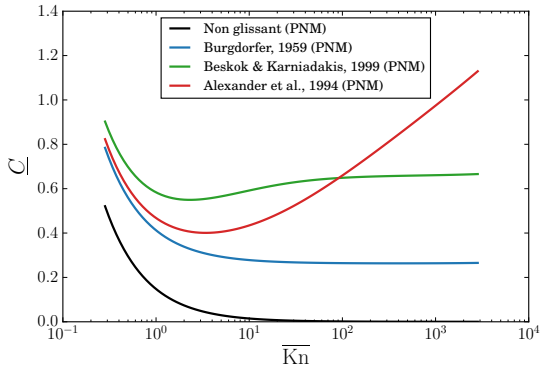
(a) R#1 sur L107.



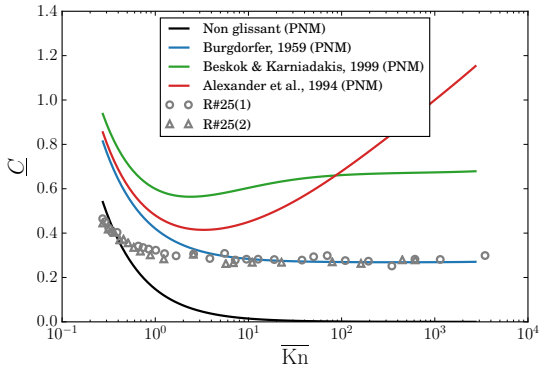
(b) R#10 sur L107.



(c) R#15 sur L107.



(d) R#20 sur L107.



(e) R#25 sur L107.

FIGURE B.6 – Réseaux hétérogènes du *wafer* L107.

Annexe C

Discrétisation en volumes finis

Cette annexe présente le schéma de discrétisation en volumes finis des problèmes de fermeture de la section 3.2, permettant de déterminer les différents tenseurs macroscopiques $\boldsymbol{K}$ et $\boldsymbol{K_p}$ ($p = 0, 1, 2, \ldots$).

C.1 Formulation pour le problème de fermeture complet

On s'intéresse à la discrétisation du problème de fermeture complet (C.1) par la méthode des volumes finis (Moukalled *et al.*, 2016). On rappelle que k est la transmissivité locale de la fracture.

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot (k \{\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla b}\}) = 0 \qquad \text{dans } \mathcal{S}_\beta \qquad \text{(C.1a)}$$
$$\boldsymbol{n_{\sigma\beta}} \cdot (\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla b}) = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \qquad \text{(C.1b)}$$
$$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\Pi_i}) = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) \qquad i = x, y \qquad \text{(C.1c)}$$

C.1.1 Discrétisation en volumes finis du problème

Le problème de fermeture complet (C.1) est établi pour une fracture dont l'ouverture varie continument dans l'espace. Si l'on considère une ouverture qui au contraire est connue de manière discrète en un certain nombre de points et qui, de plus, est considérée uniforme par morceaux (c'est-à-dire k uniforme sur chaque cellule du maillage), le problème de fermeture doit être formulé lui aussi de manière discrète. On doit de ce fait assurer la continuité de la pression p et du flux $\boldsymbol{n} \cdot k\boldsymbol{\nabla} p$ à la frontière entre deux cellules. Dans ce cas, le problème à résoudre peut s'écrire pour chaque cellule :

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot (k_{i,j} \{\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla b}\}) = 0 \qquad \text{dans } \Omega_{i,j} \qquad \text{(C.2a)}$$
$$[\boldsymbol{b}] = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{i,j} \qquad \text{(C.2b)}$$
$$[\boldsymbol{n} \cdot k \{\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla b}\}] = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{i,j} \qquad \text{(C.2c)}$$
$$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\Pi_i}) = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) \qquad i = x, y \qquad \text{(C.2d)}$$

Dans les équations (C.2), $\Omega_{i,j}$ désigne le domaine de la cellule d'indices (i, j) et $\mathcal{C}_{i,j}$ sa frontière, $\boldsymbol{n}$ est le vecteur normal unitaire à la frontière entre deux cellules adjacentes et $[\psi]$ désigne le « saut » de la grandeur ψ entre deux cellules (c'est-à-dire, entre deux cellules d'indices (i, j) et $(i, j + 1)$ par exemple, $[\psi] = \psi_{i,j} - \psi_{i,j+1}$). On se convaincra que l'équation (C.2b) établit la continuité de la pression pour le problème de fermeture tandis que l'équation (C.2c) donne la continuité du flux pour le problème de fermeture. Dans cette formulation du problème, on ne tient pas compte des zones de contact dans la fracture ce qui ne modifie en rien le raisonnement comme montré plus loin dans ce chapitre. Comme $k_{i,j}$ est uniforme sur chaque cellule, le problème (C.2) peut se réécrire de manière équivalente :

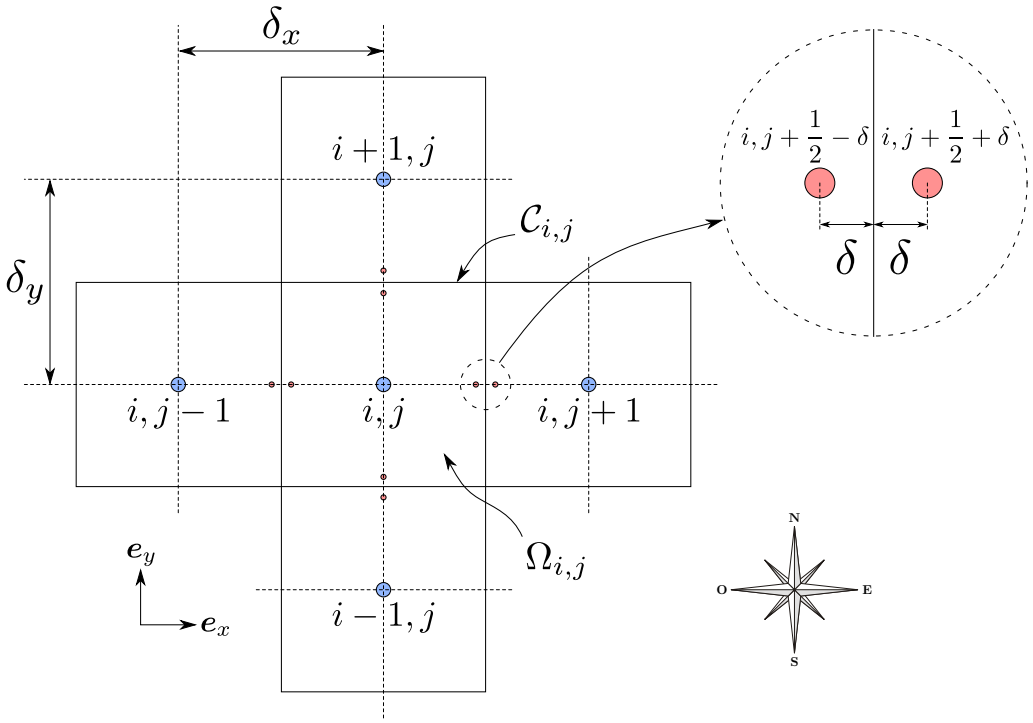


FIGURE C.1 – Schéma du maillage cartésien régulier de l'ouverture de la fracture. La cellule de contrôle centrale (i,j) est entourée de quatre voisines aux points cardinaux, avec lesquelles elle partage une frontière commune (traits pleins). Les flux aux travers de chaque face sont définis en un point central de cette face.

$$\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{b} = 0 \qquad \text{dans } \Omega_{i,j} \tag{C.3a}$$
$$[\boldsymbol{b}] = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{i,j} \tag{C.3b}$$
$$[\boldsymbol{n}\cdot k\,\{\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{b}\}] = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{i,j} \tag{C.3c}$$
$$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\Pi}_{\boldsymbol{i}}) = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) \qquad i = x,y \tag{C.3d}$$

Ce résultat peut se démontrer de la façon suivante en raisonnant selon la composante x de $\boldsymbol{b}$ (notée b dans ce qui suit par souci de clarté) sur la cellule (i,j) par exemple. On commence par intégrer l'équation (C.2a), en utilisant également le théorème de la divergence :

$$\int_{\Omega_{i,j}} \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(k_{i,j}\,\{\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{b}\}\right)\mathrm{d}\Omega = \oint_{\mathcal{C}_{i,j}} \boldsymbol{n}\cdot k_{i,j}\,(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{b})\,\mathrm{d}l = 0 \tag{C.4}$$

Comme présenté en figure C.1, on introduit des points proches de chaque frontière de cellule et distants de celle-ci de δ, dans l'optique de faire tendre δ vers 0 pour obtenir la valeur de chaque grandeur recherchée au niveau des frontières. De cette façon, l'équation (C.4) se réécrit comme :

$$\begin{aligned}\lim_{\delta\to 0} k_{i,j}\delta_y\left(1+\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}\right) - k_{i,j}\delta_y\left(1+\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}\right) + \\ k_{i,j}\delta_x\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} - k_{i,j}\delta_x\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = 0\end{aligned} \tag{C.5}$$

Soit encore de la manière suivante, qui est un laplacien discret :

$$\lim_{\delta\to 0}\delta_y\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} - \delta_y\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} + \delta_x\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} - \delta_x\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = 0 \tag{C.6}$$

Le même résultat serait obtenu en partant de l'équation (C.3a). Les problèmes (C.2) et (C.3) sont donc équivalents. De manière similaire, on aurait un résultat identique selon la composante y de $\boldsymbol{b}$. Cela montre également que les problèmes pour les composantes b_x ou b_y de $\boldsymbol{b}$ sont complètement séparés. Pour aboutir à la formulation discrétisée du problème (C.3), on commence par écrire les développements de Taylor sur les variables $\boldsymbol{b}$. De même que précédemment, on donne le développement pour la composante x de $\boldsymbol{b}$ que l'on note b dans ce qui suit :

$$b_{i,j} = b_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} - \frac{\delta_x}{2}\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} + \mathcal{O}\left({\delta_x}^2\right) \tag{C.7a}$$

$$b_{i,j+1} = b_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} + \frac{\delta_x}{2}\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} + \mathcal{O}\left({\delta_x}^2\right) \tag{C.7b}$$

$$b_{i,j} = b_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} + \frac{\delta_x}{2}\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} + \mathcal{O}\left({\delta_x}^2\right) \tag{C.7c}$$

$$b_{i,j-1} = b_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} - \frac{\delta_x}{2}\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} + \mathcal{O}\left({\delta_x}^2\right) \tag{C.7d}$$

$$b_{i,j} = b_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} - \frac{\delta_y}{2}\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} + \mathcal{O}\left({\delta_y}^2\right) \tag{C.7e}$$

$$b_{i+1,j} = b_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} + \frac{\delta_y}{2}\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} + \mathcal{O}\left({\delta_y}^2\right) \tag{C.7f}$$

$$b_{i,j} = b_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} + \frac{\delta_y}{2}\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} + \mathcal{O}\left({\delta_y}^2\right) \tag{C.7g}$$

$$b_{i-1,j} = b_{i-\frac{1}{2}-\delta,j} - \frac{\delta_y}{2}\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j} + \mathcal{O}\left({\delta_y}^2\right) \tag{C.7h}$$

En utilisant le fait que les sauts de b soient nuls aux frontières d'après l'équation (C.3b) et en soustrayant deux à deux les équations (C.7), on obtient :

$$b_{i,j+1} - b_{i,j} = \frac{\delta_x}{2}\left(\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} + \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}\right) + \mathcal{O}\left({\delta_x}^2\right) \tag{C.8a}$$

$$b_{i,j-1} - b_{i,j} = -\frac{\delta_x}{2}\left(\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} + \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta}\right) + \mathcal{O}\left({\delta_x}^2\right) \tag{C.8b}$$

$$b_{i+1,j} - b_{i,j} = \frac{\delta_y}{2}\left(\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} + \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j}\right) + \mathcal{O}\left({\delta_y}^2\right) \tag{C.8c}$$

$$b_{i-1,j} - b_{i,j} = -\frac{\delta_y}{2}\left(\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} + \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j}\right) + \mathcal{O}\left({\delta_y}^2\right) \tag{C.8d}$$

D'autre part, le saut de flux entre chaque cellule (C.3c) implique les relations suivantes :

$$k_{i,j}\left(1 + \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}\right) = k_{i,j+1}\left(1 + \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta}\right) \tag{C.9a}$$

$$k_{i,j}\left(1 + \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}\right) = k_{i,j-1}\left(1 + \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta}\right) \tag{C.9b}$$

$$k_{i,j}\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} = k_{i+1,j}\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} \tag{C.9c}$$

$$k_{i,j}\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = k_{i-1,j}\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j} \tag{C.9d}$$

Comme le montre les équations (C.9), si une cellule voisine de la cellule centrale (i,j) possède une transmissivité k nulle (cellule modélisant une zone de contact dans la fracture), on retrouverait bien la version discrète de la condition de flux nul au niveau d'un contact dans le problème (C.1). Des équations (C.9) on peut exprimer les différentes dérivées partielles de b au niveau des faces, en « dehors » de la cellule (i,j) en réarrangeant les termes :

$$\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} = \frac{k_{i,j}}{k_{i,j+1}}\left(1+\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}\right)-1 \tag{C.10a}$$

$$\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} = \frac{k_{i,j}}{k_{i,j-1}}\left(1+\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}\right)-1 \tag{C.10b}$$

$$\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} = \frac{k_{i,j}}{k_{i+1,j}}\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} \tag{C.10c}$$

$$\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j} = \frac{k_{i,j}}{k_{i-1,j}}\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} \tag{C.10d}$$

En insérant les expressions (C.10) dans les relations (C.8) et en réarrangeant les termes convenablement, on exprime cette fois-ci les différentes dérivées partielles de b sur les faces, à « l'intérieur » de la cellule (i,j) de la manière suivante :

$$\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} = \left\{\frac{2}{\delta_x}\left(b_{i,j+1}-b_{i,j}\right)+\frac{k_{i,j+1}-k_{i,j}}{k_{i,j+1}}\right\}\frac{k_{i,j+1}}{k_{i,j}+k_{i,j+1}}+\mathcal{O}\left(\delta_x\right) \tag{C.11a}$$

$$\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} = \left\{-\frac{2}{\delta_x}\left(b_{i,j-1}-b_{i,j}\right)+\frac{k_{i,j-1}-k_{i,j}}{k_{i,j-1}}\right\}\frac{k_{i,j-1}}{k_{i,j}+k_{i,j-1}}+\mathcal{O}\left(\delta_x\right) \tag{C.11b}$$

$$\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} = \frac{2}{\delta_y}\left(b_{i+1,j}-b_{i,j}\right)\frac{k_{i+1,j}}{k_{i,j}+k_{i+1,j}}+\mathcal{O}\left(\delta_y\right) \tag{C.11c}$$

$$\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = -\frac{2}{\delta_y}\left(b_{i-1,j}-b_{i,j}\right)\frac{k_{i-1,j}}{k_{i,j}+k_{i-1,j}}+\mathcal{O}\left(\delta_y\right) \tag{C.11d}$$

En reportant les relations (C.11) dans l'équation (C.6) et en multipliant par $k_{i,j}$, on obtient :

$$\begin{aligned}2\frac{\delta_y}{\delta_x}\left(b_{i,j+1}-b_{i,j}\right)\frac{k_{i,j}k_{i,j+1}}{k_{i,j}+k_{i,j+1}}+2\frac{\delta_y}{\delta_x}\left(b_{i,j-1}-b_{i,j}\right)\frac{k_{i,j}k_{i,j-1}}{k_{i,j}+k_{i,j-1}}+\\ 2\frac{\delta_x}{\delta_y}\left(b_{i+1,j}-b_{i,j}\right)\frac{k_{i,j}k_{i+1,j}}{k_{i,j}+k_{i+1,j}}+2\frac{\delta_x}{\delta_y}\left(b_{i-1,j}-b_{i,j}\right)\frac{k_{i,j}k_{i-1,j}}{k_{i,j}+k_{i-1,j}}-\\ \delta_y k_{i,j}\frac{k_{i,j}-k_{i,j+1}}{k_{i,j}+k_{i,j+1}}+\delta_y k_{i,j}\frac{k_{i,j}-k_{i,j-1}}{k_{i,j}+k_{i,j-1}}=0\end{aligned} \tag{C.12}$$

La relation (C.12) est fondamentale car elle fournit les coefficients des termes b inconnus ainsi que le terme source au niveau de chaque cellule, permettant alors de former le système linéaire associé au problème de fermeture discrétisé (C.3). Un raisonnement analogue pour la composante y de $\boldsymbol{b}$ permettrait de montrer que seul le terme source est différent par rapport à la composante en x, les coefficients des termes b restant inchangés. Pour résumer, on a :

Terme au centre ($b_{i,j}$)

$$2\frac{\delta_y}{\delta_x}\left(\frac{k_{i,j}k_{i,j+1}}{k_{i,j}+k_{i,j+1}}+\frac{k_{i,j}k_{i,j-1}}{k_{i,j}+k_{i,j-1}}\right)+2\frac{\delta_x}{\delta_y}\left(\frac{k_{i,j}k_{i+1,j}}{k_{i,j}+k_{i+1,j}}+\frac{k_{i,j}k_{i-1,j}}{k_{i,j}+k_{i-1,j}}\right) \tag{C.13}$$

Terme à l'est $(b_{i,j+1})$

$$-2\frac{\delta_y}{\delta_x}\frac{k_{i,j}k_{i,j+1}}{k_{i,j}+k_{i,j+1}} \tag{C.14}$$

Terme à l'ouest $(b_{i,j-1})$

$$-2\frac{\delta_y}{\delta_x}\frac{k_{i,j}k_{i,j-1}}{k_{i,j}+k_{i,j-1}} \tag{C.15}$$

Terme au nord $(b_{i+1,j})$

$$-2\frac{\delta_x}{\delta_y}\frac{k_{i,j}k_{i+1,j}}{k_{i,j}+k_{i+1,j}} \tag{C.16}$$

Terme au sud $(b_{i-1,j})$

$$-2\frac{\delta_x}{\delta_y}\frac{k_{i,j}k_{i-1,j}}{k_{i,j}+k_{i-1,j}} \tag{C.17}$$

Terme source selon x

$$-\delta_y k_{i,j}\left(\frac{k_{i,j}-k_{i,j+1}}{k_{i,j}+k_{i,j+1}}-\frac{k_{i,j}-k_{i,j-1}}{k_{i,j}+k_{i,j-1}}\right) \tag{C.18}$$

Terme source selon y

$$-\delta_x k_{i,j}\left(\frac{k_{i,j}-k_{i+1,j}}{k_{i,j}+k_{i+1,j}}-\frac{k_{i,j}-k_{i-1,j}}{k_{i,j}+k_{i-1,j}}\right) \tag{C.19}$$

On a alors deux systèmes linéaires indépendants à résoudre pour déterminer $\boldsymbol{b}$, solution du problème de fermeture (C.3). Ces sytèmes sont les suivants, écrits sous forme matricielle par exemple :

$$\begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & \cdots & M_{1m} \\ M_{21} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ M_{m1} & \cdots & \cdots & M_{mm} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} b_{x1} \\ b_{x2} \\ \vdots \\ b_{xm} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} s_{x1} \\ s_{x2} \\ \vdots \\ s_{xm} \end{Bmatrix} \tag{C.20a}$$

$$\begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & \cdots & M_{1m} \\ M_{21} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ M_{m1} & \cdots & \cdots & M_{mm} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} b_{y1} \\ b_{y2} \\ \vdots \\ b_{ym} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} s_{y1} \\ s_{y2} \\ \vdots \\ s_{ym} \end{Bmatrix} \tag{C.20b}$$

Dans les équations (C.20), la matrice carrée $[M]$, de taille m égale au nombre total de cellules du maillage, est formée par les différents coefficients aux points cardinaux de chaque cellule (centre, nord, sud, est et ouest). Cette matrice est identique pour les deux systèmes. Les vecteurs $\{b_x\}$ et $\{b_y\}$ sont les inconnues tandis que les vecteurs $\{s_x\}$ et $\{s_y\}$ sont formés à l'aide des termes sources selon x et y respectivement (équations (C.18) et (C.19)).

C.1.2 Détermination du gradient en milieu hétérogène

Il peut être nécessaire d'avoir à déterminer le gradient d'une certaine quantité dans une cellule, sur un maillage dont les transmissivités locales sont hétérogènes (par exemple, déterminer $\boldsymbol{\nabla b}$ entrant dans la définition du tenseur de transmissivité macroscopique $\boldsymbol{K}$). Pour cela on utilise l'approximation de Green-Gauss qui donne le gradient moyen au

barycentre de la cellule (Moukalled *et al.*, 2016). Pour une quantité quelconque ψ, cela s'écrit dans le cas discret :

$$\boldsymbol{\nabla}\psi|_{i,j} = \frac{1}{S_{i,j}} \sum_{k=1}^{f} \psi_k l_k \boldsymbol{n_k} \tag{C.21}$$

Dans l'équation (C.21), $S_{i,j}$ désigne la surface de la cellule (i,j), f est le nombre de faces de la cellule, ψ_k est la valeur de la quantité ψ à la frontière (face) d'indice k, de longueur l_k et de normale unitaire $\boldsymbol{n_k}$.

Pour notre problème de fermeture, on cherche à exprimer $\boldsymbol{\nabla b}$. En raisonnant encore une fois pour la composante x de $\boldsymbol{b}$ uniquement et en utilisant la relation (C.21), on a :

$$\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j} = \frac{1}{\delta_x \delta_y}\left(\delta_y b_{i,j+\frac{1}{2}} - \delta_y b_{i,j-\frac{1}{2}}\right) \tag{C.22a}$$

$$\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i,j} = \frac{1}{\delta_x \delta_y}\left(\delta_x b_{i+\frac{1}{2},j} - \delta_x b_{i-\frac{1}{2},j}\right) \tag{C.22b}$$

Or, d'après les équations (C.7), on sait que :

$$b_{i,j+\frac{1}{2}} = \lim_{\delta\to 0} b_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} = b_{i,j} + \lim_{\delta\to 0} \frac{\delta_x}{2} \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} \tag{C.23a}$$

$$b_{i,j-\frac{1}{2}} = \lim_{\delta\to 0} b_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} = b_{i,j} - \lim_{\delta\to 0} \frac{\delta_x}{2} \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} \tag{C.23b}$$

$$b_{i+\frac{1}{2},j} = \lim_{\delta\to 0} b_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} = b_{i,j} + \lim_{\delta\to 0} \frac{\delta_y}{2} \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} \tag{C.23c}$$

$$b_{i-\frac{1}{2},j} = \lim_{\delta\to 0} b_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = b_{i,j} - \lim_{\delta\to 0} \frac{\delta_y}{2} \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} \tag{C.23d}$$

En insérant les expressions (C.23) dans (C.22), on obtient :

$$\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j} = \lim_{\delta\to 0} \frac{1}{2}\left(\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} + \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}\right) \tag{C.24a}$$

$$\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i,j} = \lim_{\delta\to 0} \frac{1}{2}\left(\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} + \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}\right) \tag{C.24b}$$

En utilisant maintenant les relations (C.11) dans (C.24), on aboutit aux expressions recherchées :

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial b_x}{\partial x}\right|_{i,j} =& \frac{k_{i,j+1}}{k_{i,j}+k_{i,j+1}} \frac{b_{x\,i,j+1} - b_{x\,i,j}}{\delta_x} - \frac{k_{i,j-1}}{k_{i,j}+k_{i,j-1}} \frac{b_{x\,i,j-1} - b_{x\,i,j}}{\delta_x} \\ & - \frac{1}{2}\left(\frac{k_{i,j}-k_{i,j+1}}{k_{i,j}+k_{i,j+1}} + \frac{k_{i,j}-k_{i,j-1}}{k_{i,j}+k_{i,j-1}}\right)\end{aligned} \tag{C.25a}$$

$$\left.\frac{\partial b_x}{\partial y}\right|_{i,j} = \frac{k_{i+1,j}}{k_{i,j}+k_{i+1,j}} \frac{b_{x\,i+1,j} - b_{x\,i,j}}{\delta_y} - \frac{k_{i-1,j}}{k_{i,j}+k_{i-1,j}} \frac{b_{x\,i-1,j} - b_{x\,i,j}}{\delta_y} \tag{C.25b}$$

De façon analogue, le gradient de la composante en y de $\boldsymbol{b}$ s'exprime :

$$\left.\frac{\partial b_y}{\partial x}\right|_{i,j} = \frac{k_{i,j+1}}{k_{i,j}+k_{i,j+1}}\frac{b_{y\,i,j+1}-b_{y\,i,j}}{\delta_x} - \frac{k_{i,j-1}}{k_{i,j}+k_{i,j-1}}\frac{b_{y\,i,j-1}-b_{y\,i,j}}{\delta_x} \tag{C.26a}$$

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial b_y}{\partial y}\right|_{i,j} =& \frac{k_{i+1,j}}{k_{i,j}+k_{i+1,j}}\frac{b_{y\,i+1,j}-b_{y\,i,j}}{\delta_y} - \frac{k_{i-1,j}}{k_{i,j}+k_{i-1,j}}\frac{b_{y\,i-1,j}-b_{y\,i,j}}{\delta_y} \\ &- \frac{1}{2}\left(\frac{k_{i,j}-k_{i+1,j}}{k_{i,j}+k_{i+1,j}} + \frac{k_{i,j}-k_{i-1,j}}{k_{i,j}+k_{i-1,j}}\right)\end{aligned} \tag{C.26b}$$

C.2 Formulation pour le problème de fermeture décomposé

On s'intéresse maintenant à la discrétisation par la méthode des volumes finis du problème de fermeture décomposé à l'ordre p, donnant lieu à $p+1$ sous-problèmes intrinsèques qui sont les suivants. On rappelle que h est l'ouverture locale de la fracture.

Sous-problème à l'ordre zéro

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(h^3\left\{\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\nabla b_0}\right\}\right)=0 \qquad \text{dans } \mathcal{S}_\beta \tag{C.27a}$$

$$\boldsymbol{n_{\sigma\beta}}\cdot\left(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\nabla b_0}\right)=0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \tag{C.27b}$$

$$\boldsymbol{b_0}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\Pi_i})=\boldsymbol{b_0}(\boldsymbol{x}) \qquad i=x,y \tag{C.27c}$$

Sous-problème à l'ordre un

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(h^2\left\{\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\nabla b_0}\right\}+h^3\boldsymbol{\nabla b_1}\right)=0 \qquad \text{dans } \mathcal{S}_\beta \tag{C.28a}$$

$$\boldsymbol{n_{\sigma\beta}}\cdot\boldsymbol{\nabla b_1}=0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \tag{C.28b}$$

$$\boldsymbol{b_1}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\Pi_i})=\boldsymbol{b_1}(\boldsymbol{x}) \qquad i=x,y \tag{C.28c}$$

Sous-problème à l'ordre $p \geqslant 2$

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(h^2\boldsymbol{\nabla b_{p-1}}+h^3\boldsymbol{\nabla b_p}\right)=0 \qquad \text{dans } \mathcal{S}_\beta \tag{C.29a}$$

$$\boldsymbol{n_{\sigma\beta}}\cdot\boldsymbol{\nabla b_p}=0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{\sigma\beta} \tag{C.29b}$$

$$\boldsymbol{b_p}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\Pi_i})=\boldsymbol{b_p}(\boldsymbol{x}) \qquad i=x,y \tag{C.29c}$$

Pour le problème à l'ordre zéro donné par les équations (C.27), la discrétisation est la même que pour le problème complet (C.1) car les deux problèmes ont la même forme. Toutes les équations de la section C.1 peuvent être réutilisées, en prenant cependant $k_{i,j} \equiv h_{i,j}^3$. Cela permet donc d'obtenir le champ de $\boldsymbol{b_0}$ ainsi que celui de son gradient. La suite de cette section est donc consacrée à la discrétisation du sous-problème à l'ordre un (C.28) permettant l'obtention du champ de $\boldsymbol{b_1}$ (et de son gradient), ainsi que des ordres supérieurs.

C.2.1 Discrétisation en volumes finis du problème

En considérant que le champ des ouvertures est uniforme par morceau, on aboutit aux sous-problèmes discrétisés suivants sur chaque cellule du maillage.

Sous-problème à l'ordre zéro

$$\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{b_0}=0 \qquad \text{dans } \Omega_{i,j} \tag{C.30a}$$

$$[\boldsymbol{b_0}]=0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{i,j} \tag{C.30b}$$

$$\left[\boldsymbol{n}\cdot h^3\left\{\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\nabla b_0}\right\}\right]=0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{i,j} \tag{C.30c}$$

$$\boldsymbol{b_0}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\Pi_i})=\boldsymbol{b_0}(\boldsymbol{x}) \qquad i=x,y \tag{C.30d}$$

Sous-problème à l'ordre un

$$\boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{b_1} = 0 \qquad \text{dans } \Omega_{i,j} \qquad \text{(C.31a)}$$
$$[\boldsymbol{b_1}] = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{i,j} \qquad \text{(C.31b)}$$
$$\left[\boldsymbol{n} \cdot h^3 \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_1}\right] = -\left[\boldsymbol{n} \cdot h^2 \left\{\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_0}\right\}\right] \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{i,j} \qquad \text{(C.31c)}$$
$$\boldsymbol{b_1}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\Pi_i}) = \boldsymbol{b_1}(\boldsymbol{x}) \qquad i = x, y \qquad \text{(C.31d)}$$

Sous-problème à l'ordre $p \geqslant 2$

$$\boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{b_p} = 0 \qquad \text{dans } \Omega_{i,j} \qquad \text{(C.32a)}$$
$$[\boldsymbol{b_p}] = 0 \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{i,j} \qquad \text{(C.32b)}$$
$$\left[\boldsymbol{n} \cdot h^3 \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_p}\right] = -\left[\boldsymbol{n} \cdot h^2 \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{b_{p-1}}\right] \qquad \text{sur } \mathcal{C}_{i,j} \qquad \text{(C.32c)}$$
$$\boldsymbol{b_p}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\Pi_i}) = \boldsymbol{b_p}(\boldsymbol{x}) \qquad i = x, y \qquad \text{(C.32d)}$$

Les expressions des différents sauts aux interfaces (C.30b), (C.30c), (C.31b), (C.31c), (C.32b) et (C.32c) ainsi que des conditions de périodicité sont obtenues en considérant que la continuité de la pression et du flux aux interfaces doivent être assurées quel que soit l'ordre auquel on décompose notre problème de fermeture complet (par exemple, le problème complet (C.3) donne toujours $[\boldsymbol{b}] = 0$ et le problème décomposé seulement à l'ordre zéro donnerait $[\boldsymbol{b}] = [\boldsymbol{b_0}] = 0$, par conséquent un problème tronqué jusqu'à l'ordre un donne $[\boldsymbol{b}] = [\boldsymbol{b_0}] + 6\xi\overline{\lambda}\,[\boldsymbol{b_1}] = 0$, ce qui implique $[\boldsymbol{b_1}] = 0$ comme c'est le cas ici). D'autre part, de la même manière que dans la section C.1, on ne considère pas ici les conditions limites au niveau des zones de contact car on pourrait montrer que les problèmes (C.30), (C.31) et (C.32) dégénèrent correctement en ces points.

Chaque sous-problème de fermeture demande la résolution locale de l'équation de Laplace. De la même façon que dans la section C.1, l'intégration des équations (C.30a), (C.31a) ou (C.32a) sur le domaine $\Omega_{i,j}$ d'une cellule conduirait à l'équation (C.6) pour la composante en x ou en y du vecteur de fermeture à n'importe quel ordre (simplement notée ici b). Cette équation est rappellée ci-dessous :

$$\lim_{\delta \to 0} \delta_y \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} - \delta_y \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} + \delta_x \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} - \delta_x \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = 0 \qquad \text{(C.6)}$$

C.2.1.1 Discrétisation du sous-problème à l'ordre zéro

Comme énoncé précédemment, le sous-problème de fermeture à l'ordre zéro (C.27) ayant une structure similaire au problème complet (C.1), la discrétisation est donc la même que pour ce dernier, en prenant cependant $k_{i,j} \equiv h^3_{i,j}$. Les résultats sont alors rappelés ci-dessous par commodité :

Terme au centre ($b_{i,j}$)

$$2\frac{\delta_y}{\delta_x}\left(\frac{h^3_{i,j}h^3_{i,j+1}}{h^3_{i,j}+h^3_{i,j+1}} + \frac{h^3_{i,j}h^3_{i,j-1}}{h^3_{i,j}+h^3_{i,j-1}}\right) + 2\frac{\delta_x}{\delta_y}\left(\frac{h^3_{i,j}h^3_{i+1,j}}{h^3_{i,j}+h^3_{i+1,j}} + \frac{h^3_{i,j}h^3_{i-1,j}}{h^3_{i,j}+h^3_{i-1,j}}\right) \qquad \text{(C.33)}$$

Terme à l'est ($b_{i,j+1}$)

$$-2\frac{\delta_y}{\delta_x}\frac{h^3_{i,j}h^3_{i,j+1}}{h^3_{i,j}+h^3_{i,j+1}} \qquad \text{(C.34)}$$

Terme à l'ouest ($b_{i,j-1}$)

$$-2\frac{\delta_y}{\delta_x}\frac{h^3_{i,j}h^3_{i,j-1}}{h^3_{i,j}+h^3_{i,j-1}} \qquad \text{(C.35)}$$

Terme au nord $(b_{i+1,j})$

$$-2\frac{\delta_x}{\delta_y}\frac{h_{i,j}^3 h_{i+1,j}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i+1,j}^3} \tag{C.36}$$

Terme au sud $(b_{i-1,j})$

$$-2\frac{\delta_x}{\delta_y}\frac{h_{i,j}^3 h_{i-1,j}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i-1,j}^3} \tag{C.37}$$

Terme source selon x

$$-\delta_y h_{i,j}\left(\frac{h_{i,j} - h_{i,j+1}}{h_{i,j} + h_{i,j+1}} - \frac{h_{i,j} - h_{i,j-1}}{h_{i,j} + h_{i,j-1}}\right) \tag{C.38}$$

Terme source selon y

$$-\delta_x h_{i,j}\left(\frac{h_{i,j} - h_{i+1,j}}{h_{i,j} + h_{i+1,j}} - \frac{h_{i,j} - h_{i-1,j}}{h_{i,j} + h_{i-1,j}}\right) \tag{C.39}$$

On est donc en mesure de former deux systèmes linéaires indépendants, permettant ainsi de déterminer la variable de fermeture $\boldsymbol{b_0}$.

C.2.1.2 Discrétisation du sous-problème à l'ordre un

On s'intéresse maintenant à la discrétisation du problème à l'ordre un (C.28). Le développement qui suit est effectué uniquement pour la composante en x de $\boldsymbol{b_1}$ que l'on note b par souci de clarté. De façon analogue à la section C.1, on pourrait écrire les différents développements de Taylor pour la variable b ce qui conduirait à l'expression (C.7). De même l'utilisation de la continuité de la pression (C.31b) pour le problème de fermeture décomposé à l'ordre un donnerait une relation similaire à (C.8). En revanche, l'expression du saut de flux (C.31c) fait intervenir les composantes du gradient du vecteur de fermeture $\boldsymbol{b_0}$ à l'ordre zéro précédent, du fait du couplage entre les deux problèmes. Comme la démarche est exposée uniquement pour la composante x, seule la composante b_{0x} est requise. Le développement de l'équation (C.31c) donne alors :

$$h_{i,j}^2\left(1 + \left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}\right) + h_{i,j}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} = h_{i,j+1}^2\left(1 + \left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta}\right) + h_{i,j+1}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} \tag{C.40a}$$

$$h_{i,j}^2\left(1 + \left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}\right) + h_{i,j}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} = h_{i,j-1}^2\left(1 + \left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta}\right) + h_{i,j-1}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} \tag{C.40b}$$

$$h_{i,j}^2 \left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} + h_{i,j}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} = h_{i+1,j}^2 \left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} + h_{i+1,j}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} \tag{C.40c}$$

$$h_{i,j}^2 \left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} + h_{i,j}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = h_{i-1,j}^2 \left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j} + h_{i-1,j}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j} \tag{C.40d}$$

Des équations (C.8) on peut exprimer les dérivées partielles de b aux niveau des faces, en « dehors » d'une cellule de la manière suivante :

$$\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} = \frac{2}{\delta_x}\left(b_{i,j+1} - b_{i,j}\right) - \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} + \mathcal{O}\left(\delta_x\right) \tag{C.41a}$$

$$\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} = -\frac{2}{\delta_x}\left(b_{i,j-1} - b_{i,j}\right) - \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} + \mathcal{O}\left(\delta_x\right) \tag{C.41b}$$

$$\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} = \frac{2}{\delta_y}\left(b_{i+1,j} - b_{i,j}\right) - \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} + \mathcal{O}\left(\delta_y\right) \tag{C.41c}$$

$$\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j} = -\frac{2}{\delta_y}\left(b_{i-1,j} - b_{i,j}\right) - \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} + \mathcal{O}\left(\delta_y\right) \tag{C.41d}$$

De plus, d'après les équations (C.10) et (C.11) du problème à l'ordre directement précédent, on peut exprimer les dérivées partielles de b_{0x} sur la frontière, à « l'intérieur » et en « dehors » de chaque cellule, cela donne :

$$\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} = \left\{\frac{2}{\delta_x}\left(b_{0x\,i,j+1} - b_{0x\,i,j}\right) + \frac{h^3_{i,j+1} - h^3_{i,j}}{h^3_{i,j+1}}\right\}\frac{h^3_{i,j+1}}{h^3_{i,j} + h^3_{i,j+1}} \tag{C.42a}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} = \frac{h^3_{i,j}}{h^3_{i,j+1}}\left(1 + \left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}\right) - 1 \tag{C.42b}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} = \left\{-\frac{2}{\delta_x}\left(b_{0x\,i,j-1} - b_{0x\,i,j}\right) + \frac{h^3_{i,j-1} - h^3_{i,j}}{h^3_{i,j-1}}\right\}\frac{h^3_{i,j-1}}{h^3_{i,j} + h^3_{i,j-1}} \tag{C.42c}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} = \frac{h^3_{i,j}}{h^3_{i,j-1}}\left(1 + \left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}\right) - 1 \tag{C.42d}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} = \frac{2}{\delta_y}\left(b_{0x\,i+1,j} - b_{0x\,i,j}\right)\frac{h^3_{i+1,j}}{h^3_{i,j} + h^3_{i+1,j}} \tag{C.42e}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} = \frac{h^3_{i,j}}{h^3_{i+1,j}}\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} \tag{C.42f}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = -\frac{2}{\delta_y}\left(b_{0x\,i-1,j} - b_{0x\,i,j}\right)\frac{h^3_{i-1,j}}{h^3_{i,j} + h^3_{i-1,j}} \tag{C.42g}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j} = \frac{h^3_{i,j}}{h^3_{i-1,j}}\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} \tag{C.42h}$$

Pour information, on aurait de la même façon les dérivées partielles de b_{0y} qui s'exprimeraient de la manière suivante :

$$\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} = \frac{2}{\delta_x}\left(b_{0y\,i,j+1} - b_{0y\,i,j}\right)\frac{h_{i,j+1}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i,j+1}^3} \tag{C.43a}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i,j+1}^3}\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} \tag{C.43b}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} = -\frac{2}{\delta_x}\left(b_{0y\,i,j-1} - b_{0y\,i,j}\right)\frac{h_{i,j-1}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i,j-1}^3} \tag{C.43c}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i,j-1}^3}\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} \tag{C.43d}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} = \left\{\frac{2}{\delta_y}\left(b_{0y\,i+1,j} - b_{0y\,i,j}\right) + \frac{h_{i+1,j}^3 - h_{i,j}^3}{h_{i+1,j}^3}\right\}\frac{h_{i+1,j}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i+1,j}^3} \tag{C.43e}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i+1,j}^3}\left(1 + \left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j}\right) - 1 \tag{C.43f}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = \left\{-\frac{2}{\delta_y}\left(b_{0y\,i-1,j} - b_{0y\,i,j}\right)\frac{h_{i-1,j}^3 - h_{i,j}^3}{h_{i-1,j}^3} + \right\}\frac{h_{i-1,j}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i-1,j}^3} \tag{C.43g}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i-1,j}^3}\left(1 + \left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}\right) - 1 \tag{C.43h}$$

En insérant les relations (C.41) et (C.42) dans les expressions des sauts de flux (C.40) et en ne conservant que les expressions des dérivées partielles de b_{0x} à « l'intérieur » (les relations « intérieures » et « extérieures » sont liées comme le montrent les équations (C.42)), on obtient :

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} =& \frac{2}{\delta_x}\frac{h_{i,j+1}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i,j+1}^3}\left(b_{i,j+1} - b_{i,j}\right) + \\ & \frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j+1}}\frac{h_{i,j} - h_{i,j+1}}{h_{i,j}^3 + h_{i,j+1}^3}\left(1 + \left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}\right)\end{aligned} \tag{C.44a}$$

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} =& -\frac{2}{\delta_x}\frac{h_{i,j-1}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i,j-1}^3}\left(b_{i,j-1} - b_{i,j}\right) + \\ & \frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j-1}}\frac{h_{i,j} - h_{i,j-1}}{h_{i,j}^3 + h_{i,j-1}^3}\left(1 + \left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}\right)\end{aligned} \tag{C.44b}$$

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} =& \frac{2}{\delta_y}\frac{h_{i+1,j}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i+1,j}^3}\left(b_{i+1,j} - b_{i,j}\right) + \\ & \frac{h_{i,j}^2}{h_{i+1,j}}\frac{h_{i,j} - h_{i+1,j}}{h_{i,j}^3 + h_{i+1,j}^3}\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j}\end{aligned} \tag{C.44c}$$

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} =& -\frac{2}{\delta_y}\frac{h_{i-1,j}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i-1,j}^3}\left(b_{i-1,j} - b_{i,j}\right) + \\ & \frac{h_{i,j}^2}{h_{i-1,j}}\frac{h_{i,j} - h_{i-1,j}}{h_{i,j}^3 + h_{i-1,j}^3}\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}\end{aligned} \tag{C.44d}$$

Enfin, en introduisant les équations (C.44) dans l'équation (C.6) et en multipliant par $h_{i,j}^3$, on obtient la relation ci-dessous qui lie les différents termes en b, permettant ainsi de former le système linéaire associé au problème de fermeture décomposé au premier ordre (C.31), qui est couplé au problème à l'ordre zéro (C.30).

$$
\begin{aligned}
&2\frac{\delta_y}{\delta_x}\left(b_{i,j+1}-b_{i,j}\right)\frac{h_{i,j}^3 h_{i,j+1}^3}{h_{i,j}^3+h_{i,j+1}^3}+2\frac{\delta_y}{\delta_x}\left(b_{i,j-1}-b_{i,j}\right)\frac{h_{i,j}^3 h_{i,j-1}^3}{h_{i,j}^3+h_{i,j-1}^3}+\\
&2\frac{\delta_x}{\delta_y}\left(b_{i+1,j}-b_{i,j}\right)\frac{h_{i,j}^3 h_{i+1,j}^3}{h_{i,j}^3+h_{i+1,j}^3}+2\frac{\delta_x}{\delta_y}\left(b_{i-1,j}-b_{i,j}\right)\frac{h_{i,j}^3 h_{i-1,j}^3}{h_{i,j}^3+h_{i-1,j}^3}+\\
&\delta_y\frac{h_{i,j}^5}{h_{i,j}^3+h_{i,j+1}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i,j+1}}{h_{i,j+1}}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}\right)-\\
&\delta_y\frac{h_{i,j}^5}{h_{i,j}^3+h_{i,j-1}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i,j-1}}{h_{i,j-1}}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}\right)+\\
&\delta_x\frac{h_{i,j}^5}{h_{i,j}^3+h_{i+1,j}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i+1,j}}{h_{i+1,j}}\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j}-\\
&\delta_x\frac{h_{i,j}^5}{h_{i,j}^3+h_{i-1,j}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i-1,j}}{h_{i-1,j}}\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}=0
\end{aligned}
\tag{C.45}
$$

Dans l'équation (C.45), les dérivées partielles de b_{0x} sont bien entendu données par les équations (C.42) correspondantes (de façon similaire selon y, elles seraient données par les équations (C.43)). Un raisonnement analogue pour la composante y de $\boldsymbol{b_1}$ permettrait de montrer que les facteurs multiplicatifs des termes en b sont identiques, et que seul le terme source est modifié. De plus, on remarque que les facteurs qui multiplient les termes en b dans l'équation (C.45) sont les mêmes que ceux pour le problème à l'ordre zéro. En conséquence, les termes qui vont constituer la matrice de raideur du système linéaire seront identiques, seul le second membre va être modifié. En résumé, on a alors :

Terme au centre $(b_{i,j})$ identique à (C.33)

Terme à l'est $(b_{i,j+1})$ identique à (C.34)

Terme à l'ouest $(b_{i,j-1})$ identique à (C.35)

Terme au nord $(b_{i+1,j})$ identique à (C.36)

Terme au sud $(b_{i-1,j})$ identique à (C.37)

Terme source selon x

$$
\begin{aligned}
&\delta_y\frac{h_{i,j}^5}{h_{i,j}^3+h_{i,j+1}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i,j+1}}{h_{i,j+1}}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}\right)-\\
&\delta_y\frac{h_{i,j}^5}{h_{i,j}^3+h_{i,j-1}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i,j-1}}{h_{i,j-1}}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}\right)+\\
&\delta_x\frac{h_{i,j}^5}{h_{i,j}^3+h_{i+1,j}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i+1,j}}{h_{i+1,j}}\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j}-\\
&\delta_x\frac{h_{i,j}^5}{h_{i,j}^3+h_{i-1,j}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i-1,j}}{h_{i-1,j}}\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}
\end{aligned}
\tag{C.46}
$$

Terme source selon y

$$\begin{aligned}
&\delta_y \frac{h_{i,j}^5}{h_{i,j}^3 + h_{i,j+1}^3} \frac{h_{i,j} - h_{i,j+1}}{h_{i,j+1}} \left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} - \\
&\delta_y \frac{h_{i,j}^5}{h_{i,j}^3 + h_{i,j-1}^3} \frac{h_{i,j} - h_{i,j-1}}{h_{i,j-1}} \left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} + \\
&\delta_x \frac{h_{i,j}^5}{h_{i,j}^3 + h_{i+1,j}^3} \frac{h_{i,j} - h_{i+1,j}}{h_{i+1,j}} \left(1 + \left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j}\right) - \\
&\delta_x \frac{h_{i,j}^5}{h_{i,j}^3 + h_{i-1,j}^3} \frac{h_{i,j} - h_{i-1,j}}{h_{i-1,j}} \left(1 + \left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}\right)
\end{aligned} \tag{C.47}$$

Là encore, cela donne deux systèmes linéaires indépendants à résoudre pour déterminer $\boldsymbol{b_1}$, ils sont cependant couplés avec la solution $\boldsymbol{b_0}$ qui est elle aussi déterminée à partir de deux systèmes linéaires indépendants.

C.2.1.3 Discrétisation des sous-problèmes aux ordres supérieurs

Pour les problèmes aux ordres supérieurs ($p \geqslant 2$) définis par les équations (C.29), on procède de manière similaire. Le développement qui suit est effectué uniquement pour la composante en x de $\boldsymbol{b_p}$ que l'on note b par souci de clarté (il serait identique pour la composante y). De façon analogue à la section C.1, on pourrait écrire les différents développements de Taylor pour la variable b ce qui conduirait à l'expression (C.7). De même l'utilisation de la continuité de la pression (C.32b) pour le problème de fermeture décomposé à l'ordre p donnerait une relation similaire à (C.8). En revanche, l'expression du saut de flux (C.32c) fait intervenir les composantes du gradient du vecteur de fermeture à l'ordre précédent $\boldsymbol{b_{p-1}}$, du fait du couplage entre deux problèmes successifs. On commence par donner la forme développée des sauts de flux aux interfaces d'une cellule grâce à l'équation (C.32c) :

$$\begin{aligned}
&h_{i,j}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} + h_{i,j}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} = \\
&h_{i,j+1}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} + h_{i,j+1}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta}
\end{aligned} \tag{C.48a}$$

$$\begin{aligned}
&h_{i,j}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} + h_{i,j}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} = \\
&h_{i,j-1}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} + h_{i,j-1}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta}
\end{aligned} \tag{C.48b}$$

$$\begin{aligned}
&h_{i,j}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} + h_{i,j}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} = \\
&h_{i+1,j}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} + h_{i+1,j}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j}
\end{aligned} \tag{C.48c}$$

$$\begin{aligned}
&h_{i,j}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} + h_{i,j}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = \\
&h_{i-1,j}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j} + h_{i-1,j}^3 \left.\frac{\partial b}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j}
\end{aligned} \tag{C.48d}$$

En combinant les relations (C.41) avec les relations (C.48), on peut obtenir l'expression des dérivées partielles de b sur chaque face, à « l'intérieur » de la cellule. En insérant ces dernières dans la relation de base (C.6) et en multipliant tous les termes par $h_{i,j}^3$, on

obtient alors l'expression liant la valeur de b sur la cellule en fonction des valeurs des cellules voisines :

$$
\begin{aligned}
&2\frac{\delta_y}{\delta_x}\left(b_{i,j+1}-b_{i,j}\right)\frac{h_{i,j}^3 h_{i,j+1}^3}{h_{i,j}^3+h_{i,j+1}^3}+2\frac{\delta_y}{\delta_x}\left(b_{i,j-1}-b_{i,j}\right)\frac{h_{i,j}^3 h_{i,j-1}^3}{h_{i,j}^3+h_{i,j-1}^3}+\\
&2\frac{\delta_x}{\delta_y}\left(b_{i+1,j}-b_{i,j}\right)\frac{h_{i,j}^3 h_{i+1,j}^3}{h_{i,j}^3+h_{i+1,j}^3}+2\frac{\delta_x}{\delta_y}\left(b_{i-1,j}-b_{i,j}\right)\frac{h_{i,j}^3 h_{i-1,j}^3}{h_{i,j}^3+h_{i-1,j}^3}+\\
&\delta_y h_{i,j}^3 h_{i,j+1}^2\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta}-\delta_y h_{i,j}^5\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}-\\
&\delta_y h_{i,j}^3 h_{i,j-1}^2\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta}+\delta_y h_{i,j}^5\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}+\\
&\delta_x h_{i,j}^3 h_{i+1,j}^2\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j}-\delta_x h_{i,j}^5\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j}-\\
&\delta_x h_{i,j}^3 h_{i-1,j}^2\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j}+\delta_x h_{i,j}^5\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}=0
\end{aligned}
\tag{C.49}
$$

L'équation (C.49) permet donc de former les systèmes linéaires associés au problème à l'ordre p. Elle fait cependant intervenir les dérivées partielles de la solution de l'ordre directement précédent, dont il reste à donner une expression. Deux cas de figure se présentent alors :

— Si $p = 2$, alors il faut faire intervenir les dérivées partielles de $\boldsymbol{b_1}$, qui vont avoir une expression différente selon si l'on s'intéresse à la composante b_{1x} ou b_{1y}.
— Si $p \geqslant 3$, les dérivées partielles de $\boldsymbol{b_{p-1}}$ interviennent et elles possèdent une expression similaire dans les deux directions, de part la structure du sous-problème (C.29) qui ne fait pas intervenir le tenseur identité, contrairement aux sous-problèmes d'ordre inférieur.

Regardons d'abord le premier cas, lorsque $p = 2$. D'après le sous-problème discrétisé à l'ordre précédent $p - 1 = 1$, les différentes dérivées partielles de $\boldsymbol{b_1}$ peuvent s'exprimer grâce aux relations (C.44) notamment. Cela donne selon la direction x :

$$\left.\frac{\partial b_{1x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} = \frac{2}{\delta_x}\frac{h_{i,j+1}^3}{h_{i,j}^3+h_{i,j+1}^3}\left(b_{1x\,i,j+1}-b_{1x\,i,j}\right)+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j+1}}\frac{h_{i,j}-h_{i,j+1}}{h_{i,j}^3+h_{i,j+1}^3}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}\right) \tag{C.50a}$$

$$\left.\frac{\partial b_{1x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i,j+1}^3}\left.\frac{\partial b_{1x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j+1}^3}\frac{h_{i,j+1}-h_{i,j}}{h_{i,j+1}}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}\right) \tag{C.50b}$$

$$\left.\frac{\partial b_{1x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} = -\frac{2}{\delta_x}\frac{h_{i,j-1}^3}{h_{i,j}^3+h_{i,j-1}^3}\left(b_{1x\,i,j-1}-b_{1x\,i,j}\right)+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j-1}}\frac{h_{i,j}-h_{i,j-1}}{h_{i,j}^3+h_{i,j-1}^3}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}\right) \tag{C.50c}$$

$$\left.\frac{\partial b_{1x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i,j-1}^3}\left.\frac{\partial b_{1x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j-1}^3}\frac{h_{i,j-1}-h_{i,j}}{h_{i,j-1}}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}\right) \tag{C.50d}$$

$$\left.\frac{\partial b_{1x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} = \frac{2}{\delta_y}\frac{h_{i+1,j}^3}{h_{i,j}^3+h_{i+1,j}^3}\left(b_{1x\,i+1,j}-b_{1x\,i,j}\right)+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i+1,j}}\frac{h_{i,j}-h_{i+1,j}}{h_{i,j}^3+h_{i+1,j}^3}\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} \tag{C.50e}$$

$$\left.\frac{\partial b_{1x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i+1,j}^3}\left.\frac{\partial b_{1x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j}+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i+1,j}^3}\frac{h_{i+1,j}-h_{i,j}}{h_{i+1,j}}\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} \tag{C.50f}$$

$$\left.\frac{\partial b_{1x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = -\frac{2}{\delta_y}\frac{h_{i-1,j}^3}{h_{i,j}^3+h_{i-1,j}^3}\left(b_{1x\,i-1,j}-b_{1x\,i,j}\right)+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i-1,j}}\frac{h_{i,j}-h_{i-1,j}}{h_{i,j}^3+h_{i-1,j}^3}\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} \tag{C.50g}$$

$$\left.\frac{\partial b_{1x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i-1,j}^3}\left.\frac{\partial b_{1x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i-1,j}^3}\frac{h_{i-1,j}-h_{i,j}}{h_{i-1,j}}\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} \tag{C.50h}$$

Des expressions symétriques sont valables selon y, c'est-à-dire :

$$\left.\frac{\partial b_{1y}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} = \frac{2}{\delta_x}\frac{h_{i,j+1}^3}{h_{i,j}^3+h_{i,j+1}^3}\left(b_{1y\,i,j+1}-b_{1y\,i,j}\right)+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j+1}}\frac{h_{i,j}-h_{i,j+1}}{h_{i,j}^3+h_{i,j+1}^3}\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} \tag{C.51a}$$

$$\left.\frac{\partial b_{1y}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i,j+1}^3}\left.\frac{\partial b_{1y}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j+1}^3}\frac{h_{i,j+1}-h_{i,j}}{h_{i,j+1}}\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} \tag{C.51b}$$

$$\left.\frac{\partial b_{1y}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} = -\frac{2}{\delta_x}\frac{h_{i,j-1}^3}{h_{i,j}^3+h_{i,j-1}^3}\left(b_{1y\,i,j-1}-b_{1y\,i,j}\right)+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j-1}}\frac{h_{i,j}-h_{i,j-1}}{h_{i,j}^3+h_{i,j-1}^3}\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} \tag{C.51c}$$

$$\left.\frac{\partial b_{1y}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i,j-1}^3}\left.\frac{\partial b_{1y}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j-1}^3}\frac{h_{i,j-1}-h_{i,j}}{h_{i,j-1}}\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} \tag{C.51d}$$

$$\left.\frac{\partial b_{1y}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} = \frac{2}{\delta_y}\frac{h_{i+1,j}^3}{h_{i,j}^3+h_{i+1,j}^3}\left(b_{1y\,i+1,j}-b_{1y\,i,j}\right)+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i+1,j}}\frac{h_{i,j}-h_{i+1,j}}{h_{i,j}^3+h_{i+1,j}^3}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j}\right) \tag{C.51e}$$

$$\left.\frac{\partial b_{1y}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i+1,j}^3}\left.\frac{\partial b_{1y}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j}+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i+1,j}^3}\frac{h_{i+1,j}-h_{i,j}}{h_{i+1,j}}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j}\right) \tag{C.51f}$$

$$\left.\frac{\partial b_{1y}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = -\frac{2}{\delta_y}\frac{h_{i-1,j}^3}{h_{i,j}^3+h_{i-1,j}^3}\left(b_{1y\,i-1,j}-b_{1y\,i,j}\right)+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i-1,j}}\frac{h_{i,j}-h_{i-1,j}}{h_{i,j}^3+h_{i-1,j}^3}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}\right) \tag{C.51g}$$

$$\left.\frac{\partial b_{1y}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i-1,j}^3}\left.\frac{\partial b_{1y}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i-1,j}^3}\frac{h_{i-1,j}-h_{i,j}}{h_{i-1,j}}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}\right) \tag{C.51h}$$

Dans le second cas, pour une valeur de $p \geqslant 3$, les différentes dérivées partielles de $\boldsymbol{b_{p-1}}$ peuvent être obtenues de manière récurrente par rapport aux dérivées de $\boldsymbol{b_{p-2}}$ à l'ordre précédent, qui auront été déterminées au préalable. En se servant des expressions donnant le saut de flux (C.48) ainsi que des expressions des dérivées aux frontières, à « l'intérieur » des cellules (équations non développées jusqu'ici), on obtient (indépendamment pour la direction x ou y, on notera la composante concernée comme b_{p-1} car les expressions sont similaires) :

$$\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} = \frac{2}{\delta_x}\frac{h_{i,j+1}^3}{h_{i,j}^3+h_{i,j+1}^3}\left(b_{p-1\,i,j+1}-b_{p-1\,i,j}\right)+ h_{i,j+1}^2\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} - h_{i,j}^2\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} \tag{C.52a}$$

$$\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i,j+1}^3}\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j+1}^3}\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} - \frac{1}{h_{i,j+1}}\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} \tag{C.52b}$$

$$\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} = -\frac{2}{\delta_x}\frac{h_{i,j-1}^3}{h_{i,j}^3+h_{i,j-1}^3}\left(b_{p-1\,i,j-1}-b_{p-1\,i,j}\right)+ h_{i,j-1}^2\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} - h_{i,j}^2\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} \tag{C.52c}$$

$$\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i,j-1}^3}\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j-1}^3}\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} - \frac{1}{h_{i,j-1}}\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} \tag{C.52d}$$

$$\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} = \frac{2}{\delta_y}\frac{h_{i+1,j}^3}{h_{i,j}^3+h_{i+1,j}^3}\left(b_{p-1\,i+1,j}-b_{p-1\,i,j}\right)+ h_{i+1,j}^2\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} - h_{i,j}^2\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} \tag{C.52e}$$

$$\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i+1,j}^3}\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j}+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i+1,j}^3}\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} - \frac{1}{h_{i+1,j}}\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} \tag{C.52f}$$

$$\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = -\frac{2}{\delta_y}\frac{h_{i-1,j}^3}{h_{i,j}^3+h_{i-1,j}^3}\left(b_{p-1\,i-1,j}-b_{p-1\,i,j}\right)+ h_{i-1,j}^2\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j} - h_{i,j}^2\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} \tag{C.52g}$$

$$\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} = \frac{h_{i,j}^3}{h_{i-1,j}^3}\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}+ \frac{h_{i,j}^2}{h_{i-1,j}^3}\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j} - \frac{1}{h_{i-1,j}}\left.\frac{\partial b_{p-2}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j} \tag{C.52h}$$

Pour finir, les différents termes de l'équation (C.49) peuvent être présentés de la façon ci-dessous :

Terme au centre $(b_{i,j})$ identique à (C.33)

Terme à l'est $(b_{i,j+1})$ identique à (C.34)

Terme à l'ouest $(b_{i,j-1})$ identique à (C.35)

Terme au nord $(b_{i+1,j})$ identique à (C.36)

Terme au sud ($b_{i-1,j}$) identique à (C.37)

Terme source selon x

$$\begin{aligned}
&\delta_y h_{i,j}^3 h_{i,j+1}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1\,x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} - \delta_y h_{i,j}^5 \left.\frac{\partial b_{p-1\,x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} - \\
&\delta_y h_{i,j}^3 h_{i,j-1}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1\,x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} + \delta_y h_{i,j}^5 \left.\frac{\partial b_{p-1\,x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} + \\
&\delta_x h_{i,j}^3 h_{i+1,j}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1\,x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} - \delta_x h_{i,j}^5 \left.\frac{\partial b_{p-1\,x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} - \\
&\delta_x h_{i,j}^3 h_{i-1,j}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1\,x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j} + \delta_x h_{i,j}^5 \left.\frac{\partial b_{p-1\,x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}
\end{aligned} \tag{C.53}$$

Terme source selon y

$$\begin{aligned}
&\delta_y h_{i,j}^3 h_{i,j+1}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1\,y}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} - \delta_y h_{i,j}^5 \left.\frac{\partial b_{p-1\,y}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} - \\
&\delta_y h_{i,j}^3 h_{i,j-1}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1\,y}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} + \delta_y h_{i,j}^5 \left.\frac{\partial b_{p-1\,y}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta} + \\
&\delta_x h_{i,j}^3 h_{i+1,j}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1\,y}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} - \delta_x h_{i,j}^5 \left.\frac{\partial b_{p-1\,y}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} - \\
&\delta_x h_{i,j}^3 h_{i-1,j}^2 \left.\frac{\partial b_{p-1\,y}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j} + \delta_x h_{i,j}^5 \left.\frac{\partial b_{p-1\,y}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}
\end{aligned} \tag{C.54}$$

En résumé, lorsque le problème de fermeture complet est décomposé à l'ordre p, cela donne $p+1$ sous-problèmes de fermeture. Chaque sous-problème donnant lieu à la formation de deux systèmes linéaires indépendants l'un de l'autre pour déterminer les composantes selon x ou y du vecteur solution $\boldsymbol{b_p}$. Au total, il faut donc résoudre $2(p+1)$ systèmes linéaires pour obtenir un décomposition à l'ordre p du vecteur de fermeture complet $\boldsymbol{b}$. Il est à noter que la matrice de raideur de chacun des $2(p+1)$ systèmes est identique, seul le second membre est modifié.

C.2.2 Détermination du gradient en milieu hétérogène

Afin de déterminer le tenseur de transmissivité macroscopique décomposé, il est nécessaire de calculer les gradients des différentes variables de fermeture du problème décomposé (c'est-à-dire $\boldsymbol{\nabla b_0}$, $\boldsymbol{\nabla b_1}$, etc.). Pour $\boldsymbol{b_0}$, le problème a déjà été traité, il s'agit d'utiliser les équations (C.25) et (C.26) en prenant $k_{i,j} \equiv h_{i,j}^3$. Pour la forme, cela donne :

$$\begin{aligned}
\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j} =& \frac{h_{i,j+1}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i,j+1}^3} \frac{b_{0x\,i,j+1} - b_{0x\,i,j}}{\delta_x} - \frac{h_{i,j-1}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i,j-1}^3} \frac{b_{0x\,i,j-1} - b_{0x\,i,j}}{\delta_x} \\
&- \frac{1}{2}\left(\frac{h_{i,j}^3 - h_{i,j+1}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i,j+1}^3} + \frac{h_{i,j}^3 - h_{i,j-1}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i,j-1}^3}\right)
\end{aligned} \tag{C.55a}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i,j} = \frac{h_{i+1,j}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i+1,j}^3} \frac{b_{0x\,i+1,j} - b_{0x\,i,j}}{\delta_y} - \frac{h_{i-1,j}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i-1,j}^3} \frac{b_{0x\,i-1,j} - b_{0x\,i,j}}{\delta_y} \tag{C.55b}$$

$$\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial x}\right|_{i,j} = \frac{h_{i,j+1}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i,j+1}^3} \frac{b_{0y\,i,j+1} - b_{0y\,i,j}}{\delta_x} - \frac{h_{i,j-1}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i,j-1}^3} \frac{b_{0y\,i,j-1} - b_{0y\,i,j}}{\delta_x} \tag{C.55c}$$

$$\begin{aligned}
\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i,j} =& \frac{h_{i+1,j}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i+1,j}^3} \frac{b_{0y\,i+1,j} - b_{0y\,i,j}}{\delta_y} - \frac{h_{i-1,j}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i-1,j}^3} \frac{b_{0y\,i-1,j} - b_{0y\,i,j}}{\delta_y} \\
&- \frac{1}{2}\left(\frac{h_{i,j}^3 - h_{i+1,j}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i+1,j}^3} + \frac{h_{i,j}^3 - h_{i-1,j}^3}{h_{i,j}^3 + h_{i-1,j}^3}\right)
\end{aligned} \tag{C.55d}$$

Pour $\boldsymbol{b_1}$, il faut repartir des équations (C.44) (ou de leur version analogue pour la composante en y), puis les réintroduire dans les relations (C.24). Cela permet alors d'obtenir les relations cherchées :

$$\begin{aligned}
\left.\frac{\partial b_{1x}}{\partial x}\right|_{i,j} =& \frac{h_{i,j+1}^3}{h_{i,j}^3+h_{i,j+1}^3}\frac{b_{1x\,i,j+1}-b_{1x\,i,j}}{\delta_x} - \frac{h_{i,j-1}^3}{h_{i,j}^3+h_{i,j-1}^3}\frac{b_{1x\,i,j-1}-b_{1x\,i,j}}{\delta_x} \\
&+ \frac{1}{2}\frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j}^3+h_{i,j+1}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i,j+1}}{h_{i,j+1}}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}\right) \\
&+ \frac{1}{2}\frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j}^3+h_{i,j-1}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i,j-1}}{h_{i,j-1}}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}\right)
\end{aligned} \tag{C.56a}$$

$$\begin{aligned}
\left.\frac{\partial b_{1x}}{\partial y}\right|_{i,j} =& \frac{h_{i+1,j}^3}{h_{i,j}^3+h_{i+1,j}^3}\frac{b_{1x\,i+1,j}-b_{1x\,i,j}}{\delta_y} - \frac{h_{i-1,j}^3}{h_{i,j}^3+h_{i-1,j}^3}\frac{b_{1x\,i-1,j}-b_{1x\,i,j}}{\delta_y} \\
&+ \frac{1}{2}\frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j}^3+h_{i+1,j}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i+1,j}}{h_{i+1,j}}\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j} \\
&+ \frac{1}{2}\frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j}^3+h_{i-1,j}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i-1,j}}{h_{i-1,j}}\left.\frac{\partial b_{0x}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}
\end{aligned} \tag{C.56b}$$

$$\begin{aligned}
\left.\frac{\partial b_{1y}}{\partial x}\right|_{i,j} =& \frac{h_{i,j+1}^3}{h_{i,j}^3+h_{i,j+1}^3}\frac{b_{1y\,i,j+1}-b_{1y\,i,j}}{\delta_x} - \frac{h_{i,j-1}^3}{h_{i,j}^3+h_{i,j-1}^3}\frac{b_{1y\,i,j-1}-b_{1y\,i,j}}{\delta_x} \\
&+ \frac{1}{2}\frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j}^3+h_{i,j+1}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i,j+1}}{h_{i,j+1}}\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta} \\
&+ \frac{1}{2}\frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j}^3+h_{i,j-1}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i,j-1}}{h_{i,j-1}}\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}
\end{aligned} \tag{C.56c}$$

$$\begin{aligned}
\left.\frac{\partial b_{1y}}{\partial y}\right|_{i,j} =& \frac{h_{i+1,j}^3}{h_{i,j}^3+h_{i+1,j}^3}\frac{b_{1y\,i+1,j}-b_{1y\,i,j}}{\delta_y} - \frac{h_{i-1,j}^3}{h_{i,j}^3+h_{i-1,j}^3}\frac{b_{1y\,i-1,j}-b_{1y\,i,j}}{\delta_y} \\
&+ \frac{1}{2}\frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j}^3+h_{i+1,j}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i+1,j}}{h_{i+1,j}}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j}\right) \\
&+ \frac{1}{2}\frac{h_{i,j}^2}{h_{i,j}^3+h_{i-1,j}^3}\frac{h_{i,j}-h_{i-1,j}}{h_{i-1,j}}\left(1+\left.\frac{\partial b_{0y}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}\right)
\end{aligned} \tag{C.56d}$$

Dans lesquelles les différentes dérivées partielles de $\boldsymbol{b_0}$ sont connues grâce aux équations (C.42) et (C.43). En raisonnant de même à l'ordre $p \geqslant 2$, on obtient (pour la composante x ou y indépendamment) :

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial b_p}{\partial x}\right|_{i,j} =& \frac{h^3_{i,j+1}}{h^3_{i,j}+h^3_{i,j+1}}\frac{b_{p\,i,j+1}-b_{p\,i,j}}{\delta_x} - \frac{h^3_{i,j-1}}{h^3_{i,j}+h^3_{i,j-1}}\frac{b_{p\,i,j-1}-b_{p\,i,j}}{\delta_x} \\ &+ \frac{1}{2}\left(h^2_{i,j+1}\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}+\delta} - h^2_{i,j}\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j+\frac{1}{2}-\delta}\right) \\ &+ \frac{1}{2}\left(h^2_{i,j-1}\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}-\delta} - h^2_{i,j}\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial x}\right|_{i,j-\frac{1}{2}+\delta}\right)\end{aligned} \tag{C.57a}$$

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial b_p}{\partial y}\right|_{i,j} =& \frac{h^3_{i+1,j}}{h^3_{i,j}+h^3_{i+1,j}}\frac{b_{p\,i+1,j}-b_{p\,i,j}}{\delta_x} - \frac{h^3_{i-1,j}}{h^3_{i,j}+h^3_{i-1,j}}\frac{b_{p\,i-1,j}-b_{p\,i,j}}{\delta_x} \\ &+ \frac{1}{2}\left(h^2_{i+1,j}\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}+\delta,j} - h^2_{i,j}\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i+\frac{1}{2}-\delta,j}\right) \\ &+ \frac{1}{2}\left(h^2_{i-1,j}\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}-\delta,j} - h^2_{i,j}\left.\frac{\partial b_{p-1}}{\partial y}\right|_{i-\frac{1}{2}+\delta,j}\right)\end{aligned} \tag{C.57b}$$

Dans les équations (C.57), les dérivées des vecteurs de fermeture aux ordres inférieurs sont déterminées par les relations (C.50), (C.51) ou (C.52) selon le cas.

Annexe D

Génération de surfaces gaussiennes

Une méthode de génération de surfaces gaussiennes corrélées à courte portée, en fonction de paramètres statistiques prédéterminés est présentée dans cette annexe. Ce type de surface est assez répandu pour la description de la géométrie de fractures rugueuses (voir par exemple Mourzenko *et al.* (1995); Plouraboué *et al.* (2006)).

La première étape consiste à générer un champ de hauteurs non-corrélées, z, sur une grille cartésienne. La distribution statistique des hauteurs z suit une loi normale, dont la fonction densité de de probabilité, f, est donnée par :

$$f(z) = \frac{1}{\sigma_h \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2{\sigma_h}^2}\right) \tag{D.1}$$

où σ_h représente la hauteur moyenne quadratique de la surface. Pour introduire de la corrélation à courte portée dans les deux directions x et y, le champ généré z est convolé par un filtre gaussien de telle sorte que la fonction d'auto-corrélation $C(x, y)$ de la surface qui en résulte soit donné par (Patir, 1978; Shi *et al.*, 2015) :

$$C(x,y) = \frac{\langle z(x_0,y_0)z(x_0+x,y_0+y)\rangle}{\sigma_h^2} = \exp\left(-\left(\frac{x^2}{{\sigma_x}^2} + \frac{y^2}{{\sigma_y}^2}\right)\right) \tag{D.2}$$

On note que pour un filtre gaussien, la fonction d'auto-corrélation est aussi gaussienne. Dans cette dernière relation, σ_x et σ_y sont respectivement les longueurs de corrélation dans les directions x et y. L'expression (D.2) est obtenue pour une corrélation par un filtre gaussien d'axes principaux correspondant aux directions x et y. Il est également possible de convoler le champ z par un filtre dont les axes principaux sont différents, cela revient à appliquer une rotation plane d'angle θ à la fonction de filtre gaussien. L'angle θ est alors celui formé par la nouvelle direction principale par rapport au repère de base.

Un programme permettant de générer de telles surfaces par passage dans le domaine de Fourier est par exemple proposé par Bergström (2012), basé sur la méthodologie de Garcia et Stoll (1984).

Annexe E

Expression des intégrales pour la méthode des éléments finis de frontière

On donne ici les expressions analytiques des intégrales qui interviennent dans la méthode des éléments finis de frontière avec des éléments constants.

E.1 Expression des éléments de matrice G_{ij} et H_{ij}

Dans cette section, on s'intéresse à déterminer l'expression des intégrales (3.144) permettant d'obtenir les éléments de matrice G_{ij} et H_{ij} pour des éléments finis sur lesquels la solution est supposée être constante (ces éléments comportent alors un seul nœud, placé au centre de l'élément). Ces intégrales donnent l'influence sur l'élément j d'une source placée sur le nœud i.

$$G_{ij} = \int_{\mathcal{C}_j} \phi_i \, \mathrm{d}l_j \quad , \quad H_{ij} = \int_{\mathcal{C}_j} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{n}} \right)_i \mathrm{d}l_j \tag{3.144}$$

On rappelle également l'expression de la solution fondamentale ϕ donnée par l'équation (3.136), où r est la distance entre le point d'application de la source et un point quelconque du domaine.

$$\phi(r) = -\frac{1}{2\pi} \ln(r) \tag{3.136}$$

E.1.1 Cas des coefficients diagonaux

On s'intéresse tout d'abord au calcul des intégrales pour l'élément sur lequel est placée la source, c'est-à-dire lorsque $i = j$. Cela permet d'obtenir les éléments diagonaux G_{ii} et H_{ii} des matrices.

La paramétrisation du problème est donnée en figure E.1. Dans ce cas, les intégrandes de (3.144) sont singuliers lorsque r_i tend vers zéro, on sépare alors le domaine $\mathcal{C}_i$ en trois sous-domaines $\mathcal{C}_1$ (de longueur L_1), $\mathcal{C}_2$ (de longueur L_2) et $\mathcal{C}_\varepsilon$ (arc de cercle de rayon ε entourant le point de singularité). Les intégrales sont alors calculées sur ces trois sous-domaines, puis la limite est prise lorsque $\varepsilon \to 0$ (Huyakorn et Pinder, 1983).

Coefficient G_{ii}

$$\begin{aligned} G_{ii} &= \int_{\mathcal{C}_i} -\frac{1}{2\pi} \ln(r_i) \, \mathrm{d}l_i \\ &= -\frac{1}{2\pi} \lim_{\varepsilon \to 0} \left\{ \int_{\mathcal{C}_{1i}} \ln(r_i) \, \mathrm{d}l_{1i} + \int_{\mathcal{C}_{2i}} \ln(r_i) \, \mathrm{d}l_{1i} + \int_{\mathcal{C}_\varepsilon} \ln(\varepsilon) \, \mathrm{d}l_\varepsilon \right\} \end{aligned} \tag{E.1}$$

En utilisant le fait que $\mathrm{d}l_\varepsilon = \varepsilon \mathrm{d}\theta$, le calcul des trois intégrales de (E.1) ne présente pas de difficulté particulière. Après passage à la limite, on obtient :

$$G_{ii} = -\frac{1}{2\pi} L_i \left(\ln\left(\frac{L_i}{2}\right) - 1 \right) \tag{E.2}$$

Coefficient H_{ii}

$$H_{ii} = \int_{\mathcal{C}_i} -\frac{1}{2\pi} \frac{\partial \ln(r_i)}{\partial \boldsymbol{n}} \mathrm{d}l_i \tag{E.3}$$

De la même façon, en séparant l'intégrale (E.3) sur les trois sous-domaines et en remarquant que la fonction ϕ est symétrique de part et d'autre des domaines $\mathcal{C}_1$ et $\mathcal{C}_2$ (c'est-à-dire $\partial\phi/\partial\boldsymbol{n} = 0$ sur ces deux domaines), on obtient l'expression suivante pour H_{ii} après passage à la limite :

$$H_{ii} = -\frac{1}{2} \tag{E.4}$$

E.1.2 Cas des coefficients extra-diagonaux

Dans le cas où $i \neq j$, la source est placée sur un élément différent de l'élément j considéré, les intégrandes de (3.144) ne sont alors pas singuliers. Le paramétrisation du problème est donnée en figure E.2. Le point de coordonnées (x_l, y_l) est tout d'abord défini comme le projeté orthogonal de (x_i, y_i) sur la droite passant par le nœud (x_j, y_j) de l'élément j et de direction $\boldsymbol{t}$ la direction tangentielle de ce dernier. Le repère local $(\boldsymbol{e}_d, \boldsymbol{e}_l)$ est alors défini avec la même orientation que le repère $(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{t})$. En conséquence, les longueurs algébriques l_1 et l_2 sont définies par rapport aux extrémités respectives de l'élément j.

Coefficient G_{ij}

$$\begin{aligned} G_{ij} &= \int_{\mathcal{C}_j} -\frac{1}{2\pi} \ln(r_i)\, \mathrm{d}l_j \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_{l_1}^{l_2} \ln\left(\sqrt{d_j^2 + l^2}\right) \mathrm{d}l \\ &= -\frac{1}{2\pi} \left(l_2 \ln(r_2) - l_1 \ln(r_1) - L_j + d_j \beta_{ij} \right) \end{aligned} \tag{E.5}$$

avec $L_j = l_2 - l_1$ la longueur de l'élément j et β_{ij} l'angle apparent de l'élément j vu depuis le nœud i et défini comme :

$$\beta_{ij} = \arctan\left(\frac{l_2}{d_j}\right) - \arctan\left(\frac{l_1}{d_j}\right) \tag{E.6}$$

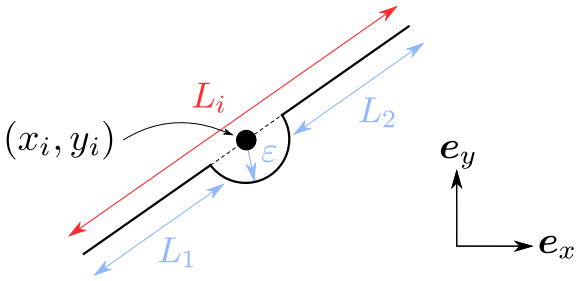


FIGURE E.1 – Paramétrisation de l'élément i (de longueur L_i) pour le calcul de G_{ii} et H_{ii}.

Coefficient H_{ij}

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \int_{\mathcal{C}_j} -\frac{1}{2\pi} \frac{\partial \ln(r_i)}{\partial \boldsymbol{n}} \, \mathrm{d}l_j \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{C}_j} \frac{\partial \ln(r_i)}{\partial r_i} \frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial \boldsymbol{n}} \, \mathrm{d}l_j \end{aligned} \tag{E.7}$$

En remarquant que $\mathrm{d}l_j = \mathrm{d}l$ et $\partial \boldsymbol{e}_r / \partial \boldsymbol{n} = \cos(\theta_i) = d_j / r_i$ avec $\boldsymbol{e}_r$ le vecteur unitaire dans la direction de r_i, on obtient après calcul :

$$H_{ij} = -\frac{1}{2\pi} \beta_{ij} \tag{E.8}$$

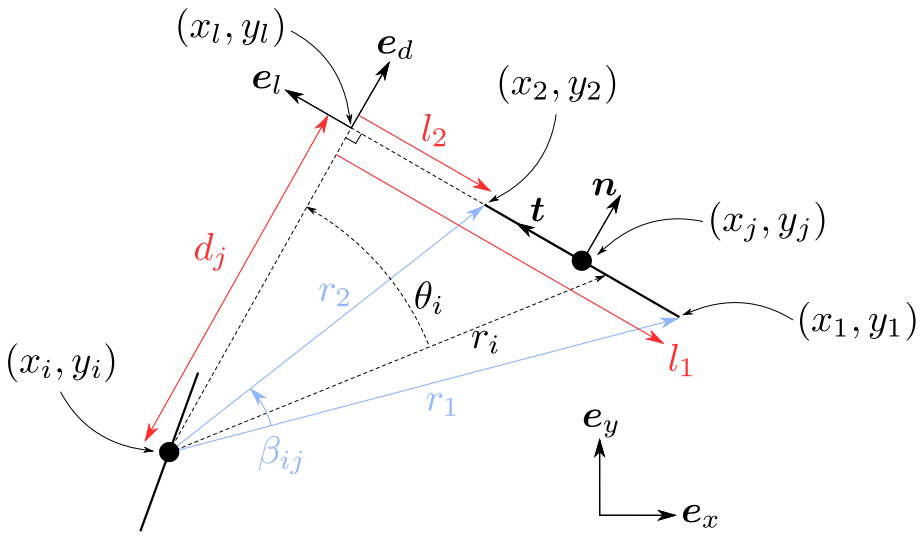


FIGURE E.2 – Paramétrisation des éléments i et j pour le calcul de G_{ij} et H_{ij}. L'élément j voit son nœud placé en (x_j, y_j) et ses extrémités en (x_1, y_1), (x_2, y_2).

En résumé, on a :

$$G_{ij} = \begin{cases} -\dfrac{1}{2\pi} L_i \left(\ln\left(\dfrac{L_i}{2}\right) - 1 \right) & \text{si } i = j \\ -\dfrac{1}{2\pi} \left(l_2 \ln(r_2) - l_1 \ln(r_1) - L_j + d_j \beta_{ij} \right) & \text{si } i \neq j \end{cases} \tag{E.9}$$

$$H_{ij} = \begin{cases} -\dfrac{1}{2} & \text{si } i = j \\ -\dfrac{1}{2\pi} \beta_{ij} & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

E.2 Expression des éléments de matrice E_{ij} et F_{ij}

Dans cette section, on s'intéresse à déterminer l'expression des intégrales (3.147) permettant d'obtenir les éléments de matrice E_{ij} et F_{ij} pour des éléments finis sur lesquels la solution est supposée être constante. Ces intégrales donnent l'influence de l'élément j sur un point d'indice i (où est placée une source).

$$E_{ij} = \int_{\mathcal{C}_j} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\chi}}\right)_i \mathrm{d}l_j \quad , \quad F_{ij} = \int_{\mathcal{C}_j} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial \boldsymbol{\chi} \partial \boldsymbol{n}}\right)_i \mathrm{d}l_j \tag{3.147}$$

Ces éléments de matrices permettent notamment de déterminer la dérivée du potentiel dans une direction quelconque $\boldsymbol{\chi}$. En reprenant les notations de la figure E.2, l'objectif du travail qui suit est d'exprimer les dérivées du potentiel au point (x_i, y_i) dans les deux directions $\boldsymbol{e}_x$ et $\boldsymbol{e}_y$ pour permettre *in fine* d'y exprimer le vecteur flux $\boldsymbol{q}$.

$$\boldsymbol{q} \propto \frac{\partial p}{\partial x}\boldsymbol{e}_x + \frac{\partial p}{\partial y}\boldsymbol{e}_y \tag{E.10}$$

Pour cela, il est plus aisé de commencer par déterminer les composantes de $\boldsymbol{q}$ dans le repère local $(\boldsymbol{e}_d, \boldsymbol{e}_l)$ pour ensuite les exprimer dans le repère global $(\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y)$ (Beer *et al.*, 2008).

$$\boldsymbol{q} \propto \frac{\partial p}{\partial d}\boldsymbol{e}_d + \frac{\partial p}{\partial l}\boldsymbol{e}_l = \left(\frac{\partial p}{\partial d}n_x - \frac{\partial p}{\partial l}n_y\right)\boldsymbol{e}_x + \left(\frac{\partial p}{\partial d}n_y + \frac{\partial p}{\partial l}n_x\right)\boldsymbol{e}_y \tag{E.11}$$

Ces opérations nécessitent alors d'exprimer les éléments de matrice E_{ij} et F_{ij} pour les deux directions distinctes $\boldsymbol{e}_d$ et $\boldsymbol{e}_l$. En effet, en adoptant la notation avec les exposants (d) et (l) pour désigner une dérivation selon les directions $\boldsymbol{e}_d$ et $\boldsymbol{e}_l$ respectivement, on a :

$$\left(\frac{\partial p}{\partial d}\right)_i = E_{ij}^{(d)} \left(\frac{\partial p}{\partial n}\right)_j - F_{ij}^{(d)} p_j \tag{E.12a}$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial l}\right)_i = E_{ij}^{(l)} \left(\frac{\partial p}{\partial n}\right)_j - F_{ij}^{(l)} p_j \tag{E.12b}$$

E.2.1 Cas de la direction $\boldsymbol{e}_d$

Pour les calculs ci-après, on remarquera que le vecteur unitaire radial s'exprime comme $\boldsymbol{e}_r = \cos(\theta_i)\boldsymbol{e}_d - \sin(\theta_i)\boldsymbol{e}_l$ dans le repère local $(\boldsymbol{e}_d, \boldsymbol{e}_l)$, et que $\cos(\theta_i) = d_j/r_i$ et $\sin(\theta_i) = l/r_i$.

Coefficient $E_{ij}^{(d)}$

$$\begin{aligned} E_{ij}^{(d)} &= \int_{\mathcal{C}_j} -\frac{1}{2\pi}\frac{\partial \ln(r_i)}{\partial \boldsymbol{e}_d}\,\mathrm{d}l_j \\ &= -\frac{1}{2\pi}\int_{\mathcal{C}_j} \frac{\partial \ln(r_i)}{\partial r_i}\frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial \boldsymbol{e}_d}\,\mathrm{d}l_j \\ &= -\frac{1}{2\pi}\beta_{ij} \end{aligned} \tag{E.13}$$

Coefficient $F_{ij}^{(d)}$

$$\begin{aligned} F_{ij}^{(d)} &= \int_{\mathcal{C}_j} -\frac{1}{2\pi} \frac{\partial^2 \ln(r_i)}{\partial \boldsymbol{e}_d \partial \boldsymbol{n}} \, \mathrm{d}l_j \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{C}_j} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{e}_d} \left(\frac{d_j}{r_i^2} \right) \mathrm{d}l_j \\ &= -\frac{1}{2\pi} \left(\frac{l_1}{r_1^2} - \frac{l_2}{r_2^2} \right) \end{aligned} \tag{E.14}$$

E.2.2 Cas de la direction $\boldsymbol{e}_l$

De manière similaire, on obtient :

Coefficient $E_{ij}^{(l)}$

$$\begin{aligned} E_{ij}^{(l)} &= \int_{\mathcal{C}_j} -\frac{1}{2\pi} \frac{\partial \ln(r_i)}{\partial \boldsymbol{e}_l} \, \mathrm{d}l_j \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{C}_j} \frac{\partial \ln(r_i)}{\partial r_i} \frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial \boldsymbol{e}_l} \, \mathrm{d}l_j \\ &= -\frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{r_1}{r_2} \right) \end{aligned} \tag{E.15}$$

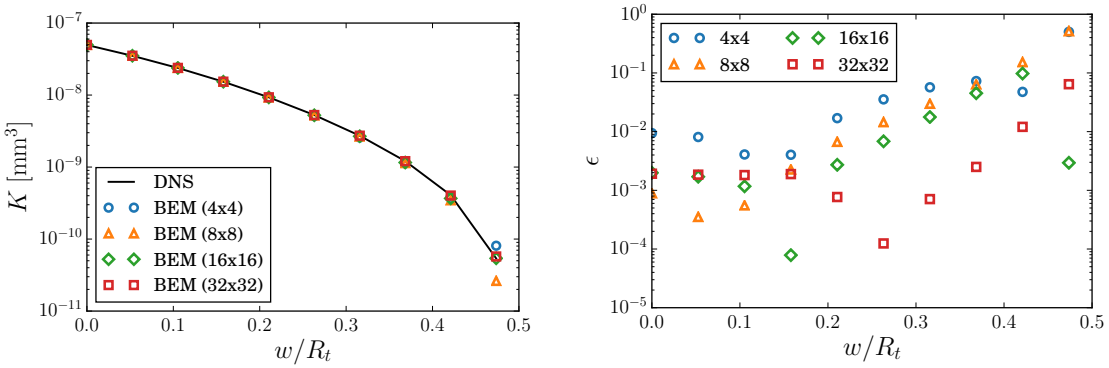
Coefficient $F_{ij}^{(l)}$

$$\begin{aligned} F_{ij}^{(l)} &= \int_{\mathcal{C}_j} -\frac{1}{2\pi} \frac{\partial^2 \ln(r_i)}{\partial \boldsymbol{e}_l \partial \boldsymbol{n}} \, \mathrm{d}l_j \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{C}_j} \frac{\partial}{\partial r_i} \left(\frac{d_j}{r_i^2} \right) \frac{\partial \boldsymbol{e}_r}{\partial \boldsymbol{e}_l} \, \mathrm{d}l_j \\ &= -\frac{1}{2\pi} \left(\frac{d_j}{r_1^2} - \frac{d_j}{r_2^2} \right) \end{aligned} \tag{E.16}$$

Annexe F

Exemple supplémentaire de la méthode à deux échelles

Cette annexe présente un exemple de problème résolu par la méthode à deux échelles de la section 3.3. Pour cela, on considère une surface fractale auto-affine. Ce type de surface présente une invariance d'échelle par dilatation (caractérisée par l'exposant de rugosité, ou exposant de Hurst), et se rencontre dans les fractures de roches par exemple (Plouraboué *et al.*, 1995; Candela *et al.*, 2009). On génère alors une telle surface, z, statistiquement isotrope et d'exposant de Hurst 0,6 sur une grille de $2\,049 \times 2\,049$ points en utilisant le programme proposé dans Candela *et al.* (2009). La rugosité totale du profil est fixée à $R_t = 17{,}2$ µm. Le champ des ouvertures est déduit en imposant un déplacement w de cette surface rugueuse contre un plan lisse, et en utilisant un modèle d'érosion. Le champ des ouvertures obtenu est présenté sur la figure F.2 pour quelques valeurs du déplacement adimensionnel w/R_t. L'écoulement est ensuite calculé par simulation directe et par la méthode à deux échelles avec un modèle de glissement de premier ordre. Pour cette dernière, quatre pavages réguliers sont utilisés : 4×4, 8×8, 16×16 et 32×32 pavés. De plus, la discrétisation du contour de chaque pavé par 64 éléments finis de frontière permet d'obtenir une valeur de transmissivité mégascopique convergée. Enfin, l'écoulement d'hélium à température ambiante est considéré, avec les conditions limites $P_i = 2 \cdot 10^5$ Pa et $P_e = 10^5$ Pa.



(a) Transmissivité apparente.

(b) Écart relatif entre DNS et BEM.

Figure F.1 – Transmissivité apparente de la surface fractale en fonction de l'écrasement adimensionnel pour la simulation directe (DNS) et la méthode à deux échelles (BEM) avec les quatre pavages. L'écart relatif entre DNS et BEM est également présenté pour les quatre pavages.

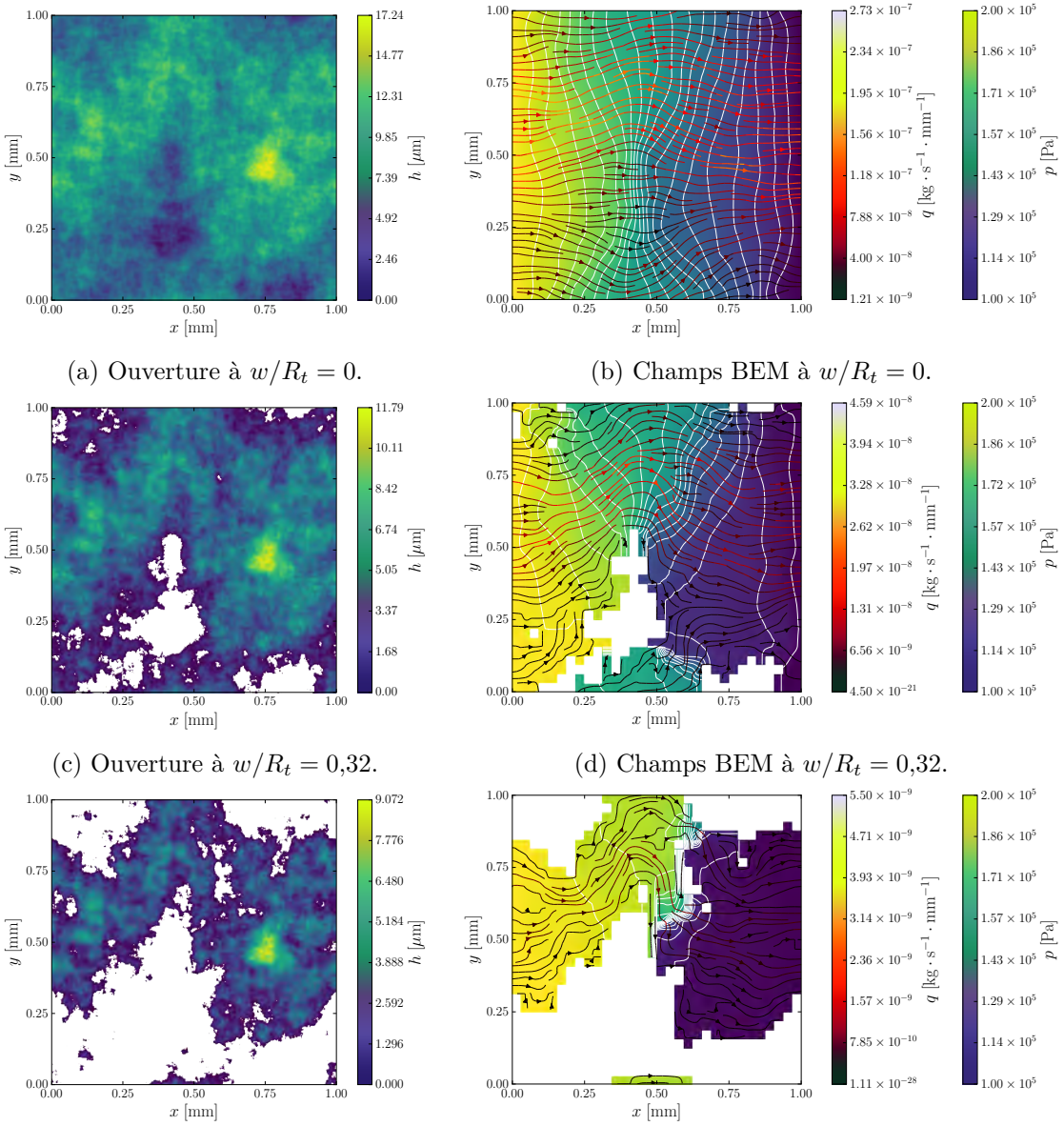
La figure F.1 montre l'évolution de la transmissivité apparente de la fracture en fonction de l'enfoncement adimensionnel, calculée par la simulation directe ou la méthode à deux échelles pour différents pavages. L'écart relatif correspondant entre simulation directe et méthode à deux échelles est également présenté, en prenant la simulation directe pour référence. Clairement, l'accord entre simulation directe et méthode à deux échelles est bon. Aux petits écrasements, tous les pavages donnent un écart de moins de 1%. Aux

écrasements plus importants, l'écart a tendance à augmenter. Ceci est dû à la présence toujours plus importante de constrictions critiques, qui dominent l'écoulement global dans ces régimes. La figure F.2 présente les champs de pression et de lignes de courant calculés par la méthode à deux échelles avec le pavage le plus fin. En particulier proche du seuil de percolation à $w/R_t = 0{,}47$, on remarque la présence de deux constrictions, où la majeure partie de la différence de pression globale est concentrée. Pour améliorer le comportement global dans ces régimes, il est possible d'augmenter le nombre de pavés, pour décrire le champ de tenseurs plus finement. Comme montré sur la figure F.1, cela permet généralement, à un enfoncement donné, de réduire l'écart relatif. Pour la surface étudiée, la pavage le plus fin permet d'obtenir un écart maximal de 7% sur toute la plage d'enfoncement. Ces résultats montrent la robustesse de la méthode à deux échelles en régime glissant. En particulier, l'effet de considérer des propriétés de transport uniformes par morceaux semble avoir une faible influence sur la transmissivité globale, tant que l'écoulement n'est pas dominé par des constrictions.

Pour illustrer le gain de temps apporté par la méthode à deux échelles, les temps de calcul requis sont présentés dans le tableau F.1, bien qu'ils soient dépendants du matériel utilisé et de la manière de programmer. Le code DNS est exécuté en séquentiel, la plupart du temps se passant dans la résolution du système linéaire par gradient conjugué. Pour le code BEM, il est possible de calculer les tenseurs de transmissivité en parallèle. Les simulations sont alors lancées sur un ordinateur de bureau, en utilisant quatre processeurs. Pour le pavage le plus fin, on remarque alors que le code BEM permet un gain de temps d'un facteur vingt. Raffiner le pavage fait décroître le temps nécessaire, car la complexité du calcul des tenseurs est réduite (moins de points dans chaque pavé). Un inconvénient est que cela augmente la taille du système linéaire à résoudre, et surtout le temps de création de ce système, qui est une étape importante lorsque le nombre d'éléments devient grand. Cet effet n'est cependant pas observable ici, la taille du système restant modeste, contrairement à la surface utilisée dans la section 3.4.

	Temps [min]	
Pavage	BEM	DNS
4×4	49 (10)	121 (20)
8×8	24 (4)	
16×16	7 (1)	
32×32	6 (1)	

Tableau F.1 – Temps de calcul moyen selon la méthode utilisée (BEM ou DNS) pour les quatre pavages. L'écart type est donné entre parenthèses.



(a) Ouverture à $w/R_t = 0$.

(b) Champs BEM à $w/R_t = 0$.

(c) Ouverture à $w/R_t = 0{,}32$.

(d) Champs BEM à $w/R_t = 0{,}32$.

(e) Ouverture à $w/R_t = 0{,}47$.

(f) Champs BEM à $w/R_t = 0{,}47$.

FIGURE F.2 – Évolution du champ des ouvertures de la surface fractale en fonction de l'écrasement, et champs de pression et de lignes de courant associés, calculés par la méthode à deux échelles avec 32×32 pavés.

Annexe G

Modèle réduit de contact entre surfaces rugueuses

Le modèle réduit de contact (MR) entre surfaces rugueuses au motif spiralé est exposé, son développement a fait l'objet de travaux antérieurs à ce travail de thèse. La connaissance du champ des ouvertures entre deux surfaces rugueuses est d'une importance capitale en étanchéité, car la transmissivité du contact rugueux dépend fortement de ce dernier. L'obtention de ce champ des ouvertures à l'interface joint–bride est un problème conséquent par la simulation numérique de part la nature multi-échelle des surfaces mises en jeu. Avec la méthode des éléments finis par exemple, la discrétisation nécessaire mènerait rapidement à la manipulation de plusieurs milliards de degrés de liberté. Ainsi, la création de modèles réduits simplifiés de contact apparaît comme une approche envisageable afin d'entrevoir l'analyse sur des surfaces de grandes dimensions.

G.1 Généralités sur les surfaces rugueuses spiralées

L'étude de la mécanique du contact à l'interface joint–bride et la création d'un modèle réduit nécessite la connaissance topographique des surfaces qui entreront en contact. Dans ses travaux de thèse, Tlili (2013) a concentré son étude sur des brides obtenues par un procédé de tournage, et donnant un motif d'usinage au caractère principalement spiralé, très recherché en étanchéité. Ce type de surface présente également d'autres défauts de formes tels que de l'ondulation radiale et circonférentielle, de plus grande longueur d'onde que les stries d'usinage, ainsi que des aspérités de plus petite longueur d'onde. Un exemple d'une telle surface est présenté sur la figure G.1 sous forme « déroulée » dans la direction des stries, au nombre de sept. Afin de faciliter la visualisation, la direction z est ici fortement dilatée, bien qu'étant de l'ordre de quelques micromètres dans des situations réelles.

Un profil radial (dans la direction perpendiculaire aux stries) a été extrait et est représenté en haut à droite sur la figure. Les stries sont clairement visibles, formant des creux et des pics caractéristiques. La profondeur et la forme de ces creux sont directement liées aux paramètres d'usinage et de l'outil coupant utilisé. L'ondulation radiale est également représentée en orange et est quant à elle due principalement à des défauts de type vibrations lors du tournage.

Lors du serrage d'une surface spiralée avec un antagoniste, le contact va en premier lieu s'établir au niveau des pics du profil, rendant celui-ci très localisé, avec des pressions de contact pouvant y être élevées. Au fur et à mesure de l'écrasement, les creux des stries vont se boucher et les zones de contact vont s'étendre, laissant un espace de plus en plus réduit pour la circulation du fluide.

G.2 Modèle réduit de contact

L'objectif d'un modèle réduit est l'obtention du champ des ouvertures persistant à l'interface entre le joint d'étanchéité et la bride, en fonction de la pression nominale (ou pression d'assise) appliquée. Pour un déplacement vertical de bride donné, le modèle réduit

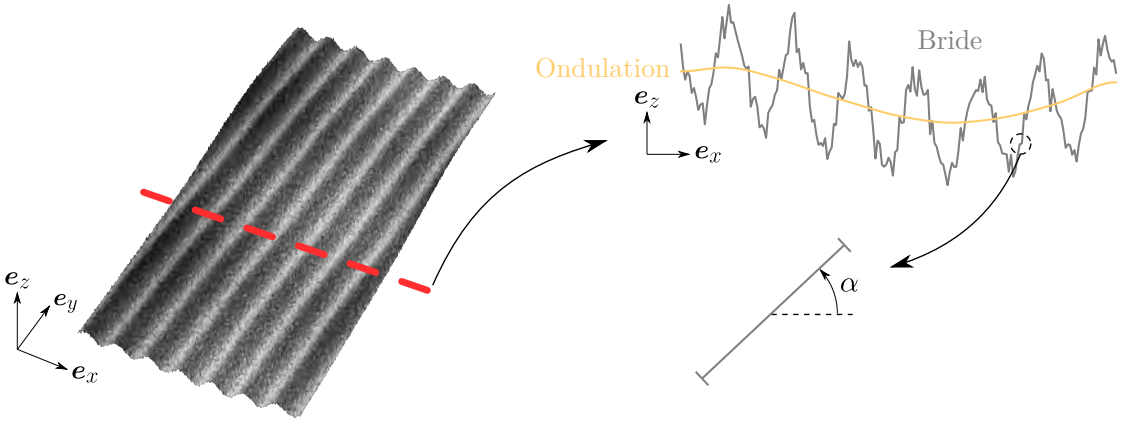


FIGURE G.1 – Illustration de la surface d'une bride rugueuse au motif spiralé sous forme « déroulée ». En haut à droite, schéma d'un profil de rugosité dans la direction x ainsi que l'ondulation correspondante. En bas à droite, schéma d'une aspérité vue comme un indenteur.

doit donc être capable de fournir une information sur la morphologie de la surface déformée du joint ainsi que sur l'effort de réaction à cet enfoncement.

Pour le développement du modèle réduit de contact entre deux surfaces (typiquement, une bride et un joint), nous faisons les hypothèses suivantes :

— La bride est considérée comme rigide et rugueuse. Cette hypothèse se justifie généralement par la plus grande dureté de la bride (bien souvent en acier) par rapport au joint, généralement fait d'un matériau plus mou, mais aussi ayant un plus grand module de YOUNG.

— Le joint est considéré comme parfaitement lisse et ayant un comportement élasto-plastique avec écrouissage. Il est donc le milieu qui va se déformer lors du contact. La loi de comportement élasto-plastique du joint est identifiée à une loi de HOLLOMON :

$$\sigma = \begin{cases} E\varepsilon & \text{si } \varepsilon < \sigma_y/E \\ {\sigma_y}^{1-n}(E\varepsilon)^n & \text{si } \varepsilon \geqslant \sigma_y/E \end{cases} \tag{G.1}$$

dans laquelle σ est la contrainte équivalent de VON-MISES, σ_y est la limite d'élasticité, E le module de YOUNG, ε la déformation totale équivalente et n est le coefficient d'écrouissage.

— Compte-tenu de l'anisotropie de la surface apportée par les stries d'usinage, le modèle réduit considère que la surface mesurée est constituée de profils de rugosités radiaux mis en série dans la direction y (voir figure G.1). De plus, pour un diamètre de bride grand devant la portée et une ondulation circonférentielle de période assez importante, nous faisons l'hypothèse que la déformation sous chaque profil peut être vue comme de la déformation plane et qu'il n'y a pas d'interactions entre les profils selon la direction y. En conséquence, il suffit de décrire la déformation bidimensionnelle sous chacun des profils séparément.

Sous ces hypothèses, le modèle réduit pour chacun des profils est développé dans les sections ci-dessous.

G.2.1 Pression de contact entre bride et joint

Dans ses travaux, Tlili (2013) a suggéré de voir le profil de rugosité comme la juxtaposition d'indenteurs dans la direction x (voir figure G.1). Cette vision a l'avantage de permettre l'utilisation des résultats issus de la théorie de l'indentation des matériaux pour décrire le comportement du joint sous charge, notamment en termes de pression de contact sous l'indenteur qui permet de remonter à l'effort de serrage global. Nous adoptons ici cette

même vision.

Pour un indenteur diédrique d'angle α au contact d'un matériau déformable obéissant à une loi de Hollomon, un modèle de pression d'indentation est développé. Ce modèle est obtenu par analogie entre l'indentation et l'expansion d'une cavité élasto-plastique sous le contact, assimilable à un cylindre sous pression (Johnson, 1987). En se basant sur les travaux d'une expansion de cavité sphérique de Gao *et al.* (2006) et en utilisant les équations de la déformation élasto-plastique d'un cylindre sous pression de Gao (2003), on montre que la pression de contact sous l'indenteur, assimilable à une dureté $\mathcal{H}$ du matériau, est donnée par :

$$\mathcal{H} = \frac{\sigma_y}{\sqrt{3}} \left(1 - \frac{1}{n} + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{1}{n} \right) \left(\frac{2}{\pi\sqrt{3}} \frac{E \tan(\alpha)}{\sigma_y} \right)^n \right) \tag{G.2}$$

Cette relation de dureté en indentation diédrique est utilisée dans le modèle réduit pour déterminer les pressions de contact locales des zones en contact et remonter à l'effort de serrage global appliqué sur la bride. Il est à noter que cette dureté est indépendante de l'enfoncement de l'indenteur et ne dépend que des paramètres matériaux de l'indenté et de la géométrie de l'indenteur.

G.2.2 Déformation du joint sous un profil

L'approche du modèle réduit est basée sur la séparation des échelles de longueurs du profil de rugosité strié :

— Les rugosités contribuent à la déformation élasto-plastique locale du joint.

— L'ondulation contribue à une déformation élastique globale du joint.

de telle sorte que le déplacement de la surface soit donné par la contribution de trois composantes, qui sont détaillées ci-contre. De plus, lorsqu'un indenteur est en contact, on suppose que la pression de contact sur ce dernier est assimilable à la dureté du matériau donnée par la relation (G.2). En supposant des petites déformations de la surface du joint, le déplacement en un point est donné par la somme des contributions apportées par chaque indenteur en contact.

G.2.2.1 Contribution élastique des rugosités

Lorsqu'un indenteur arrive au contact, sa contribution élastique au déplacement de la surface du joint, $w_e(x)$, est donnée sous forme intégrale par Johnson (1987) pour un profil de pression de contact quelconque. Dans le cas de l'indentation, la pression de contact est uniforme, égale à la dureté $\mathcal{H}$ et s'applique sur une largeur de contact $2a$. Pour un massif d'épaisseur finie H_0 et de coefficient de Poisson ν, le déplacement vertical est alors donné par :

$$w_e(x) = -\frac{4}{\pi} \frac{1-\nu^2}{E} \int_0^{+\infty} \frac{\cosh(2H_0\xi) - 1}{\sinh(2H_0\xi) + 2H_0\xi} \frac{\sin(a\xi)\cos(x\xi)}{\xi^2} \mathcal{H} \, \mathrm{d}\xi \tag{G.3}$$

Il y a donc proportionnalité entre le déplacement vertical et la pression de contact.

G.2.2.2 Contribution plastique des zones de contact

Lorsqu'un indenteur arrive en contact, la déformation produite en son voisinage n'est pas uniquement élastique mais élasto-plastique. Le champ de déformation y est complexe et ne possède pas d'expression analytique. Ce comportement élasto-plastique va contribuer à produire un déplacement vertical local de la surface proche des zones de contact. Afin de décrire le déplacement de la surface, le champ de contraintes élasto-plastiques est approximé autour de chaque zone de contact (et non-pas au niveau de chaque indenteur en contact) par un modèle d'expansion de cavité cylindrique développé par Gao (2003)

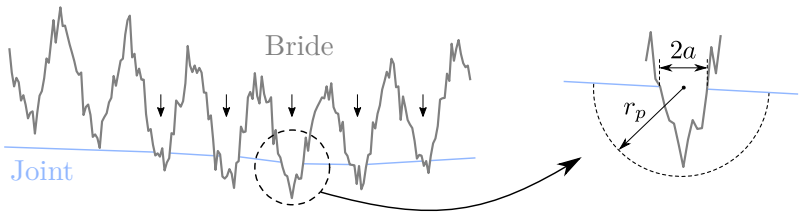


FIGURE G.2 – Illustration des zones de contact (ici au nombre de cinq, indiquées par des flèches) formées autour des pics du profil. Autour de chaque zone en contact est définie une région plastique de rayon r_p par rapport à la largeur $2a$ de cette zone.

(voir le schéma en figure G.2). Ce modèle a l'avantage de décrire les contraintes en faisant intervenir le comportement plastique non-linéaire du matériau via le coefficient d'écrouissage n. La zone d'influence de ce modèle pour chaque zone de contact de largeur $2a$ est déterminée par le rayon de plastification r_p. Le rayon de plastification est déterminé, en indentation, selon Gao (2003) par la relation suivante :

$$\left(\frac{r_p}{a}\right)^2 = \frac{2}{\pi\sqrt{3}}\frac{E\tan(\alpha)}{\sigma_y} \tag{G.4}$$

Le déplacement vertical apporté par cette composante plastique, $w_p(x)$, est approximé comme :

$$w_p(x) = \frac{3(1-2\nu)}{E}\int_0^{\sqrt{r_p^2-x^2}} \sigma_{yy}(x,z)\,\mathrm{d}z \tag{G.5}$$

où σ_{yy} est la composante longitudinale des contraintes, correspondant à la contrainte moyenne, qui s'exprime comme (Gao, 2003) :

$$\sigma_{yy} = \begin{cases} \dfrac{\sigma_y}{\sqrt{3}}\left(1-\dfrac{1}{n}\right)\left(\left(\dfrac{r_p}{a}\right)^{2n}-1\right) & \text{si } 0 \leqslant r \leqslant a \\ \dfrac{\sigma_y}{\sqrt{3}}\left(1-\dfrac{1}{n}\right)\left(\left(\dfrac{r_p}{r}\right)^{2n}-1\right) & \text{si } a < r \leqslant r_p \end{cases} \tag{G.6}$$

avec le rayon r tel que $r^2 = x^2 + z^2$.

G.2.2.3 Contribution élastique de l'ondulation

L'introduction de l'ondulation permet de prendre en compte la contribution de la grande échelle du profil.

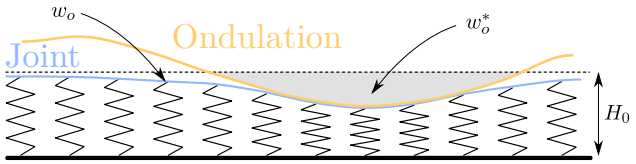


FIGURE G.3 – Schéma du modèle de fondation élastique pour le profil d'ondulation.

On considère que l'ondulation du profil impose un déplacement $w_o^*(x)$ par rapport à la surface initiale du joint dans une certaine zone (zone grise sur la figure G.3). On cherche alors la pression de contact qui va permettre d'imposer un tel déplacement. Pour cela, un modèle de fondation élastique est utilisé (Jones et Xenophontos, 1977; Straughan, 1990; Turhan, 1992; Teodoru et Muşat, 2010). Ce modèle consiste en un matelas de ressorts qui donne une raideur normale k_n au contact. L'interaction entre les ressorts est prise en compte via l'introduction d'une raideur de cisaillement k_t. D'après Ghani Razaqpur et

Shah (1991), la pression de contact correspondante, p_o^*, peut alors s'exprimer de la manière suivante :

$$p_o^*(x) = k_n w_o^*(x) - k_t \frac{\mathrm{d}^2 w_o^*}{\mathrm{d}x^2} \tag{G.7}$$

avec

$$k_n = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \frac{\gamma}{H_0} \frac{\cosh(\gamma)\sinh(\gamma)+\gamma}{2\sinh^2(\gamma)} \tag{G.8a}$$

$$k_t = \frac{E}{2(1+\nu)} \frac{H_0}{\gamma} \frac{\cosh(\gamma)\sinh(\gamma)-\gamma}{2\sinh^2(\gamma)} \tag{G.8b}$$

$$\left(\frac{\gamma}{H_0}\right)^2 = \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \int \left|\frac{\mathrm{d}^2 w_o^*}{\mathrm{d}x^2}\right|^2 \mathrm{d}x \left(\int w_o^{*2}(x)\,\mathrm{d}x\right)^{-1} \tag{G.8c}$$

Une fois la pression de contact connue, on remonte au déplacement apporté par l'ondulation à la surface du joint, $w_o(x)$, par une formule similaire à (G.3), adaptée pour la variation de volume. C'est-à-dire que l'on suppose que l'ondulation va faire varier le volume du massif par compression, et que cette variation va être accommodée par un déplacement vertical uniquement, se traduisant en le déplacement résultant $w_o(x)$ à la surface du joint. D'autre part, on considère que la pression $p_o^*(x)$ est uniforme par morceaux sur l'ensemble des cellules de largeur $2a$ qui constituent les éléments de discrétisation. Pour un élément, on a donc :

$$w_o(x) = -\frac{4}{\pi} \frac{(1+\nu)(1-2\nu)}{E} \int_0^{+\infty} \frac{\cosh(2H_0\xi)-1}{\sinh(2H_0\xi)+2H_0\xi} \frac{\sin(a\xi)\cos(x\xi)}{\xi^2} p_o^* \,\mathrm{d}\xi \tag{G.9}$$

La procédure employée par le modèle pour déterminer l'évolution du déplacement de la surface du joint (et donc du champ des ouvertures) en fonction de la charge de serrage est la suivante :

1. On procède de façon incrémentale jusqu'à atteinte d'un déplacement vertical total de la bride, w, prescrit à l'avance. Un incrément de déplacement vertical de la bride rigide, δw, est appliqué.
2. Les indenteurs en contact avec le joint sont détectés, tout comme les zones de contact (figure G.2). Le déplacement imposé par l'ondulation est également détecté (figure G.3).
3. Le déplacement total de la surface pour cet incrément, $w_s(x)$, est la somme des trois contributions (élastique (G.3), plastique (G.5), ondulation (G.9)) apportée par tous les i éléments détectés comme « en contact » à l'étape précédente :

$$w_s(x) = \sum_i w_{ei}(x) + w_{pi}(x) + w_{oi}(x) \tag{G.10}$$

4. L'effort de serrage est déterminé pour cet incrément par intégration de la dureté sur la surface en contact. Le champ des ouvertures est également évalué.
5. Si le déplacement de corps rigide vertical total de la bride, w, prescrit en début d'algorithme n'est pas encore atteint, on retourne à l'étape 1 en appliquant un nouvel incrément d'enfoncement supplémentaire.

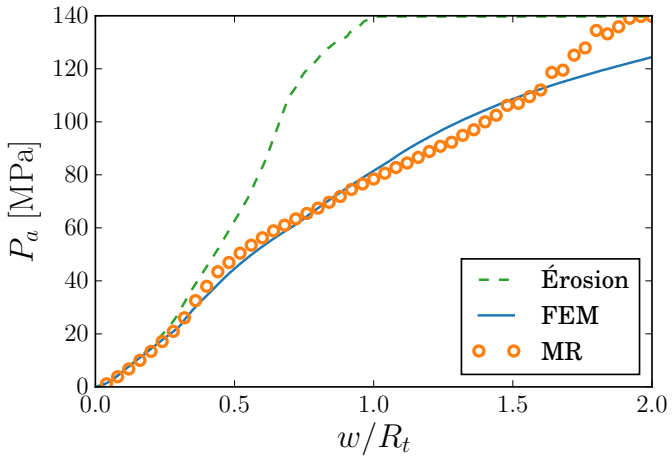


FIGURE G.4 – Évolution de la pression d'assise sur le profil en fonction du déplacement adimensionnel imposé sur la bride. Les résultats obtenus par trois méthodes de calcul sont proposés : les éléments finis (FEM), le modèle réduit (MR) et un modèle d'érosion.

G.2.3 Exemple de problème résolu sur un profil

On présente dans cette partie les résultats obtenus par le modèle réduit sur un profil de rugosité donné. Les résultats sont comparés à des simulations aux éléments finis, réalisées en configuration 2D axisymétrique sous le logiciel `Abaqus`, situation de référence. Le profil de rugosité de la bride utilisé est représenté sur la figure G.5. Il présente 10 stries, une rugosité arithmétique R_a de 2 µm et une rugosité totale R_t de 11 µm. Pour le joint déformable, un matériau de type aluminium est utilisé, ayant les propriétés génériques suivantes : $E = 70\,000$ MPa, $\sigma_y = 20$ MPa, $\nu = 0{,}3$ et $n = 0{,}3$.

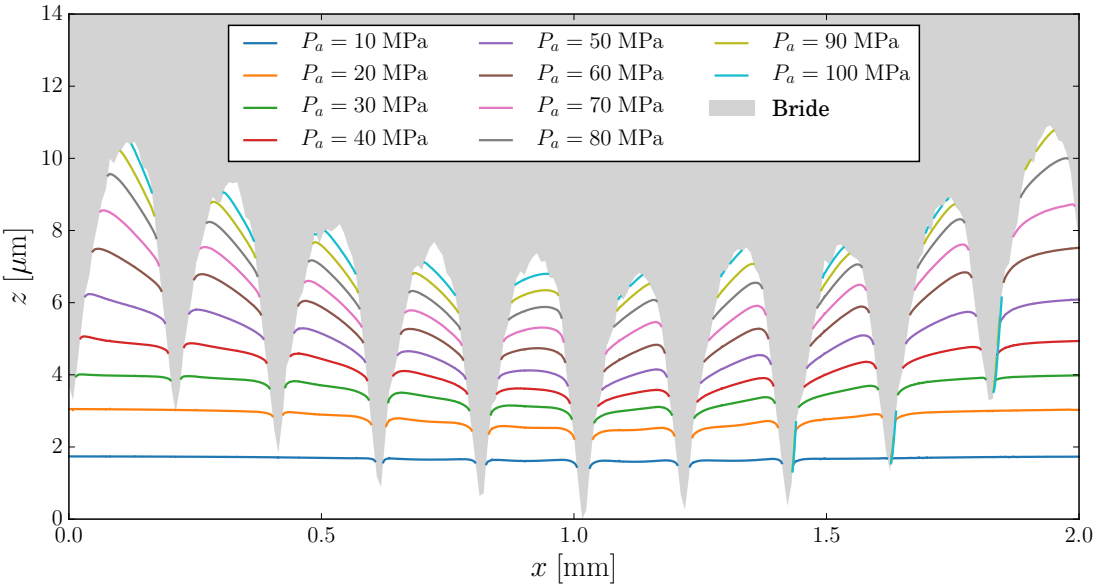
On présente tout d'abord sur la figure G.4 l'évolution de la pression d'assise P_a sur la bride en fonction du déplacement adimensionnel du profil w/R_t. Trois résultats sont présentés, les éléments finis sous `Abaqus` (FEM), le modèle réduit (MR) et un simple modèle d'érosion, correspondant à un comportement purement plastique du matériau (le champ des ouvertures sous le profil est donné par $h = \max(z - w, 0)$). Pour cette grandeur macroscopique qu'est la pression d'assise, on observe un bon accord entre le modèle réduit et les éléments finis jusqu'à un enfoncement d'environ 1,6. Cet enfoncement correspond au bouchage complet d'une strie du profil, une situation délicate à considérer en utilisant la théorie de l'indentation. Il s'agit en effet d'une situation plus proche d'un processus de mise en forme des matériaux. L'accord entre MR et FEM est donc dégradé à fort enfoncement. On remarque toutefois la bonne correction apportée par le modèle réduit par rapport à un simple modèle d'érosion.

On représente maintenant sur la figure G.5, pour les éléments finis G.5a et le modèle réduit G.5b, l'évolution de la position de la surface du joint par rapport au profil de bride (évolution du bouchage des stries) en fonction de la pression d'assise. On note un bouchage progressif, *a priori* plus rapidement atteint pour les stries extrêmes. Une bonne description globale de la déformation du joint est obtenue, des différences persistent néanmoins pour décrire la morphologie relativement complexe de la surface sous les stries (présence de bourrelet, fort cisaillement de la matière). De plus, pour ce profil, le modèle réduit semble sur-estimer l'ouverture sous les stries pour une charge donnée.

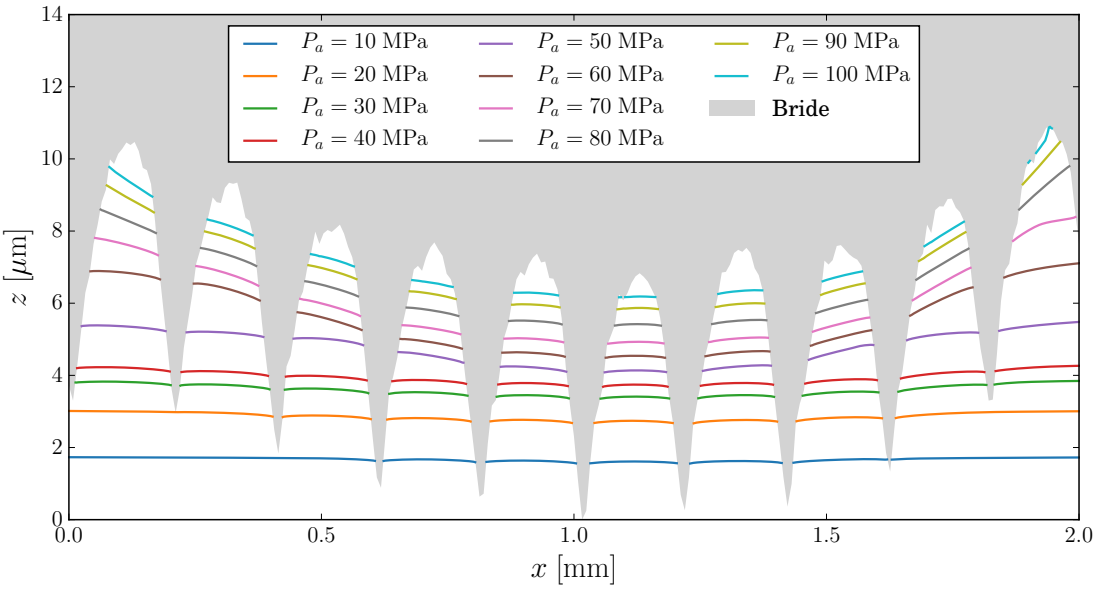
Pour des surfaces complètes tridimensionnelles, des résultats du modèle réduit sont présentés en section 3.4.

En conclusion, on peut dire que l'approche modèle réduit pour décrire l'évolution du champ des ouvertures sous charge semble pertinente. À titre indicatif, le temps de calcul par la simulation par éléments finis est de l'ordre de l'heure, tandis qu'il est de l'ordre de

la minute pour le modèle réduit. Cette situation est avantageuse pour l'étude de surfaces complètes de grandes dimensions. Toutefois, des points d'amélioration du modèle réduit sont envisageables, concernant notamment une meilleure prise en compte de l'effet de la plasticité, la gestion de l'interaction circonférentielle entre les profils, ou encore l'introduction de frottement lors du contact. On peut espérer que ces améliorations offrirons une meilleure description du bouchage des stries à fort écrasement, ce qui est crucial en étanchéité car c'est cette donnée qui va piloter les très petites fuites dans ce régime.



(a) Éléments finis avec `Abaqus`.



(b) Modèle réduit.

FIGURE G.5 – Évolution de la position de la surface du joint (bouchage des stries) en fonction de la pression d'assise sur la bride.