

Contribution à l'étude thermomécanique des cavités réalisées par lessivage dans des formations géologiques salines

Michel Tijani

▶ To cite this version:

Michel Tijani. Contribution à l'étude thermomécanique des cavités réalisées par lessivage dans des formations géologiques salines. Planète et Univers [physics]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2008. tel-00430361

HAL Id: tel-00430361 https://theses.hal.science/tel-00430361

Submitted on 6 Nov 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Habilitation à Diriger des Recherches Université Pierre et Marie Curie

Présentée et soutenue publiquement le 24 avril 2008 par

Michel TIJANI

Spécialité : Sciences de l'Univers

Contribution à l'étude thermomécanique des cavités réalisées par lessivage dans des formations géologiques salines

Jury composé de :

Pierre BEREST	Ecole Polytechnique	Rapporteur
Yves BERTHAUD	Université Pierre et Marie Curie	Examinateur
Françoise HOMAND	Ecole de Géologie de Nancy	Rapporteur
Jack-Pierre PIGUET	Ecole des Mines de Nancy	Rapporteur
Alain TABBAGH	Université Pierre et Marie Curie	Examinateur

A ma femme Edith

Tant que les lois mathématiques se réfèrent à la réalité, elles ne sont pas certaines, et tant qu'elles sont certaines, elles ne se réfèrent pas à la réalité.

Les choses peuvent être rendues aussi simples que possibles, mais pas forcément plus simples.

Albert EINSTEIN



A mon très cher ami et complice Gérard VOUILLE

REMERCIEMENTS

J'ai beaucoup de reconnaissance pour mes professeurs Jean MANDEL et Francis FER qui m'ont fait aimé respectivement la Mécanique des Milieux Continus et la Thérmodynamique Macroscopique (cours à l'École des Mines de Paris).

Mais je n'ai réellement "goûté le sel" de toutes ces belles théories que lorsque j'ai abordé la recherche appliquée. Je suis redevable à divers partenaires industriels de l'immense plaisir que j'ai connu en appliquant de belles théories à des problèmes techniques : ALLIA (problème inverse : déterminer la forme d'un moule d'une pièce de sanitaire pour qu'après cuisson la pièce ait une forme définie à l'avance), LAFARGE (tenue à long terme de revêtements muraux), SOLETANCHE (compactage dynamique des sols) SCHLUMBERGER, GERHART (prospection géophysique par mesure de résistivité électrique), PETROFINA (affaissement de plate-forme pétrolière en mer du nord), ELF AQUITAINE (frottements des tubages dans les puits de forage pétrolier), CCE et communautés nationales et internationales (projets COSA, INTERCLAY, DECOVALEX, BENCHPAR, MODEXREP ...), MDPA et SALINS DU MIDI (stabilité des exploitations minères par chambres et piliers de potasse et de sel gemme), ANDRA, IRSN (comportement des argilites, stockage de déchets nucléraires), INERIS (modélisation des couplages THM), GEOSTOCK, SOLVAY (cavités salines) ... En ce qui concerne les cavités salines, je dois remercier tout particulièrement GAZ DE FRANCE avec qui je travaille depuis 1975 non seulement sur les problèmes relatifs au sel gemme mais aussi sur la modélisation du comportement du polyéthylène (loi intégrée dans VIPLEF3D) et sur des simulations de stockage de gaz en aquifère (couplage HM).

Je remercie tous les membres du Centre de Recherche où je suis en activité depuis 1974 et particulièrement ceux qui ont participé et qui participent à l'axe de recherche "sel". Je remercie les techniciens : préparation des échantillons (choix du liquide de refroidissement des machines), collage des jauges (difficile sur le sel), essais qui, pour satisfaire la recherche, sont souvent nouveaux (fluage par paliers, relaxation DRBI, essai sous contrainte moyenne constante, jauges collées à divers endroits de l'éprouvette ...). Je remercie les chercheurs avec qui je travaille actuellement sur le sel : Dimitri GORDINE, Faouzi HADJ HASSEN et mon jeune complice en géomécanique et modélisation : Ahmed ROUABHI.

Mon très cher ami et complice Gérard VOUILLE! te souviens-tu? Nous étions en visite dans un laboratoire, dans le cadre du projet COSA où il était question d'un "benchmark". Les participants avaient toutes les données d'une expérience à échelle moyenne (structure en sel) et en particulier, la rhéologie du sel nous était fournie sous forme de loi de Norton avec les valeurs des paramètres. Mais, nous deux, nous voulions les résultats des essais de fluage qui ont servi à établir cette loi. Alors, dans cette halle d'essais, nous avons eu la même idée au même moment : aller dans un magasin pour acheter un sac solide pour transporter des échantillons de sel. Nous avons alors participé au "benchmark" à la fois avec la loi qui nous a été recommandée et avec celle de Lemaitre que nous avions ajustée sur nos propres essais de fluage. Ta complicité me manque, mais tu as largement mérité ta retraite.

Je remercie tous les membres du jury qui ont bien voulu examiner cette candidature à une Habilitation à Diriger des Recherches et j'exprime ma gratitude à Pierre BEREST qui m'a honoré en lisant et commentant la première version de ce texte et à Ghislain De MARSILY qui, avec patience, m'a aidé par ses conseils éclairés pour cette version du mémoire.

RESUME

Fruit d'une expérience de recherche de près de 30 ans dans le domaine des cavités salines, ce mémoire présente succinctement le problème industriel à l'origine de mes recherches. Qu'il s'agisse d'exploitation de sel par dissolution ou de cavités de stockage, le problème industriel ouvre en effet de nombreux axes de recherche dans diverses disciplines concernant les géomatériaux avec en particulier un couplage thermomécanique dans un matériau élastoviscoplastique subissant des transformations finies.

La partie "Comportement mécanique des roches salines" rappelle les notions de base de lois de comportement d'un matériau solide et souligne deux difficultés actuelles concernant le sel gemme. Le premier problème est relatif au frettage au niveau des plateaux de la presse au cours des essais classiques de laboratoire qui peut fausser la détermination des lois qui régissent l'endommagement et la rupture de la roche (phénomène non souhaité d'hétérogénéité des contraintes dans l'éprouvette). Une démarche déjà proposée par l'auteur est utilisée pour montrer que les mêmes résultats de laboratoire concernant le phénomène de dilatance (endommagement) peuvent être interprétés par un modèle rhéologique dans lequel le matériau ne subit d'endommagement que lorsque l'une des contraintes principales est une traction. La seconde difficulté relève du caractère restreint de la gamme de validité de certaines lois classiques proposées pour décrire le comportement ductile des roches salines et en particulier la gamme de variation des contraintes (prise en compte des faibles déviateurs). Ce phénomène concernant le comportement des roches salines sous faibles déviateurs était déjà connu et ici, il est illustré par un exemple théorique original.

Le chapitre "Modélisation des ouvrages souterrains" souligne l'intérêt des modélisations 1D (malgré les hypothèses simplificatrices sur la géométrie des ouvrages souterrains) et attire l'attention sur le fait qu'un modèle rhéologique qui ne représente pas correctement le comportement sous faible déviateur peut conduire à des résultats bien différents de ce qui se passe *in situ*. Le problème était déjà connu mais méritait que l'on y insistât avec un exemple qui peut être décliné sous diverses variantes. Dans le cadre général de la thermoélasto-viscoplasticité, il est possible d'expliquer la forte influence des faibles déviateurs sur la variation du volume d'une cavité. Par ailleurs, une méthodologie simple de prise en compte de la phase de lessivage en mécanique est présentée.

On revient alors sur cette mobilité des parois des cavités durant la phase de lessivage dans le chapitre **"Prise en compte du lessivage des cavités salines"** mais cette fois avec l'aspect thermique. En effet, les logiciels qui modélisent le phénomène physico-chimique de dissolution ont besoin de la température dans la cavité avec une bonne précision. Aborder le problème thermique dans sa généralité (2D ou 3D) est pour le moment relativement difficile. Mais l'on peut contourner la difficulté par un modèle qui combine astucieusement des approches 1D cylindrique autour du puits, 1D sphérique autour de la cavité et 0D dans le fluide contenu dans la cavité. Une méthode originale pour le choix du modèle sphérique est décrite. Son utilisation pour un cas réel de cavité de stockage de gaz est encourageante.

MOTS-CLEFS : / Cavités salines / sel gemme / lois de comportement / thermo-élastoviscoplasticité / modélisation 1D / lessivage / frontière mobile / transfert de chaleur /

ABSTRACT

Fruit of about thirty years of experience in the research field of salt caverns, this dissertation presents succinctly the industrial problem at the source of my research. Whatever the considered theme, salt production through the dissolution of rock salt or underground salt cavern storage, the industrial problem open the way for many research axises in different disciplines relating to the study of geomaterials with a particular thermo-mechanical coupling problem in elasto-viscoplastic material submitted to finite transformations.

The part "Mechanical behaviour of rock salt" points out the basic concepts of solid material constitutive behaviour and highlights two ongoing difficulties regarding the specific rock salt behaviour. The first one deals with the end effects during the classical laboratory tests. This problem can distort the determination of constitutive laws that govern the rock damage and failure (non desirable stress heterogeneity phenomenon within the sample). An approach, already presented by the author, is used in order to demonstrate the fact that the same laboratory data concerning the rock salt dilatancy phenomenon can be interpreted with a rheological model which assume that damage can starts when one of the principal stresses is tensional. The second difficulty is related to the restricted character of the validity range of some classical behaviour laws that were proposed to describe the ductile behaviour of rock salt and in particular to the stress variations range (low deviatoric stress range). This phenomenon concerning the rock salt behaviour under small deviatoric stresses is already known. In this work, it will be illustrated by an original theoretical example.

The Chapter "Modelling of underground structures", highlights the interest of 1D modelling approaches (although geometric simplifications) and draw the attention on the fact that a rheological model which represents badly the behaviour under small deviatoric stresses can lead to results well different from what happens in-situ. This problem was already known but deserved that one insists on it by presenting an example which can be declined under various alternatives. In the context of thermo-elasto-viscoplasticity, it is possible to explain the strong influence of small deviatoric stresses on the cavern volume variation. Furthermore, a simple methodology of taking into account the mechanical aspect during the cavern leaching phase is presented.

We reconsider then the problem of the mobility of the cavern boundaries during the leaching phase in the chapter "Leaching phase modelling" but in this case with thermal aspect. Indeed, software which model the physico-chemical dissolution phenomenon need, as an input parameter, the cavern temperature with a good accuracy. For the moment, tackling the general thermal problem (2D or 3D) is relatively difficult. However, we can get round this difficulty by using a model that mix artfully 1D cylindrical approach around the well, 1D spherical approach around the cavern and 0D approach for the fluid within the cavern. An original method for the choice of the spherical model is described. Its use for a real gas storage cavern case is encouraging.

KEYWORDS : / Salt caverns / rock salt / constitutive laws / thermo-elasto-viscoplasticity / 1D modelling / leaching / moving boundary / heat transfer /

SOMMAIRE

1	Int	troduction générale Contexte de ce travail	1 1
	1.1	Position du problème industriel "cavités salines"	3
	1.2	Comportement mécanique des roches salines	5
	1.0	1.3.1 Bhéologie du sel gemme	5
		1.3.2 Indices de fluabilité	5
		1.3.2 Austement des paramètres rhéologiques	6
		134 Bupture et endommagement du sel gemme	8
		1.3.5 Influence de la température	0
		1.3.6 Influence de la seumure	0
	14	Modélisation des ouvrages en couches salines	0
	1.4	141 Approche en symétrie cylindrique ou sphérique	0
		1.4.2 Méthode des Eléments Finis	0
		1.4.2 Methode des Elements Finis	2
	15	Prise en compte du lessivage des cavités salines	2
	1.0	151 Structures à géométries variables	2
		1.5.1 Structures a geometrics variables	2
		1.5.2 Dolution approvide en inceanque	1
			. –1
2	Co	omportement mécanique des roches salines 1	7
	2.1	Philosophie générale 1	.7
		2.1.1 Connaissance des lois de comportement des matériaux : une nécessité ! 1	7
		2.1.2 Détermination des lois de comportement : une utopie!	.9
		2.1.3 Détermination des lois approchées : une gageure !	.9
		2.1.4 Détermination des lois approchées des géomatériaux : un défi! 2	21
	2.2	Comportement ductile des roches salines	22
		2.2.1 Introduction	22
		2.2.2 Prépondérance des déformations non élastiques	23
		2.2.3 Lois classiques d'évolution	24
		2.2.4 Description externe du système	25
		2.2.5 Description interne du système	25
		2.2.6 Le "bon" modèle rhéologique	26
	2.3	Rupture, fluage tertiaire, endommagement, dilatance 2	27
		2.3.1 Observations irréfutables	27
		2.3.2 Réalité des essais classiques	27
	2.4	Exemple de modèle pour la dilatance	29
		2.4.1 Avertissement $2.4.1$ Avertisement $2.4.1$ Avertissement	29
		2.4.2 Principe fondamental	29
		2.4.3 Modèle de Lemaitre modifié avec prise en compte de la traction 3	30
		2.4.4 Test réel de compression simple sur le matériau fictif	31
		2.4.5 Résultats des modélisations	32
	2.5	Retour au comportement ductile	34
	-	2.5.1 Comportement ductile déduit d'essais réels	34
		2.5.2 Ecrouissage isotope ou cinématique ou mixte?	35
		2.5.3 Influence du déviateur des contraintes	36
		2.5.4 Lois de comportement en transformations finies	39
			2

3	M	odélisation des ouvrages en couches salines 43
	3.1	Approche en symétrie cylindrique ou sphérique 43
		3.1.1 Introduction
		3.1.2 Logiciels semi-analytiques
		3.1.3 Choix de la bonne pression P_f
	3.2	Couplage thermo-mécanique
		3.2.1 Introduction
		3.2.2 Déviateur des contraintes à la paroi d'une cavité
		3.2.3 Cavité sphérique en thermo-élasto-viscoplasticité
	3.3	Influence des faibles déviateurs 51
		3.3.1 Définition du problème "réel fictif"
		3.3.2 Essais de laboratoire 51
		3.3.3 Insuffisance du modèle
		$3.3.4 \text{Un autre calage} \qquad 53$
		3.3.5 Ampleur de la zone à faible déviateur significatif
	3.4	Simulation du lessivage 56
		3.4.1 Présentation
		3.4.2 Dépression réduite dans le cas du sel gemme
4	\mathbf{Pr}	ise en compte du lessivage des cavités salines 59
-	4.1	Problème thermique avec frontière mobile
		4.1.1 Evolution réelle de la forme d'une cavité
		4.1.2 Difficultés d'une modélisation 2D/3D
	4.2	Modèle sphérique idoine
		4.2.1 Choix du ravon de la cavité sphérique
		4.2.2 Prise en compte de la température initiale du massif
		4.2.3 Exemple d'application
	4.3	Problèmes thermiques 1D sphériques
		4.3.1 Problème du mur
		4.3.2 Solution du problème par produit de convolution
		4.3.3 Simulation du lessivage par phases
		4.3.4 Comportement thermique post-lessivage
5	Co	nclusions et perspectives 73
	5.1	Présentation
	5.2	Critère de stabilité d'un réseau de cavités salines
	5.3	Bonne loi de comportement rhéologique du sel gemme
	5.4	Modélisation du lessivage
	Ré	férences hibliographiques
	ICC	referees bibliographiques in
\mathbf{A}	Cu	rriculum Vitae - Michel TIJANI 81
	A.1	Positions statutaires et titres
	A.2	Expérience professionnelle
	A.3	Activités professionnelles
		A.3.1 Enseignement et formation
		A.3.2 Activités de recherche 83
		A.3.3 Activités de développement
	A.4	Etudes et Expertises

	A.5	Contrats de recherche	38
	A.6	Encadrement de thèses à l'Ecole des Mines de Paris	38
	A.7	Publications)0
		A.7.1 Publications dans des revues à comité de lecture)(
		A.7.2 Autres publications et congrès)(
		A.7.3 Contributions à des ouvrages)2
в	Sh	ort description of VIPLEF code)3
	B.1	Introduction)3
	B.2	Governing equations)3
		B.2.1 Balance laws)3
		B.2.2 Constitutive laws)4
	B.3	Numerical methods)5
		B.3.1 Discretisation)5
		B.3.2 Transient conduction and diffusion)5
		B.3.3 Plasticity)5
		B.3.4 Viscoplasticity)5
		B.3.5 Finite deformation)6
		B.3.6 Coupled T.H.M. processes)6
	B.4	Computing aspects)6
	B.5	References)6
a	ЛЛа	and de velidation de VIDIEE	_
С		anuel de validation de vIPLEF 9)7
	C.1	Progiciel VIPLEF)7 \-
		$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$)7)7
		C.1.2 Formulation du probleme) () (
		C.1.3 Methodes numeriques)9)0
	C o	Virifaction des records des codes)U \1
	U.2	verification des noyaux des codes)1
D	Ma	anuel de conception de VIPLEF3D 10)3
	D.1	Contraintes et équations du mouvement 10)3
		D.1.1 Forces extérieures)3
		D.1.2 contraintes)3
		D.1.3 Cas d'un milieu poreux saturé)4
		D.1.4 Equations du mouvement)4
	D.2	Déformations et lois de comportement)4
		D.2.1 Déplacements)4
		D.2.2 Vitesses de déplacement 10)5
		D.2.3 Déformations $\dots \dots \dots$)5
		D.2.4 Transformations infinitésimales 10)5
		D.2.5 Transformations finites)6
	D.3	Lois de comportement)6
		D.3.1 Matériaux réversibles (Elasticité))7
		D.3.2 Matériaux à paramètres internes)7
		D.3.3 L'isotropie)9
		D.3.4 Le matériau de J. Lemaitre)9
		D.3.5 Le comportement post-rupture plastique	10
		D.3.6 Le comportement post-rupture viscoplastique 11	1

		D.3.7 Le matériau de Prager	111
		D.3.8 Le matériau de J. KICHEMIN	112
		D.3.9 Le matériau JOINT	113
		D.3.10 Le matériau de MUNSON et DAWSON	113
		D.3.11 Le matériau CAMCLAY	114
		D 3 12 Le matériau en sinus hyperbolique de J. Lemaitre	114
		D 3 13 Le matériau mixte	115
	D4	Problème d'élasticité avec contraintes initiales	116
	D.1	D_{1} Betour à la loi de partition	116
		D.4.1 Retour à la loi d'équilibre	116
		D.4.2 Retour a la loi d'equilibre	110
		D.4.5 Combination des deux lois	111
\mathbf{E}	FE	M analysis of coupled THM processes	119
	E.1	Introduction	119
	E.2	Governing equations of THM processes for continua	120
		E.2.1 Problem unknowns	120
		E.2.2 Balance laws	120
		E.2.3 Constitutive laws	122
	E.3	Governing equations of THM processes for joints	123
		E.3.1 The geometry of a joint	123
		E.3.2 Joint unknowns	124
		E.3.3 Balance laws	124
		E 3 4 Constitutive laws	125
	$\mathbf{E} 4$	Time integration	125
	п.т	E 4.1 Finite deformation	120
		E.4.1 Thinke deformation	120
		E.4.2 Skeleton constitutive law	120
	ΓF	E.4.5 Transient phenomena	120
	E.0	Space integration Image: Space integration	120
		E.5.1 Separated variational formulations	120
		E.5.2 Coupled variational formulation	127
	.	E.5.3 Finite element method and joints	128
	E.6	Iterative method for THM processes	128
		E.6.1 Reformulation of the problem	128
		E.6.2 Proposed iterative algorithm	129
	E.7	Acknowledgments	131
	E.8	References	131
F	Co	ntinuum modelling of dynamic behaviour	133
-	F.1	Introduction	133
	F 2	Basic formulation of the dynamic fragmentation problem	135
	F 3	Fragmentation law	136
	F_4	Constitutive modelling	137
	1.4	E 4.1 Bate dependent plasticity theory applied to modelling cussi brittle	101
		materials behaviour under Compressive leading	197
		E 4.2 Demors theory emplied to medalling successful title sets in the left	191
		F.4.2 Damage theory applied to modelling quasi-brittle materials behaviour	100
		under tensile loading	139
		F.4.3 Coupled response of the elasto-viscoplastic and the rate dependent	
		damage models	141
		F.4.4 Stiffness recovery	142

	F.5 F.6 F.7	F.4.5Uniaxial computational resultsExplosive-material interaction : boundary conditionsNumerical simulation of chamber blasting testsConclusions and prospects	142 143 145 148
G	Be	haviour of transversely isotropic materials	153
	G.1	Introduction	153
	G.2	Mathematical preliminaries	154
	G.3	Stress space transformation	155
		G.3.1 The fictitious stress tensor	155
		G.3.2 Restrictions on the fictitious stress tensor	157
	G.4	Proposed transversely isotropic failure criteria	159
		G.4.1 Redefined Drucker-Prager criterion	160
		G.4.2 Redefined Mohr-Coulomb criterion	160
	G.5	Proposed transversely isotropic viscoplastic model	161
	G.6	Identification of the material parameters	163
		G.6.1 Failure parameters	163
	a -	G.6.2 Viscoplastic parameters	164
	G.7	Conclusions	165
н	Sei	mi-analytical approach for heat transfer	171
	H.1	Introduction	171
	H.2	Physical model	172
	H.3	Thermal equilibrium of the cavern brine	173
	H.4	Heat transfer in the rock salt	174
		H.4.1 Cavern geometry	174
		H.4.2 Formulation of the problem	174
		H.4.3 Semi-analytical solution	176
		H.4.4 Numerical validation	177
	H.5	Heat transfer in the well	180
		H.5.1 Central tubing	180
		H.5.2 Annular space	181
		H.5.3 Formation around the well	182
	ΠC	H.5.4 Iterative method	183
	H.0	Heat transfer during the leaching process	183
	П./ Цо	Other numerical validations	184
	п.ð		190

1 Introduction générale

1.1 Contexte de ce travail

Ce mémoire est constitué de 5 parties et de 8 annexes.

Compte tenu du principal objectif de ce mémoire (candidature pour une Habilitation à Diriger des Recherches), cette introduction commence par situer le travail présenté dans ce mémoire par rapport à quelques unes des thèses que j'ai encadrées totalement ou partiellement ainsi que par rapport à mes publications et aux logiciels que j'ai réalisés et que ont été le fruit de travaux de recherches scientifiques (voir CV en annexe A et annexes B à H).

Ensuite, les chapitres 2, 3 et 4 constituent une rédaction plus complète et plus exhaustive de mes travaux cumulés au cours des ans et seulement partiellement publiés :

◊ Analyse du comportement mécanique des roches salines;

◊ Modélisation des ouvrages en couches salines;

◊ Prise en compte du lessivage des cavités salines.

Enfin, je fournis une brève conclusion de ce travail et élabore la stratégie de mes travaux de recherche futurs.

Durant mes années de recherche je me suis arrangé pour que les résultats de mes travaux soient jugés (comparaison entre prévisions de mes modèles et des mesures réelles, avis des partenaires industriels sur les logiciels développés (voir annexes B à E), quelques publications avec comité de lecture, avis des "pairs" spécialistes dans les disciplines que j'ai abordées, jurys des thèses totalement ou partiellement encadrées par moi ...) et communiqués (via la formation et les thèses, via les publications des chercheurs et des industriels qui ont utilisé mes logiciels et/ou mes développements dans le domaine des essais de laboratoire et via les publications auxquelles j'ai participé ...).

Que mes travaux aient été jugés m'a servi à améliorer l'adéquation entre la demande (les vrais problèmes industriels) et l'offre (des procédés expérimentaux de laboratoire, des modèles théoriques et des codes numériques) ainsi que la communication (aptitude à mieux comprendre les problèmes tels qu'ils sont posés par l'industriel ou par mes collègues et à mieux exposer à l'interlocuteur la démarche du chercheur et surtout les limites que présente le modèle que je lui propose et les réticences que j'ai vis-à-vis des modèles en vogue).

Je me dois de souligner que j'ai eu la grande chance que, dans le centre de recherche où je travaille, les missions dont je me suis occupées nécessitaient fréquemment de l'innovation. En reprenant la liste de mes rapports d'études pour nos partenaires industriels on s'aperçoit que le plus souvent ils contenaient matière à publier tant dans le domaine des lois de comportement (essais de laboratoire) que celui de la modélisation générale (études de cas réels *in situ*). Ces rapports internes et les résultats de recherche qu'ils contiennent ont été cités dans des publications d'autres auteurs assurant ainsi la communication.

Une recherche est le plus souvent un travail d'équipe. Je dois donc signaler qu'en ce qui concerne ma contribution à l'étude des cavités salines une partie importance a été réalisée avec la collaboration de Gérard Vouille qui m'a encouragé lorsque j'ai affirmé que les résultats de laboratoire sur du sel gemme de Tersanne pouvaient être interprétés en admettant que "Le sel gemme est un liquide visqueux" (Tijani et al [42]). Après son départ à la retraite, mon activité "sel" continue avec la collaboration de Faouzi Hadj Hassen et de Ahmed Rouabhi qui vient de réaliser, sous ma direction, le logiciel CHALES qui traite le problème thermique autour du puits et de la cavité en phase de lessivage (Tijani et al [37], voir annexe H).

A propos du "caractère liquide des roches salines", je rappele ici la conclusion que j'ai mise, en 1983, dans la publication (Tijani et al [42]), conclusion qui reste encore d'actualité renforcée par les récentes découvertes sur l'intensité du fluage du sel sous "faible déviateur" et par le travail développé dans ce mémoire concernant l'importance de la prise en compte de ce phénomène dans la modélisation des ouvrages conçus dans des formations salines :

"Tant que l'on n'avait pas de doute sur l'existence d'une cohésion du sel gemme, on abordait l'étude mécanique des ouvrages conçus dans des couches salines en effectuant des calculs en élastoplasticité, le sel gemme étant assimilé à un matériau élastoplastique parfait obéissant à un critère de Tresca. Lorsqu'un tel calcul convergeait (les zones plastiques autour des excavations ne se rejoignant pas), on pouvait affirmer que l'ouvrage évoluerait vers un état asymptotique caractérisé par le maximum de déformation et de plastification. Ainsi les résultats d'un calcul élastoplastique (état asymptotique) permettaient de déterminer le taux maximal de défruitement d'une mine de sel, la pression minimale d'exploitation d'un réseau de cavités de stockage ... Cependant, les résultats d'expériences réalisées au laboratoires et certaines observations in situ laissent penser que la cohésion du sel est nulle et qu'il se comporte mécaniquement comme un liquide visqueux. Grâce à des codes numériques adéquats on pourra toujours simuler l'évolution dans le temps d'excavations réalisées dans le sel considéré comme un matériau viscoélastique non linéaire et déterminer à chaque instant la répartition des contraintes et des déformations dans le massif rocheux. En revanche, les critères de dimensionnement ne pourront plus faire intervenir la notion de zone plastique puisque dès qu'est constituée la mine ou la cavité de stockage, la 'zone plastique' s'étend jusqu'à l'infini, tout le massif se mettant en mouvement pour combler les vides formés. Il semble donc qu'il faille faire intervenir conjointement la notion de déformation maximale admissible (pour des raisons techniques ou économiques) et celle de durée d'utilisation de l'ouvrage, pour obtenir, cas par cas, un critère de dimensionnement qui soit compatible avec le comportement mécanique du sel considéré comme un liquide visqueux" (Tijani et al [42]).

J'ai tenu à ce que mon *credo* apparaisse dans ce mémoire et en particulier le copier/coller que j'ai fait en récupérant le préambule que j'ai suggéré à Jasmina Merar pour sa thèse concernant l'approche macroscopique (phénoménologique) des lois de comportement d'un matériau solide [30].

J'ai utilisé le mot peu scientifique de *credo* pour signifier cette "règle de cohérence" que tout chercheur finit par adopter pour une meilleur adéquation entre ses compétences et ce qu'il pense pouvoir apporter à la communauté scientifique. A titre d'exemple de cette recherche d'adéquation, ayant constaté mes incompétences à jongler dans l'univers des modèles "microscopiques" (le cristal NaCL appelé hallite, cubique à face centré, avec des dislocations qui migrent ...) j'ai fait mien le *credo* des maîtres de la **Thermodynamique Macrosco-pique** dont je cite ici deux des fondateurs de la "Mécanique des Milieux Continus" : Largement répandue est l'idée fausse, selon laquelle, ceux qui formulent la théorie des milieux continus croient que la matière est réellement continue, niant l'existence des molécules. La physique des milieux continus ne suppose rien concernant la structure de la matière. Elle ne se cantonne qu'aux relations entre "grands" phénomènes, "négligeant" la structure de la matière à une échelle plus petite. Sa justification est l'affaire non de la philosophie des sciences mais de l'expérimentation (C. Truesdell et W. Noll, 1965).

Je précise que je ne m'oppose pas à l'approche dite micro-macro dans laquelle, les spécialistes, suite à des observations à petite échelle, proposent des modèles explicatifs à cette échelle dont l'intégration conduit à une loi macroscopique mais à condition de ne pas rester esclave du modèle microscopique. Rappelons nous par exemple la "Cinétique des Gaz" qui, avec peu d'axiomes (modèle microscopique), a permis d'aboutir à la loi d'état des gaz parfaits. Sachant qu'aujourd'hui les lois qui régissent une succession d'états d'équilibre d'un gaz (loi d'état) sont déterminées expérimentalement dans une grande gamme de pression et de température (montrant d'ailleurs les limitations de la loi des gaz parfaits) on pourrait se dire que l'on n'a plus besoin de ce genre de démarche de recherche de modèle explicatif intime.

En fait, en restant dans le même exemple (cinétique des gaz) on remarque que cette démarche avait permis d'expliquer des phénomènes tels que la viscosité, la diffusion, la conductibilité thermique, les forces de Van der Waals, la capillarité ... Mais nous ne devons jamais oublier que le progrès de cette démarche a supposé une modification des "axiomes de base" (le modèle micro) pour être en phase avec l'observation (expérimentation) qui doit donc toujours être l'unique justification du modèle. A mon humble avis, l'histoire de la "Cinétique des gaz" devrait être reconsidérée par exemple par les chercheurs qui ont le courage d'aborder, via l'approche micro-macro, les phénomènes complexes de couplage hydro-mécanique dans des roches peu perméables et sensibles à l'eau telle que certaines argilites. En revanche, certaines approches totalement macroscopiques (lois empiriques de "boites noires") peuvent s'inspirer avantageusement de la démarche "micro-macro" explicative pour éviter par exemple de relier une transmissivité hydraulique d'une discontinuité à une contrainte normale au lieu de la relier à une "ouverture mécanique".

1.2 Position du problème industriel "cavités salines"

Qu'il s'agisse de l'exploitation du sel ou de la création de cavités de stockage, l'étude de l'évolution et de la stabilité des vides souterrains créés par dissolution dans des formations salines présente un vaste champ d'investigations pour les chercheurs avec un caractère pluridisciplinaire relativement marqué.

Comme dans toute étude d'ouvrages souterrains, la première phase fait appel à la géologie non seulement pour les données géométriques (frontières entre faciès, éventuelles discontinuités ...) mais aussi pour l'estimation de l'état thermodynamique de référence (températures, contraintes, variables internes ...). Il convient ici de signaler que dans le cas de matériaux élastoviscoplastiques tels que les roches salines, on peut se trouver face à des mesures de contraintes initiales qui montrent l'existence d'un déviateur significatif (situation tout à fait possible dans un dôme de sel). Compte tenu du fait que pour les roches salines l'existence de déviateur des contraintes entraîne celle de déformations différées, un massif salin sous un état de contraintes non isotrope présente des vitesses de déformations dont la connaissance (faute de celle de l'état thermodynamique caché) est nécessaire pour la modélisation du devenir du site après création des ouvrages souterrains (voici à ma connaissance un thème de recherche encore ouvert).

La deuxième étape de création de forage relève de la géotechnique pétrolière avec les mêmes problèmes de forabilité, de mécanique des tubages et des cimentations, de corrosion et d'étanchéité. Etant donné que dans notre laboratoire il existe un important axe de recherches dans le domaine du forage pétrolier lancé par Hedi Sellami [38], j'ai le plaisir d'y apporter ma contribution en particulier avec la réalisation du logiciel ABIS (Tijani et al [29]) qui aborde, par une approche originale, le calcul d'une "tige" (système de forage) en grandes déformations (trajectoires longues et complexes) avec un beau problème de liaison unilatérale (contacts avec frottement et points de contacts inconnus). Cet outil de calcul a déjà servi dans trois thèses et est en cours d'utilisation dans une thèse qui se termine avec une extension au problème de flambage statique (les résultats obtenus avec ABIS sont encourageants). Par ailleurs, des travaux sont en cours pour la prise en compte des forces d'inertie pour l'étude du comportement dynamique des structures de forage (vibrations, instabilités, ...). Le thème général "forage pétrolier" comporte aussi l'étude de l'interaction outil-roche (cinématique de l'outil de coupe, mécanique de la rupture ...) que je suis d'assez près.

Vient ensuite la phase de lessivage qui peut avoir comme but l'exploitation du minéral ou la création d'une cavité de stockage ou les deux objectifs. L'étude de cette phase passe d'abord par la modélisation du lessivage (dissolution dans l'eau d'une roche saline avec prise en compte de l'hétérogénéité du matériau, des conditions thermiques, du scénario du mouvement du tubage, de la dynamique du fluide injecté ...).

Le lessivage de la cavité conduit à une modification à la paroi de la cavité tant des efforts (on a remplacé à l'intérieur de la cavité la roche par un liquide) que des températures. Les champs des contraintes et des températures dans le massif rocheux sont alors solutions d'un problème thermo-mécanique classique dont la résolution nécessite, entre autre, une loi de comportement de la roche saline et des outils de modélisation numérique.

De plus, le lessivage ajoute une complication particulière au problème thermo-mécanique puisqu'ici, une partie de la frontière du domaine étudié est variable dans le temps. Une adaptation des outils numériques est alors nécessaire.

La modélisation de l'éventuelle phase d'exploitation de la cavité pour le stockage d'un fluide concerne un problème thermo-mécanique dans lequel on doit prendre en compte, en plus des lois relatives au massif rocheux, les lois thermodynamiques de comportement du fluide (système matériellement ouvert car l'évolution est étudiée dans un référentiel lié au forage et à la cavité : seules les particules fluides contenues dans ce vide sont considérées).

Par ailleurs, le comportement mécanique des roches salines conduit souvent à réaliser les calculs en transformations finies à cause de la forte déformabilité des matériaux, des sollicitations qui leur sont imposées et des durées mises en jeu. Un palliatif qui a été utilisé a consisté à remarquer que ces grandes déformations apparaissent assez rapidement et ce sous des contraintes très faibles par rapport au module d'élasticité. D'où l'idée d'aborder le problème en négligeant les déformations élastiques (matériau rigide-viscoplastique). Mais cette démarche est mathématiquement erronée car la loi de partition est tensorielle. Sa partie déviatorique supporte la simplification mais, dans ce bilan, on ne peut guère négliger la déformation volumique élastique puisque la plupart des modèles rhéologiques proposés annoncent que la déformation volumique viscoplastique est nulle (ou faible). C'est même cette déformation volumique élastique qui explique comment un volume de cavité peut diminuer si fortement sans nécessiter de mouvement de particules solides sur de fortes distances. Et même si on voulait tenir compte d'éventuelles dilatances irréversibles, l'approche matériau rigide-viscoplastique pose un problème lors de la prise en compte des dilatations thermiques (couplage thermo-mécanique).

La dernière phase concerne l'étude des conditions d'abandon (fermeture) et/ou de réhabilitation des vides souterrains (stockage de déchets) en tâchant de prédire le mieux possible le devenir à long terme de ces cavités [7].

Une partie non négligeable de mes travaux de recherche à l'Ecole des Mines a consisté en une contribution à l'étude des cavités salines sur principalement trois volets que ce mémoire présente succinctement. Cette contribution a donné lieu à peu de "publications" mais à plus d'études (rapports internes) et de développement (protocoles d'essais de laboratoire, outils informatiques d'analyse des résultats d'essais et logiciels numériques).

1.3 Comportement mécanique des roches salines

1.3.1 Rhéologie du sel gemme

Lorsque j'ai abordé l'étude de la rhéologie du sel gemme (1974), les spécialistes attribuaient à cette roche une cohésion, admettant ainsi l'existence d'un domaine dans l'espace des contraintes non réduit au sous espace des états isotropes (déviateur nul) tel que tout état de ce domaine ne s'accompagne d'aucune déformation différée (comportement élastique). J'ai alors montré que toutes les données phénomènologiques (résultats d'essais de laboratoire et mesures *in situ*) peuvent être correctement interprétées à l'aide d'une loi de comportement que j'ai puisée directement dans la thèse de Jean Lemaitre [26].

Le sel gemme apparaît ainsi comme un liquide visqueux (cohésion nulle) et ce, sans aucune contradiction avec le fait que l'ingénieur observe, au laboratoire, une certaine cohésion (apparente).

Comme les spécialistes le savent, la thèse de Jean Lemaitre s'est déroulée dans le milieu des mécaniciens des métaux à une époque où les géomécaniciens décrivaient encore le comportement visqueux par les fameux "montages de ressorts, amortisseurs et patins". Le lecteur comprendra alors qu'il a fallu certains efforts pour faire passer le message : non seulement la cohésion du sel est nulle mais de plus on ne dispose pas de "schéma rhéologique : ressorts, amortisseurs ..." pour illustrer la loi de comportement.

1.3.2 Indices de fluabilité

Certains spécialistes comparent des sels provenant de divers sites grâce à leurs indices de Vouille. L'indice de Vouille d'un sel est la déformation axiale différée ε_V subie par une éprouvette au bout d'un temps t_V choisi (en général 365 jours) au cours d'un essai de fluage mono-palier sous un déviateur σ_V choisi (en général 10 MPa) et à une température T_V fixée (celle du site des cavités salines). Ainsi, si le fluage du sel obéit à la loi de Lemaitre (par exemple), la déformation que l'on aurait au bout d'un temps t, sous un déviateur σ et à une température absolue T serait $\varepsilon(\sigma, T, t) = \varepsilon_V(\sigma/\sigma_V)^{\beta}(t/t_V)^{\alpha} exp(B(1/T_V - 1/T))$. Les exposants α et β et le paramètre B(unité Kelvin) sont des caractéristiques rhéologiques.

Par ailleurs, toute autre loi de comportement (Norton, Munson-Dawson, Luby, SUVIC etc.) peut fournir une loi de fluage $\varepsilon(\sigma, T, t)$.

L'expert Gérard Vouille lui même était conscient que cet indice n'est pas suffisant pour caractériser la fluabilité du sel. Je propose ici que cet indice $\varepsilon_V = \varepsilon(\sigma_V, T_V, t_V)$ soit complété par les trois taux de variation relative :

$$\varepsilon_{Vt} = (t_V/\varepsilon_V) \ \partial \varepsilon / \partial t \ (\sigma_V, T_V, t_V) \varepsilon_{V\sigma} = (\sigma_V/\varepsilon_V) \ \partial \varepsilon / \partial \sigma \ (\sigma_V, T_V, t_V) \varepsilon_{VT} = (T_V/\varepsilon_V) \ \partial \varepsilon / \partial T \ (\sigma_V, T_V, t_V)$$

Il suffit que les spécialistes se mettent d'accord sur le choix des valeurs de (σ_V, T_V, t_V) (comme la notion de conditions normales de pression et de température). Alors ces quatre indices peuvent être attribués au sel (à partir d'essais de laboratoire) et ce indépendamment du modèle rhéologique. Les quatre indices $(\varepsilon_V, \varepsilon_{Vt}, \varepsilon_{V\sigma}, \varepsilon_{VT})$ sont sans unité $(\varepsilon_{V\sigma}$ par exemple est le rapport $(d\varepsilon/\varepsilon)/(d\sigma/\sigma)$ entre la variation relative de la déformation et celle du déviateur toutes choses égales par ailleurs).

Ces indices sont disponibles à partir de tout modèle rhéologique représentant correctement le comportement différé du sel gemme. Ils sont parfaitement suffisants pour caractériser tout modèle décrit par un nombre de paramètres inférieur ou égal à quatre. Dans le cas du modèle de Lemaitre on a : $\varepsilon_{Vt} = \alpha$, $\varepsilon_{V\sigma} = \beta$ et $\varepsilon_{VT} = B/T_V$.

1.3.3 Ajustement des paramètres rhéologiques

Dans le cadre des essais de laboratoire, d'une part j'ai proposé de pallier l'inconvénient de la dispersion naturelle des échantillons en réalisant sur la même éprouvette un essai de fluage multi-palier (un historique complexe des contraintes et des températures permet de caler tous les paramètres du modèle sur le même essai) et d'autre part j'ai réalisé le logiciel AJUSTE (Tijani et al [21]) qui permet l'ajustement des valeurs des paramètres de toute loi de comportement sur les résultats des essais.

Certes, la librairie AJUSTE peut être, aujourd'hui, avantageusement remplacée par des outils disponibles sous Scilab, Matlab ... Cependant, en 1981, on ne disposait pas d'algorithme efficace pour effectuer numériquement cette minimisation dans des cas généraux. En effet, la régression linéaire était courante et l'on tâchait de s'y ramener dans le cas de lois linéarisables par logarithme ou par une autre transformation (ceci d'ailleurs modifie la norme de la régression). En revanche, dans le cas de lois fortement non linéaires, surtout dès que le nombre de paramètres est supérieur à 1, le calage se faisait par tâtonnement (avec, dans le meilleur des cas, la mise à la disposition de l'utilisateur de moyens graphiques).

C'est justement en étant l'auteur du logiciel AJUSTE utilisé par mes collègues pour traiter les expériences, réalisées dans notre halle d'essais ou provenant d'autres laboratoires, que j'ai pu, grâce aux difficultés qu'ils rencontraient parfois, apporter quelques idées sur la réalisation même des essais de fluage ainsi qu'une méthodologie d'analyse des résultats efficace même lorsque des incidents techniques ont conduit à une perte partielle de données (minimisation d'un écart quadratique pondéré dans lequel on annule le poids des "mesures" absentes ou douteuses).

En effet, pour que l'ajustement soit efficace et pertinent il est préférable que les données soient consistantes (durée des paliers : l'idéal est un minimum de 2 semaines, nombre de déviateurs différents : minimum 4, nombre de températures, le cas échéant : minimum 3).

D'autre part, les déformations les plus représentatives sont les déformations globales (le phénomène différé et irréversible étudié conduit à des déformations relativement élevées et qui n'ont de sens que pour un volume représentatif contenant suffisamment de grains). Or, lorsque la contrainte varie (saut au début de chaque palier de fluage), la "déformation" axiale globale mesurée peut comporter autre chose que la vraie déformation de l'éprouvette. Cela n'est pas grave, dans la mesure où l'essai de fluage n'a pas pour objectif de déterminer le module d'élasticité. Il suffit donc de prévoir que, dans l'ajustement, les sauts de déformations soient des paramètres inconnus et ignorés ensuite.

Un autre palliatif est celui proposé par Pierre Berest (pour d'autres raisons) qui consiste à travailler non, avec la déformation elle même, mais avec sa vitesse. Le seul inconvénient de cette solution est de nécessiter de passer les données par une moulinette de dérivation numérique (en analyse de données les opérateurs de dérivation sont délicats à manipuler).

Par ailleurs, en ce qui concerne les sauts, il est préférable de procéder à un changement de température dans une phase à déviateur faible ou nul pour que l'effet de la dilatation thermique ne masque pas l'effet de la température sur la vitesse de fluage.

Quant à l'utilisation d'outils numériques d'ajustement tels que AJUSTE pour le calage des valeurs des paramètres d'une loi de comportement d'un matériau sur les résultats d'essais expérimentaux, trois recommandations s'imposent :

- ◇ Ajustement global : lorsque l'on est sûr que les échantillons utilisés appartiennent pratiquement au même faciès (même matériau) il est préférable d'exiger que l'ajustement se fasse en cherchant le même jeu de paramètres compatible avec toutes les mesures. Cela n'empêche pas des ajustements individuels (pour l'analyse de la dispersion des résultats) et conduit à des moyennes des valeurs des paramètres par un procédé plus pertinent que la moyenne arithmétique par exemple sur un paramètre qui intervient comme exposant.
- ◊ Orienter l'ajustement : quel que soit le logiciel le principe de base revient à se ramener à un problème de minimisation d'une fonction (en général un écart quadratique avec ou sans pondération). Il peut arriver que la fonction construite présente des minima locaux. Il suffit alors de profiter du fait que la plupart des logiciels d'ajustement font appel à un processus itératif avec un point de départ fixé par l'utilisateur qui peut alors chercher diverses solutions avec diverses valeurs de départ des paramètres physiques à déterminer.
- ◊ Utiliser les pondérateurs : prenons l'exemple d'un essai de fluage multi-paliers. L'historique imposé est celui des contraintes et de la température. Si un incident technique rend incertaines les mesures de ces grandeurs à partir d'un certain stade de l'essai alors tout le reste de l'essai est difficilement exploitable (on est amené à traiter un pro-

blème inverse). En revanche, si l'incident ne concerne que la mesure des déformations (réponse du matériau) alors il est possible d'exploiter l'essai dans son intégralité à condition d'affecter (dans l'écart quadratique) un poids nul aux mesures incertaines mais en tenant compte de l'historique des sollicitations (contraintes et température). En fait, on se retrouve exactement dans une situation similaire au cas d'un calage de loi rhéologique sur des mesures *in situ* lorsque l'historique des sollicitations est connu mais que les mesures fiables de la réponse de la structure ne sont disponibles que sur certaines périodes de tout l'historique.

1.3.4 Rupture et endommagement du sel gemme

L'étude de la rupture du sel gemme se fait à l'aide d'essais triaxiaux classiques réalisés sur des éprouvettes cylindriques soumises à une pression latérale fixée (confinement) et à une pression axiale que l'on augmente jusqu'à la rupture de l'échantillon. La relation entre les valeurs des deux pressions correspondant à la rupture est approximativement affine et la tentation est forte d'en déduire que la rupture du sel gemme obéit au critère classique de Coulomb ou de Drucker (du moins pour les campagnes d'essais triaxiaux classiques sous des confinements relativement modérés, disons inférieurs à 10 MPa pour fixer les idées).

Sans remettre en cause les résultats expérimentaux, une telle interprétation m'a gêné dès le début car elle ne permet d'expliquer ni la rupture différée après fluage ni la fissuration radiale (plans méridiens) des piliers de mine. Pour pallier cette carence, j'ai proposé un critère de rupture utilisant la notion d'énergie emmagasinée dans le matériau. Mais, bien que séduisante, l'idée s'est soldée par un échec sur le plan quantitatif. Il est heureux que j'ai échoué dans ma recherche d'un tel critère de rupture puisque cela m'a permis de revenir à l'origine même des mesures et à la validité d'une interprétation qui admet que les contraintes sont homogènes dans l'éprouvette malgré les contacts avec les plateaux de la presse.

En effet, suite à l'analyse numérique du champ des contraintes dans une éprouvette entre les plateaux d'une presse (adhérence par frottement sur les deux faces de contact), je me suis aperçu qu'à cause de la rhéologie du matériau, les conditions aux limites (contacts adhérents) conduisent à une apparition de contrainte de traction encore plus importante que celle déjà signalée par d'autres auteurs dans le cas de matériaux élastiques. Aussi ai-je proposé (Tijani [44]) une nouvelle analyse des essais de rupture en compression simple et triaxiale en postulant que la rupture locale (en un point du solide) n'a lieu que si et seulement si la contrainte principale majeure atteint une certaine limite (résistance intrinsèque de la roche à la traction simple dont on a une valeur approchée par des essais de traction indirecte).

De plus, en ce qui concerne le critère de stabilité que l'ingénieur utilise pour le dimensionnement, on remarque une évolution de l'état de l'art. Lorsque le sel gemme avait une cohésion non nulle une approche parfaitement justifiée consistait à analyser les résultats des modélisations numériques élastoplastiques ou élastoviscoplastiques en termes de zones non élastiques auxquelles on impose de rester limitées.

Plus tard, avec la disparition de la cohésion du sel, il a fallu trouver un nouveau critère. Le critère de rupture (dégagé par une méthodologie classique à partir des essais de laboratoire) n'ayant pas son utilité dans le cas des cavités profondes et faute de mieux, un critère en terme de vitesse de déformation viscoplastique limitée a été utilisé ([51]). Il ne correspond à aucune observation au laboratoire car en effet, lors d'un essai de fluage (on impose instantanément

les contraintes et on les maintient constantes), même sans accepter que la vitesse initiale est infinie, on ne peut réfuter le fait qu'elle décroît dans le temps (écrouissage positif) et donc si le matériau devait s'endommager, il le ferait dès l'application du déviateur des contraintes.

Actuellement, le critère de stabilité le plus en vogue concerne la notion de dilatance du sel "observée" sur des essais classiques de laboratoire ([2, 15, 19, 22, 24, 48, 49] ...). En effet, au cours d'un essai triaxial classique on "observe" que le volume de l'éprouvette se met à augmenter dès lors que le déviateur des contraintes atteint un seuil (éventuellement fonction du confinement). On se retrouve alors avec un critère exprimé en fonction du tenseur des contraintes et une méthodologie d'analyse qui consiste à réaliser des modélisations numériques avec un modèle rhéologique choisi et à surveiller au cours du temps les zones dans lesquelles ce critère est violé et à vérifier que ces zones restent limitées. La démarche, identique à celle qui la précédait chronologiquement et qui concernait la rupture, est parfaitement logique à condition de vérifier que le phénomène de dilatance est bien intrinsèque à la roche et n'est pas un artefact purement structural causé par l'adhérence des plateaux de la presse à l'échantillon.

1.3.5 Influence de la température

Il semble communément admis que lorsque la température augmente, la viscosité diminue (le matériau devient plus déformable). Or, dans le cas du sel gemme, j'ai observé l'existence d'une plage de températures (entre 15 et 60 °C) dans laquelle le phénomène est inversé (Tijani [41, 43]).

Je dois préciser ici que, dans notre laboratoire, nous continuons à interpréter les essais de laboratoire en utilisant la loi d'Arrhenius (énergie d'activation Q) qui annonce que, toutes choses égales par ailleurs, la vitesse de déformation non élastique est une fonction croissante de la température exp(-B/T) où B = Q/(RT) est un paramètre rhéologique du matériau. Dans les études consacrées au comportement thermo-mécanique des cristaux on trouve en fait deux notions que nous devrons approfondir à l'avenir.

Le premier point est que la déformation peut être la conséquence de plusieurs mécanismes pouvant s'opposer. Dans la pratique cela signifie que la température peut intervenir par une combinaison de fonctions d'Arrhenius et donner lieu à une fonction non monotone. La seconde notion est que l'énergie d'activation Q peut dépendre du tenseur des contraintes.

1.3.6 Influence de la saumure

Lorsqu'une éprouvette cylindrique soumise à une pression axiale est mise latéralement en contact avec de la saumure saturée on observe une augmentation de la vitesse de déformation exactement comme si on venait d'accroître sa température ([12]). Sans mettre en doute cette observation, je me suis demandé si ce phénomène n'est pas juste un effet de peau ne concernant qu'une certaine épaisseur. Je n'ai pas encore approfondi la question mais il convient de souligner que si le phénomène d'équilibre dissolution/cristallisation est un effet de peau on ne peut pas l'ignorer lors de l'analyse de l'essai pour obtenir une loi intrinsèque au matériau.

1.4 Modélisation des ouvrages en couches salines

1.4.1 Approche en symétrie cylindrique ou sphérique

Fréquemment les cavités salines sont assez compactes et présentent une symétrie de révolution autour d'un axe vertical. Pratiquement dès les premières études, j'ai remarqué qu'une erreur (voulue ou non) dans notre connaissance de la rhéologie du sel gemme est plus préjudiciable que l'erreur sur la géométrie, même commise délibérément en assimilant la cavité à un trou sphérique dans un massif infini, homogène et isotrope. D'où l'idée de la réalisation du logiciel CYSIF (à la demande de Gaz de France [10]) pour lequel l'approche analytique a été poussée le plus loin possible même dans le cas de non linéarité rhéologique et/ou géométrique (transformations finies) et même en présence de couplage thermo-hydro-mécanique.

Pour compléter ce logiciel numérique dans le cas des couplages, il a fallu disposer d'un outil permettant la résolution de problèmes de diffusion (POTCSF : conduction thermique ou écoulement dans un milieu poreux) et d'introduire les lois régissant le comportement du fluide dans la cavité et son interaction avec et le solide (paroi de la cavité). C'est ainsi qu'à la demande de Geostock (Tijani et al [50]) nous avons abouti au logiciel GEO1D dont l'une des principales utilisations est l'interprétation des essais *in situ* sur les cavités, non seulement pour mieux recaler des valeurs des paramètres déjà déduits des essais de laboratoire mais aussi pour déceler et quantifier des éventuelles anomalies telles que des fuites du produit stocké.

Par ailleurs ces logiciels 1D ont permis de réaliser diverses études de sensibilité telle que celle relative aux lois de comportement choisies, de déceler des facteurs prédominants dans un processus industriel comme par exemple l'effet de la vitesse d'injection/soutirage, d'effectuer des études de faisabilité de procédés industriels nouveaux tels que les "cavités poumon", de justifier les hypothèses simplificatrices utilisées dans les modélisations numériques sophistiquées en 2D ou 3D lors de la simulation de la phase de lessivage ...

Pour la validation de ces codes 1D, j'ai justement largement profité du fait qu'il existe un grand nombre de problèmes 1D pour lesquels nous disposons de solutions analytiques proposées par divers auteurs et du fait que dans le cas 1D, le chercheur peut vérifier *a posteriori* les résultats grâce à des petits outils numériques et ce même dans le très grand nombre de cas où nous ne disposons pas de solution analytique.

1.4.2 Méthode des Eléments Finis

Dans la recherche, il est préférable de pousser les approches mathématiques le plus loin possibles car cela permet de cerner un problème physique nouveau mieux que l'utilisation directe de simulations numériques. Mais il arrive que le chercheur ne puisse pas éviter l'appel à des techniques numériques.

Le premier logiciel utilisant la Méthode des Eléments Finis que j'ai réalisé (Tijani [40], Tijani et al [18]), dans le contexte des cavités salines, fut VIPLEF (élasticité, plasticité, viscoplasticité, petites et grandes déformations, anisotropie "voir annexe G", hétérogénéité ...). Ce logiciel a profité des dernières découvertes numériques et informatiques de l'époque ; en particulier le stockage de la matrice de raideur est fait selon le schéma de "la ligne du ciel" dont la largeur de bande (variable) est optimisée par une renumérotation interne automatique. Dans VIPLEF, les problèmes d'élasticité non linéaire et d'élastoplasticité sont ramenés à un problème de "point fixe" abordé par une méthode itérative simple durant laquelle la matrice de raideur est constante (Méthode de la Contrainte Initiale). Par rapport à ce qui existait à l'époque, j'ai apporté deux éléments. Le premier point concerne le critère d'arrêt du processus itératif. Le choix le plus courant concernait principalement les forces de rééquilibrage que j'ai jugé présenter deux défauts. Un défaut au moment de fournir les données : l'utilisateur, sans expérience, n'a pas d'idée pour choisir le seuil. Un défaut lors de la réception des résultats : tout ce qui touche aux équations différentielles de conservation est difficile à juger après coup (équation d'équilibre par exemple).

J'ai donc introduit une technique pour juger si le processus itératif a convergé qui consiste à introduire un seuil sur la validité des "critères de non linéarités". Ainsi les résultats affichés vérifient (à la précision numérique près et compte tenu du maillage) les équations différentielles d'équilibre, la loi de partition et les conditions initiales et aux limites mais ne vérifient qu'à la tolérance près (choisie par l'utilisateur) les critères de plasticité. Cette notion qui est relative à chaque point, indépendamment de tous les autres points, peut donc être vérifiée par l'utilisateur dans les résultats. Le second point concerne la programmation des modèles rhéologiques. En effet, classiquement les lois d'écoulement plastiques sont énoncées et programmées sous une forme incrémentale infinitésimale avec linéarisation de la fonction "critère". Cette démarche amène souvent le numéricien à modifier le potentiel et le critère initiaux en les régularisant (les fonctions associées au critère de Coulomb ne sont pas dérivables en régime d'arrête). Ecrire les lois d'écoulement plastique sans les "régulariser" est possible mais moyennant un certain effort de la part du "programmeur", effort largement récompensé par l'efficacité du code numérique généré.

Quant aux problèmes de viscoélasticité et d'élastoviscoplasticité, ils sont formulés dans VIPLEF en tant que problèmes de Cauchy qui sont intégrés par un processus incrémental à pas séparés suffisamment simple pour assurer une régulation automatique du pas d'intégration (Méthode de Fluage par Paliers). Dans certains logiciels, le programmeur définit les lois de comportements telles qu'elles sont dans les formules théoriques donc en termes de vitesses des variables internes en tant que fonction de l'état thermodynamique. Cela pose un problème numérique dans le cas de loi rhéologique comme celle de Jean Lemaitre qui présente une vitesse de déformation non élastique infinie, à l'état vierge, sous un déviateur non nul. Par artefact purement numérique (de la même veine que celui de la régularisation d'un potentiel de Coulomb), la loi est modifiée dans ces logiciels (certes avec un seuil qui, numériquement, peut ne pas trop modifier les résultats).

Par ailleurs, dans VIPLEF, les transformations finies (grands déplacements et/ou grandes déformations) sont décomposées en étapes au cours de chacune desquelles la transformation est supposée infinitésimale mais en tenant compte de l'état de contrainte calculé à la fin de l'étape précédente (réactualisation non seulement de la géométrie mais aussi des contraintes) et en respectant le mieux possible le principe d'objectivité (vitesses des contraintes prises au sens de Jaumann).

Deux autres logiciels (Tijani [47]), CHEF (conduction de la chaleur) et HYDREF (écoulement dans des milieux poreux), permettent de générer les historiques des champs de température et de pression de pore fournis à VIPLEF pour étudier les couplages thermo-hydromécaniques dans des milieux poreux et ce y compris en présence de joints de discontinuité, en régime permanent et transitoire et avec prise en compte de toute non linéarité des lois qui régissent les trois phénomènes physiques couplés. A cette occasion, la méthode numérique que j'ai réalisée pour résoudre ces problèmes de couplage s'est avérée très efficace et semble originale ([11], Tijani et al [46], voir annexe E).

L'ensemble de ces trois logiciels a été doté d'un post-processeur (traitement graphique des résultats) qui est constamment amélioré. La partie graphique de ces outils utilise une librairie que j'ai élaborée en 1980 pour assurer une transportabilité des programmes et une autonomie vis-à-vis des normes et standards graphiques.

A la demande conjointe de Gaz de France et de Geostock, la version 3D de ces logiciels a connu le jour en 1995 ([1], Tijani et al [50]). Par ailleurs, la partie mécanique VIPLEF3D a été étendue aux sollicitations dynamiques (en présence de toutes les non linéarités et y compris en grandes déformations) avec une application à la fragmentation des roches sous l'effet d'explosif (deux thèses, [34, 36], dans un domaine de recherche auquel j'ai largement contribué à l'initiative de Nicolas Cheimanoff lorsqu'il dirigeait notre Centre de Recherches, voir annexe F).

1.4.3 Approximation de la géométrie

Fréquemment, le géotechnicien est confronté à des problèmes tridimensionnels. Les aborder par des modélisations 3D avec une discrétisation numérique insuffisante est bien plus dangereux que de réfléchir à des simplifications pour passer en 2D ou même en 1D. Cette dernière démarche saine n'est pas nouvelle (elle a déjà été appliquée dans les théories des corps élancés).

En 1987, lors de travaux de recherche pour PETROFINA concernant un gisement pétrolier en mer du Nord, j'ai déjà eu l'occasion d'attirer l'attention sur le fait qu'un maillage 3D qui a l'ambition de modéliser simultanément les tubages en acier (diamètre décimétrique et hauteur kilométrique) et un sol (dimensions kilométriques) est numériquement voué à l'échec. En revanche, calculer ce qui se passe dans le sol sans le forage puis appliquer les efforts obtenus au tubage en tant que structure élancée est une démarche plus efficace.

Mais pour chaque type de problème géotechnique on est amené à chercher la meilleure méthode de réduction de la dimension de l'espace ([1], Tijani et al [50]). Dans le cas par exemple de l'étude des exploitations minières par chambres et piliers, l'approche classique consiste à réaliser une modélisation 2D en déformations planes en modifiant soit les dimensions, soit la pesanteur. J'ai eu l'idée de compléter ces modélisations par une approche 2D axisymétrique qui n'impose aucune de ces deux modifications ([1]).

1.5 Prise en compte du lessivage des cavités salines

1.5.1 Structures à géométries variables

Dans notre centre de recherche le logiciel VIPLEF a été largement utilisé dans les études des exploitations minières classiques (dimensionnement, stabilité ...). Par rapport aux structures classiques nous avons ici affaire à une géométrie variable (la roche est abattue puis le vide est éventuellement remblayé). Ainsi, en un point fixé dans l'espace, le matériau peut passer d'un solide à un vide puis d'un vide à un autre solide ou liquide. La prise en compte de ces opérations dans une simulation numérique par la Méthode des Eléments Finis nécessite de prévoir à l'avance un maillage avec des zones que l'on désactive pour simuler le creusement et que l'on réactive en tant que nouveaux matériaux pour tenir compte d'un éventuel remplissage des vides. Le logiciel VIPLEF est doté de quelques facilités pour aider l'utilisateur à mener à bien de telles modélisations qui sont possibles car dans la définition même du problème on admet que les vides sont créés instantanément selon une certaine chronologie. Cette simplification du problème réel est en général justifiée lorsque le temps réel n'intervient pas (matériaux élastiques ou élastoplastiques). En revanche, en élastoviscoplasticité et/ou en cas de couplage thermo-mécanique ou hydro-mécanique en régime transitoire, il est nécessaire de modéliser la création des vides de manière continue dans le temps. Numériquement, on a affaire à un problème à frontière mobile et l'expérience montre que la discrétisation dans le temps nécessite un grand nombre de phases rendant ainsi difficile, voire même impossible, de travailler avec un seul maillage incluant toutes les phases. C'est dans une telle situation que nous nous retrouvons lors de la modélisation de la phase de lessivage de cavités salines.

1.5.2 Solution approchée en mécanique

Considérons le problème du lessivage d'une cavité C(t) qui grossit en fonction du temps. Les équations que nous avons à résoudre (en mécanique et en thermique) concernent le solide situé dans le domaine $\Omega(t)$ complémentaire de C(t).

Fixons maintenant un temps t_F et intéressons nous à la surface $\partial C(t_F)$ frontière de $C(t_F)$. Alors, l'intégration du système différentiel spatio-temporel dans le domaine fixe $\Omega(t_F)$ pour $0 \leq t \leq t_F$ est possible dès que l'on se donne l'historique des conditions aux limites sur la surface $\partial C(t_F)$, à savoir la température et le vecteur force par unité de surface $\sigma \vec{n}$. Ces conditions aux limites sont connues aux instants t = 0 (état de référence) et $t = t_F$ (car à cet instant la surface $\partial C(t_F)$) est la paroi de la cavité).

Il nous reste à trouver un moyen de connaître une approximation de l'historique réel de ces conditions aux limites à partir de la cinétique d'évolution de C(t) et de l'historique des conditions aux limites sur cette frontière mobile. Une approche simple, que j'ai proposée dans le cas du problème mécanique (Tijani et al [45]), a consisté à traiter un problème 1D équivalent dans lequel on simule réellement le lessivage (évolution du rayon de la cavité sphérique) et à récupérer en tant que résultat, l'historique de l'effort $\underline{\sigma} \vec{n}$ sur la paroi finale $\partial C(t_F)$.

Une des applications récentes de cette approche a montré une excellente adéquation entre les résultats des calculs et les mesures réelles d'affaissement en surface à l'aplomb d'un site de cavités salines (production de sel). Pour être clair mais sans préciser le site (confidentialité oblige), la démarche numérique a consisté à modéliser toute la phase d'exploitation (plusieurs cavités avec des frontières mobiles) avec un logiciel numérique fondé sur la Méthode des Eléments Finis (dans cette étude, le responsable Faouzi Hadj Hassen, a utilisé VIPLEF mais on peut utiliser tout autre logiciel qui intègre une loi rhéologique idoine pour rendre compte du comportement du sel). Dans la modélisation, seule la géométrie finale des cavités est déclarée. Le travail de recherche a consisté à trouver les "bons historiques" des efforts $\sigma \vec{n}$ sur les parois des cavités dans leurs géométries définitives (au moment de l'étude).

A cette fin, le logiciel CYSIF (modélisation 1D en sphérique) a été utilisé en imposant un historique de variation du rayon de la sphère qui correspond à l'historique réel de production de sel et à suivre, dans les résultats de ce calcul simple, l'historique de la contrainte radiale au rayon correspondant au volume final de la cavité. C'est alors cet historique qui est adapté convenablement à chacune des cavités du réseau modélisé par Eléments Finis.

Du point de vue pratique, la solution approchée présentée ci-dessus consiste donc à se donner la cavité à un instant t_F (en général fin de toute la phase de lessivage) et à réaliser un maillage fixe. On applique alors à la paroi de la cavité un historique approché des conditions aux limites par interpolation de leurs valeurs connues aux instants extrêmes de la phase étudiée (en utilisant éventuellement une modélisation 1D, avec prise en compte du lessivage, pour disposer d'une interpolation approchée).

Il va de soi que pour augmenter la précision de cette démarche il suffit de décomposer toute la phase de lessivage en un nombre fini d'étapes (maillage fixe dans lequel on a prévu toutes ces étapes). Ensuite, on applique la démarche approchée pour traiter successivement chacune des étapes. En fait cette division en étapes permet de réduire l'intervalle de temps le long duquel on procède à une interpolation de données connues.

1.5.3 Le problème thermique

Une bonne prise en compte de la phase de lessivage dans un problème purement mécanique (transformation élastoviscoplastique isotherme) est importante mais elle n'est pas cruciale et ce pour deux raisons observées empiriquement à travers un grand nombre d'études de problèmes tant théoriques que réels.

En effet, pour peu que l'historique approché de l'effort $\underline{\sigma} \vec{n}$ soit raisonnablement choisi, d'une part on arrive à rendre compte correctement de l'évolution de la structure durant la phase de lessivage et d'autre part le comportement ultérieur (exploitation du réseau des cavités pour un stockage, abandon ...) est peu influencé par la phase de lessivage. Pour éventuellement améliorer les résultats des modélisations mécaniques avec prise en compte de la phase de lessivage, la méthode approchée proposée au paragraphe 3.4 (page 56) est relativement simple et a été largement utilisée dans d'autres domaines (creusement de tunnel, méthode convergence-confinement).

En revanche, dans le problème thermique, la phase de lessivage revêt un caractère bien plus crucial et présente des difficultés particulières. Raison pour laquelle le chapitre 4 ("Prise en compte du lessivage des cavités salines", page 59) sera consacré uniquement au problème thermique dans une cavité en cours de formation (lessivage).

Dans la comparaison entre la mécanique (élastoviscoplasticité) et la thermique (conduction en régime transitoire) on peut citer les principaux points suivants :

\diamond Le puits :

En mécanique, les relations de cause à effet sont relativement localisées (principe de Saint Venant) permettant ainsi de dissocier le comportement du puits de celui de la cavité (il est même conseillé de ne pas utiliser un maillage par Eléments Finis qui comprend à la fois un très long trou cylindrique de petit diamètre et une grande cavité : le codage en nombre fini d'octets des nombres réels dans un ordinateur fait que les algorithmes numériques classiques ne peuvent que conduire à des résultats incertains). Par chance, pendant que nous nous intéressons à une cavité, nous pouvons de manière simple, annoncer ce qui se passe à sa paroi durant le lessivage (une pression exercée "statiquement" par la colonne de liquide).

En revanche, dans le cas du problème thermique, la température à la paroi de la cavité dépend des échanges thermiques tout le long du puits et inversement. La cause principale ici est que l'échange d'énergie verticalement se fait principalement, non par conduction, mais suite à un transport de matière à grande vitesse dans un échangeur (tube intérieur et annulaire). Rien qu'avec un débit de 10 m³/h, une molécule de liquide introduite en tête de puits peut atteindre une cavité située à 1500 m en à peine 2 heures. Compte tenu de cette grande vitesse, le problème thermique dans le puits a été fréquemment modélisé en admettant l'absence d'échange d'énergie entre le puits et la roche qui l'entoure (échangeur classique en adiabaticité).

Le travail qu'Ahmed Rouabhi et moi même avons réalisé (projet CEP&M commun à Gaz de France, Géostock et Ecole des Mines de Paris) a, entre autres, montré l'insuffisance de cette hypothèse. Le logiciel CHALES réalisé (Tijani et al [37]), prend donc compte de l'échange thermique entre les deux liquides en mouvement dans le puits et les diverses formations géologiques traversées.

◊ La taille de la cavité :

En mécanique, du moins en statique, la dimension de la cavité après lessivage peut être considérée comme une "unité de longueur" : on peut rapporter les coordonnées spatiales et les composantes du vecteur de déplacement à une dimension caractéristique de tout le réseau de cavités. En revanche, dans un problème thermique transitoire, les unités de temps et de l'espace sont liées à cause de l'existence d'une diffusivité (tout comme en dynamique avec la notion de célérité). Ce point de différence entre l'élastoviscoplasticité en statique et la thermique transitoire est fondamental dans les approches numériques car dans le second problème les deux discrétisations de l'espace et du temps sont loin d'être indépendantes.

Par ailleurs, toujours sur l'aspect numérique, l'infini en mécanique peut être fixé indépendamment du temps comme étant un certain nombre de fois la taille moyenne de la cavité (dans sa phase finale), alors qu'en thermique, le bon choix de l'infini doit être dynamique (fonction du temps et de la taille variable de la cavité). Pour nous en convaincre il suffit de nous rappeler qu'une des variables les plus utilisées en thermique transitoire est x/\sqrt{t} . Ces considérations d'ordre numérique on été prises en compte dans le logiciel CHALES (Tijani et al [37]).

◊ La sollicitation de la paroi de la cavité :

La sollicitation de la paroi d'une cavité en phase de lessivage est, en mécanique, une pression de fluide connue avec assez de précision y compris sa variabilité dans l'espace (densité du fluide). En revanche, en thermique, même si nous connaissions une température (par exemple au point d'entrée du fluide injecté pour l'opération de lessivage), non seulement nous avons besoin de faire appel à la dynamique des fluides pour déterminer la répartition de la température dans le fluide contenu dans la cavité mais de plus dans cette analyse nous ne pouvons pas négliger l'échange thermique entre le massif et le fluide ainsi que l'énergie de dissolution et même après cet effort nous n'aurons pas directement la température du solide à la paroi à moins de faire appel à l'artefact classique du facteur d'échange surfacique. Il est courant de s'affranchir de la modélisation de thermomécanique des fluides complète en admettant que la convection qui s'établit dans la cavité assure une uniformité de la température.

\diamond La prise en compte de la phase de les sivage :

Dans une modélisation réaliste 2D ou 3D dans laquelle on simule effectivement le lessivage (frontière mobile) par une technique de passage instantané d'une géométrie de la cavité à une suivante (désactivation d'éléments finis) on crée une discontinuité dans le temps qui n'est pas de même nature en mécanique et en thermique. En mécanique, sur la nouvelle position de la paroi de la cavité nous exerçons la pression de fluide alors qu'il y avait juste avant d'autres efforts. La discontinuité est donc imposée à une contrainte. Si nous étions en dynamique nous aurions eu une onde de choc créée artificiellement par l'algorithme numérique mais en statique, ce saut ne concernant pas l'inconnue principale qui est le déplacement mais ses dérivés spatiales (via la loi de comportement), les résultats que l'on obtient restent corrects même avec un découpage grossier de la phase de lessivage. Alors qu'en thermique, le saut concerne l'inconnue principale qui est la température et les résultats, suite au découpage dans le temps de la phase de lessivage (un nombre fini de géométries de la cavité), sont loin d'être satisfaisants (flux infini au moment du saut).

Par ailleurs, en général, un calcul mécanique durant la phase de lessivage d'un site de cavités salines a comme objectif de vérifier que les conditions de stabilité sont assurées. Il est alors justifié de faire appel à des hypothèses simplificatrices pour peu que l'on prouve que si le modèle simplifié est stable alors le site réel l'est aussi. Mais, dans le cas du problème thermique, les spécialistes du lessivage (lois de dissolution, logiciels de modélisation physico-chimique du processus de lessivage) ont besoin de la température du fluide avec une bonne précision. Autrement dit, une bonne modélisation de la phase de lessivage en thermique revêt un caractère opérationnel comme une bonne prévision du volume libre en mécanique durant l'éventuelle phase d'exploitation (stockage).

2 Comportement mécanique des roches salines

Ce chapitre s'appuie sur mes travaux de recherche dans le domaine des lois de comportement thermomécanique des géomatériaux en général et du sel gemme en particulier (voir CV en annexe A : rapports d'études et publications, voir annexe G sur un exemple de loi de comportement). C'est dans le cadre de cette recherche que j'ai largement participé à l'amélioration de nos procédés d'essais de laboratoire et que j'ai réalisé la librairie AJUSTE.

Tous les rapports de notre laboratoire qui concernent les essais de fluage et de relaxation font appel à la librairie AJUSTE (cela correspond à au moins une cinquantaine d'études depuis la réalisation du logiciel en 1980).

Il en est de même des publications et des thèses dont le thème principal est le fluage des roches comme par exemple les deux thèses de Doctorat de l'Ecole des Mines de Paris : HAMAMI Mounir (1993) "Rhéologie du sel gemme - Application à la conception des dépôts souterrains des déchets nucléaires" et MERAR Jasmina (1999) "Elaboration d'une loi de comportement pour le sel gemme".

Ma contribution à la recherche dans le domaine de la rhéologie des roches ne s'est pas limitée à la réalisation d'outils informatiques de suivi d'essais, d'interprétation des résultats et à l'introduction de ces lois dans les logiciels numériques que j'ai développés.

Tant ma thèse ([40]) qur mes rapports d'études et mes publications ([42],[44]) montrent que je pose des questions sur la validité des lois de comportement et la représentativité des essais. En ce qui concerne ce dernier point, dans ce chapitre, je présente une idée nouvelle qui complète celle que j'ai déjà développée ([44]) et qui pourrait être le départ d'un travail de recherche à étoffer pour une future publication.

Ce chapitre, qui commence par un *credo*, présente aussi une discussion concernant l'influence du déviateur des contraintes sur le fluage des roches salines, discussion conforme à la philosophie générale et qui sera reprise dans le chapitre suivant.

2.1 Philosophie générale

2.1.1 Connaissance des lois de comportement des matériaux : une nécessité !

Pour étudier l'évolution d'une structure on fait appel à la Thermodynamique des Milieux Continus. La mise en équations mathématiques de tels problèmes réels passe par un état de référence supposé connu : la structure occupe une partie Ω de l'espace euclidien dans laquelle sont connus les champs des températures T et des contraintes de Cauchy σ .

L'évolution dans le temps de la structure est alors caractérisée par le champ T et un champ vectoriel \vec{u} qui caractérise le déplacement subi par chaque particule. A ces deux champs (inconnues principales du problème) on impose une certaine régularité mathématique. Comme dans de nombreux domaines de la physique cette hypothèse de "continuité" est fondée sur un choix judicieux du volume élémentaire représentatif.

Les équations à établir peuvent être regroupées en deux familles de natures différentes :

\diamond Les lois de conservation

Il s'agit d'équations différentielles dans l'espace et de conditions aux limites opérant sur les champs des accélérations, des contraintes et des flux thermiques pour exprimer la conservation du moment cinétique (loi de Newton) et de l'énergie (premier principe de la thermodynamique).

Etablir les équations de conservation en physique (masse, quantité d'électricité, moment cinétique, énergie) ne soulève jamais de discussion entre experts. Il arrive que dans l'une ou l'autre de ces équations on apporte des simplifications en négligeant certains termes (le terme de force d'inertie dans la loi de Newton ou la puissance mécanique dissipée par irréversibilité dans le bilan d'énergie). Mais la discussion n'a pas lieu à être, dès lors que les simplifications sont justifiées *a posteriori*.

Cependant, simplifiées ou non, les lois de conservation conduisent souvent à un système différentiel incomplet qui peut admettre une infinité de solution. Pour lever cette indétermination, les équations de la seconde famille sont donc nécessaires.

◊ Les lois de comportement

Dans chaque volume élémentaire représentatif, les historiques de la température T, du tenseur des contraintes de Cauchy $\underline{\sigma}$ et du tenseur des déformations $\underline{\varepsilon}$ (ou de manière plus générale, le gradient de la transformation) sont reliés par une loi \mathcal{F} caractéristique du matériau constitutif.

Le principe de déterminisme (axiomes de Noll) stipule que pour tout matériau, la fonctionnelle \mathcal{F} qui dépend de l'état de référence, existe et est unique et permet de connaître à tout instant t la contrainte $\underline{\sigma}(t)$ en fonction du passé depuis l'état de référence jusqu'à t de la température et de la déformation : $\sigma(t) = \mathcal{F}\{T(\tau), \varepsilon(\tau)\}_{(\tau < t)}$.

La dépendance de la fonctionnelle générale \mathcal{F} vis-à-vis de l'état de référence revêt une gravité particulière en géomécanique. En effet, supposons que dans un site donné on ait déjà la certitude d'avoir reconnu un faciès géologique homogène (sur l'aspect constitution physico-chimique) et que dans ce faciès nous connaissions les champs de toutes les grandeurs observables à l'état de référence (contraintes et températures).

Alors, pour connaître le devenir de ce massif, nous devons déterminer la loi \mathcal{F} en tout point du faciès. Lorsque la forme générale de \mathcal{F} est simplifiée en se limitant à la classe des matériaux à variables internes, on peut n'avoir à déterminer la loi qu'en un seul point, mais l'on doit compléter l'information par la mesure des champs de toutes les variables internes dans le massif.

Un exemple illustratif classique est celui d'un sol dit surconsolidé et dans lequel "la pression critique à l'état de référence" (paramètre rhéologique de la loi \mathcal{F}) n'est pas reliée à l'état de contrainte géostatique mais à un état de contrainte antérieur et inconnu (subi par le massif durant sa genèse).

Ainsi, la connaissance des lois de comportement de tous les matériaux constituant une structure sont nécessaires pour compléter les lois de conservation et aboutir à un système algèbro-différentiel dans l'espace et dans le temps avec des conditions initiales et aux limites.

2.1.2 Détermination des lois de comportement : une utopie !

A part une inégalité scalaire (second principe de la thermodynamique) il n'existe aucun guide qui permet au spécialiste d'aboutir à la vraie loi de comportement \mathcal{F} d'un matériau réel (dont nous admettons l'existence par axiome). En effet, l'équation générale ci-dessus nous montre clairement que la détermination de \mathcal{F} nécessite de réaliser une infinité d'expériences en soumettant le volume élémentaire à tous les historiques possibles de T et de $\underline{\varepsilon}$. Les spécialistes ont toujours pris conscience que la détermination de \mathcal{F} est une utopie. Ils ont alors consacré leurs efforts à l'obtention d'une loi approchée \mathcal{F}^* dont la réponse est la plus proche possible du matériau réel pour une "gamme" restreinte de sollicitations. Alors quelques remarques s'imposent malgré leur évidence :

- la relative liberté du spécialiste face à la recherche d'une approximation \mathcal{F}^* de la fonctionnelle \mathcal{F} "justifie" la multiplicité des modèles rhéologiques proposés pour le même matériau réel.
- cette liberté ne doit pas empêcher de comparer les lois approchées non seulement en fonction de l'écart entre \mathcal{F} et \mathcal{F}^* (au sens d'une norme dictée par le problème industriel) mais en fonction aussi de la largeur de la "gamme" de validité de \mathcal{F}^* .
- le spécialiste est amené à faire preuve de modestie capitulative dans les situations réelles où la loi \mathcal{F}^* remplace la vraie loi \mathcal{F} (à cause de notre ignorance de celle-ci) en agissant par extrapolation. En effet, on est souvent amené à utiliser une loi en tant qu'extrapolateur ne serait-ce que lorsqu'il s'agit du paramètre temps qui doit être pris en compte dans la notion de "gamme" de validité.

2.1.3 Détermination des lois approchées : une gageure !

La démarche classique pour déterminer une loi approchée \mathcal{F}^* qui rend compte le mieux possible du comportement thermodynamique d'un matériau réel présente en général trois étapes :

◊ Réalisation d'essais de laboratoire

Des éprouvettes de dimensions plus grandes que celles du volume élémentaire représentatif sont prélevées dans le matériau réel avec un échantillonnage apte à décrire toute la structure étudiée (problème crucial dans les structures géologiques). Ces échantillons sont alors soumis à des historiques de température et de contrainte (fluage, mise en charge ...) ou de déformation (relaxation, écrouissage ...), historiques choisis pour leur complexité et pour les plages des variables pilotées, de sorte à espérer couvrir une bonne partie des "gammes" des historiques réels dans le problème industriel abordé.

Le choix des "gammes" des sollicitations passe forcément par un processus itératif. En effet, l'unique moyen raisonnable que nous ayons pour connaître l'historique des champs des contraintes et des températures autour d'ouvrage souterrains est la modélisation (complétée certes par le plus possible de validation sur des mesures *in situ*). Mais, pour réaliser la modélisation nous avons besoin de la loi de comportement. D'où
l'établissement d'un premier programme d'essais de laboratoire déduit d'éventuels calculs simplifiés et/ou du savoir faire d'experts. La loi de comportement déduite de cette première campagne est utilisée dans une modélisation qui nous donnera une estimation des historiques des champs des contraintes et des températures dans le site réel. Si les gammes de variation de ces grandeurs sont incluses dans celles utilisées dans les essais de laboratoire, le processus itératif s'arrête. Si non, une autre campagne d'essais est à refaire dans les gammes obtenues par la modélisation.

\diamond Construction d'une loi approchée \mathcal{F}^*

Cette étape consiste à proposer une forme pour la loi \mathcal{F}^* qui sera alors caractérisée par un nombre fini de paramètres \mathcal{P} . Dans cette opération, le spécialiste peut s'inspirer de modèles rhéologiques existants (lois de comportement déjà proposées pour le même matériau ou pour d'autres matériaux) ou peut en imaginer d'autres en s'aidant principalement de l'observation des résultats de laboratoire. Une telle démarche est dite macroscopique ou phénoménologique.

Une autre approche (approche micro-macro) consiste à utiliser la connaissance de la matière à petite échelle et les lois qui régissent les mécanismes élémentaires et à remonter, par raisonnement, à l'échelle du volume élémentaire représentatif et aboutir ainsi à une première forme de \mathcal{F}^* à laquelle on apporte d'éventuelles modifications pour assurer son adéquation aux résultats expérimentaux. L'idéal évidemment est de combiner les deux approches.

\diamond Calage des paramètres $\mathcal P$

Une fois fixée la forme de \mathcal{F}^* , le spécialiste procède à un ajustement qui associe aux paramètres \mathcal{P} des valeurs qui minimisent l'écart entre les résultats des essais et ceux fournis par le modèle soumis aux mêmes sollicitations que l'échantillon. L'idéal ensuite est de terminer cette procédure par une comparaison entre prévisions théoriques et observations réelles *in situ*. Cela suppose que la loi \mathcal{F}^* soit introduite dans un code numérique, que le cas réel *in situ* soit instrumenté (convergences de galeries, volumes de cavités salines ...) et que toutes les données du site soient connues avec confiance.

Evidemment, avant toute opération de calage ou de validation d'un modèle, les mesures expérimentales doivent faire l'objet d'une réflexion sur leur "validité" (un "bon calage" d'une loi théorique n'est jamais une preuve de validité des observations). Une telle réflexion ne comporte pas seulement l'analyse classique des incertitudes de la métrologie mais s'étend à la pertinence des sollicitations imposées et des grandeurs mesurées visà-vis de la loi de comportement recherchée.

Une telle procédure complète en trois étapes relève en général de travaux de recherche. Elle nécessite souvent une vaste campagne d'essais de laboratoire que le chercheur peut être amené à élargir encore par des essais complémentaires dont le besoin est dicté par la forme même de la loi approchée \mathcal{F}^* .

Par ailleurs, le chercheur peut proposer une loi approchée \mathcal{F}^* qui reste une fonctionnelle (fonction de fonctions du temps comme par exemple les produits de convolution que l'on

rencontre en viscoélasticité). L'introduction dans un code numérique d'une telle loi peut s'avérer raisonnablement impossible. Pour pallier cette difficulté l'ingénieur propose le plus souvent une loi approchée \mathcal{F}^* réductible à un nombre fini de simples fonctions (critères, potentiels, ...) et ce en se plaçant dans le cadre de la théorie des matériaux à paramètres internes qui, bien que restreint, permet de définir une vaste famille de matériaux fictifs (élasticité, viscosité, plasticité ...) dans laquelle le spécialiste peut trouver une loi approchée \mathcal{F}^* .

Lorsqu'une telle recherche a été réalisée sur un matériau donné aboutissant à une loi approchée \mathcal{F}^* fiable, l'ingénieur peut l'exploiter pour des matériaux similaires en limitant cette fois ci la campagne d'essais de laboratoire à ce qui est juste nécessaire pour identifier les valeurs des paramètres \mathcal{P} .

Dans le cas des structures géologiques, il arrive à l'ingénieur d'être amené à modifier les valeurs de \mathcal{P} obtenues au laboratoire pour mieux caler les prévisions théoriques sur les observations *in situ*. Lorsque ces modifications restent modérées (compatibles avec la dispersion des résultats de laboratoire) elles peuvent être justifiées par les incertitudes sur la vraie constitution de tout le massif qui n'est connu que par quelques prélèvements. Mais lorsque les modifications doivent être importantes, il convient de s'assurer que toutes les données sont fiables (en particulier les contraintes initiales et les éventuelles surfaces de discontinuité) avant d'invoquer la notion de "changement d'échelle" qui signifie d'ailleurs que, pour des raisons pratiques, l'ingénieur n'a pas pu choisir des éprouvettes plus grandes que le volume élémentaire représentatif idoine pour le matériau étudié.

2.1.4 Détermination des lois approchées des géomatériaux : un défi!

Même face à la nécessité d'abdiquer en se contentant d'une loi approchée \mathcal{F}^* au lieu de la vraie loi \mathcal{F} (dont l'existence et l'unicité relèvent d'un axiome) les difficultés ne manquent guère et l'on peut en citer au moins deux relativement fréquentes.

La première difficulté commune à tous les matériaux se manifeste lors du dépouillement des résultats des essais de laboratoire pour en extraire ce qui représente réellement le comportement du matériau et ce après prise en compte du mode opératoire suite à une réflexion sur la validité des résultats expérimentaux.

Interpréter trop hâtivement les résultats bruts d'un essai de compression classique en admettant que la température, les déformations et les contraintes sont homogènes dans l'éprouvette, en négligeant ainsi les effets de bords, peut amener à commettre des erreurs d'interprétation non seulement d'ordre quantitatif mais parfois d'ordre qualitatif surtout lorsqu'il s'agit d'étudier les phénomènes d'endommagement et de rupture.

L'hypothèse de l'uniformité a comme intérêt de rendre la connaissance des contraintes dans l'échantillon accessible par mesure externe et donc indépendante de la loi de comportement. Les spécialistes des matériaux autres que les sols et roches sont déjà habitués à cette difficulté ne serait-ce qu'à cause des géométries des éprouvettes qui interdisent à l'avance d'admettre cette uniformité. Les calculs numériques d'identification des paramètres (résolution de problème inverse) concernent donc toute l'éprouvette. On en profite alors pour modéliser le mieux possible toutes les conditions opératoires y compris sur les bords "non utiles" des éprouvettes. La seconde difficulté qui concerne la dispersion des résultats se trouve exacerbée dans le cas des géomatériaux, surtout lorsque les essais sont poussés jusqu'à un certain niveau de déformation et à plus forte raison, lorsqu'on va jusqu'à l'endommagement et la rupture.

Quant il s'agit d'un travail d'ingénieur géotechnicien (identification des paramètres \mathcal{P} d'une loi \mathcal{F}^* dont la forme mathématique est déjà connue), à la limite, cette dispersion des résultats d'essais peut être considérée comme "bénéfique" car elle permet d'attribuer aux valeurs des paramètres des plages de confiance (incertitudes) utiles pour le passage ultérieur à la simulation du problème industriel réel. Mais un chercheur qui tente d'inférer une bonne loi approchée \mathcal{F}^* est desservi par les effets de la dispersion.

Un des moyens pour contourner, un tant soit peu, cette difficulté consiste à réaliser sur la même éprouvette un essai avec un historique suffisamment complexe pour qu'en un seul essai on ait une forme complète de la loi approchée (exemple : fluage par paliers multiples). Mais un tel palliatif n'est pas possible pour déterminer les lois qui régissent les conditions d'apparition d'un endommagement à moins d'agir cette fois ci délibérément pour que les contraintes ne soient pas homogènes dans l'éprouvette (cylindre creux par exemple). Evidemment l'analyse de tels essais (avec des contraintes délibérément hétérogènes) passe nécessairement par un problème inverse dans lequel on infère une loi que l'on introduit dans un code numérique avec lequel on simule l'expérience et l'on procède à un calage des paramètres puis l'on modifie la loi si nécessaire.

Ajoutons à tout cela le fait que les problèmes réels de rupture présentent souvent une "indétermination" avec les notions de "bifurcation" (à l'instar des problèmes de flambage) et de "localisation". Cette localisation peut compliquer la détermination d'une loi approchée de comportement macroscopique à cause de la difficulté de dissocier clairement ce qui est lié à la structure (éprouvette) de ce qui est intrinsèque (relatif au volume élémentaire représentatif du solide étudié).

Le défi de la détermination d'une loi approchée d'un géomatériau se retrouve encore plus exacerbé lorsqu'il s'agit d'un solide poreux en présente d'une ou de plusieurs phases fluides avec d'éventuelles réactions physico-chimiques entre le solide et l'un des fluides (comportement poromécanique d'argilites gonflantes et/ou milieu poreux non saturé).

2.2 Comportement ductile des roches salines

2.2.1 Introduction

De très nombreuses publications ([4, 17, 27, 31, 32] ...) montrent que, depuis fort longtemps, des chercheurs ont pris le défi de la détermination d'une loi approchée du comportement thermomécanique ductile des roches salines, aboutissant ainsi à divers modèles (Norton-Hoff, Munson-Dawson, Luby, SUVIC ...) qui évoluent en fonction de l'état d'avancement de la recherche de l'équipe scientifique où le modèle a été initialement proposé. Parfois même, le défi est poussé bien plus loin, en proposant un modèle unique qui décrit non seulement le comportement ductile mais aussi l'endommagement (microfissuration). Il est juste à regretter qu'il n'existe pas encore un document de comparaison systématique de tous ces modèles sur une grande base internationale de données expérimentales. En ne considérant que le comportement irréversible en transformations isothermes, on constate que le nombre de paramètres rhéologiques peut aller de 2 (Norton-Hoff) à plus de 15 (SUVIC) et que, dans le cas des modèles avec un grand nombre de paramètres, certains de ces paramètres semblent indépendants de l'origine du sel étudié comme s'il s'agissait de constantes universelles.

Lorsque l'on se place dans le cadre de l'axiomatique générale qui régit les lois de comportement, on peut éliminer d'office les modèles avec "écrouissage par le temps" (les lois dans lequel le temps intervient explicitement violent l'axiome d'objectivité) et demander des précisions sur les lois qui utilisent le logarithme du déviateur (problème de passage à la limite) et sur la généralisation aux transformations finies des modèles rhéologiques proposés et ce principalement lorsqu'il s'agit d'écrouissage cinématique (voir page 39).

En fait, face à une telle multiplicité de "lois de comportement" pour le même matériau, l'idéal dans une étude d'un site réel, surtout lorsqu'il s'agit de stabilité et d'évolution à long terme, est que le responsable de l'étude dispose d'un code numérique qui intègre le grand nombre possible de ces modèles rhéologiques de sorte qu'il puisse réaliser plusieurs simulations et qu'il décide en fonction des résultats les plus pessimistes. Cela souligne alors l'importance de la flexibilité des codes numériques (facilité d'introduire tout modèle rhéologique) et l'utilité des approches dans lesquelles on simplifie certaines données du problème (la géométrie par exemple) pour être en mesure de faire appel à des approches analytiques ou semi-analytiques (voir chapitre suivant).

La suite de ce paragraphe sur le comportement ductile des roches salines sera consacrée uniquement à un rappel de quelques propriétés du matériau sel gemme sur lesquelles un certain consensus est établi et à une présentation d'un lien entre l'approche macroscopique de Noll et une science totalement différente : l'Automatique. Le rapprochement entre disciplines scientifiques différentes est fructueux (partage des progrès dans le domaine des outils mathématiques et de la logique des différentes approches).

Ainsi, on garde en perspectives la tache noble, mais qui nécessite le travail d'un bénédictin, de comparaison systématique et profonde de divers modèles en s'appuyant sur le maximum de mesures de laboratoire et d'observations *in situ*. Le but d'ailleurs de cet objectif n'est absolument pas de chercher qui a raison (seule la science a raison) mais de fournir aux partenaires industriels une démarche cohérente.

2.2.2 Prépondérance des déformations non élastiques

Lors d'une transformation finie d'un matériau solide, le tenseur des contraintes de Cauchy actuel est fonction de l'historique passé de la température et du gradient de la transformation que l'on peut décomposer en le produit d'un gradient de transformation élastique (réversible) et un gradient de transformation irréversible.

Sachant que les roches salines peuvent présenter de fortes déformations totales sous des contraintes relativement faibles par rapport au module d'élasticité, on peut restreindre l'étude de leur comportement mécanique à des transformations dans lesquelles la transformation élastique est considérée comme infinitésimale. Dans ce cas, l'approche générale correspond à une loi de partition qui décompose la déformation totale en une partie élastique (reliée aux contraintes par une loi d'élasticité linéaire), une partie ε^{th} relative aux dilatations

thermiques et en une partie non élastique $\underline{\varepsilon}^{ne}$ (dont on doit disposer d'une loi d'évolution). L'unique précaution à prendre pour rendre compte des transformations finies consiste à faire intervenir le tenseur des contraintes de Cauchy par une vitesse objective telle que la dérivée de Jaumann. C'est effectivement la seule précaution car la transformation thermoélastique étant considérée infinitésimale, l'isotropie du matériau est conservée (à condition que toutes les variables d'écrouissage soient des scalaires ou des tenseurs isotropes [28]).

Dans un premier temps, le tenseur gradient dans l'état actuel du champ vectoriel des vitesses de déplacement $\dot{\vec{u}} = d\vec{u}/dt$ est décomposé en une partie symétrique notée $\dot{\vec{\varepsilon}}$ (taux de déformation) et une partie antisymétrique $\underline{\omega}$ (taux de rotation). Dans une phase durant laquelle le tenseur $\dot{\vec{\varepsilon}}$ a une base propre fixe (constante dans le temps) les valeurs propres de ce tenseur représentent de vraies vitesses (dérivées par rapport au temps des déformations logarithmiques de Hencky mesurées à partir du début de la phase).

La loi de partition, à partir d'un état de référence relâché, est alors exprimée en termes de vitesses : $\underline{\dot{\varepsilon}} = (1+\nu)(\underline{\dot{\sigma}} - \underline{\omega}\underline{\sigma} + \underline{\sigma}\underline{\omega})/E - [\nu(\underline{\dot{\sigma}}:\underline{1})/E]\underline{1} + \underline{\dot{\varepsilon}}^{ne} + \underline{\dot{\varepsilon}}^{th}$. Dans cette formulation qui fait intervenir le module d'Young E et le coefficient de Poisson ν , on a admis que le matériau est isotrope dans la configuration de référence choisie. Et l'on retrouve la formulation classique de l'hypothèse des petites perturbations en annulant le tenseur vitesse de rotation ω .

2.2.3 Lois classiques d'évolution

On admet en général que les déformations non élastiques des roches salines se produisent pratiquement sans variation de volume (du moins lorsqu'on ne considère pas le phénomène de dilatance). Si de plus on ne considère que des variables scalaires d'écrouissage, la condition d'isotropie est satisfaite dès que le tenseur $\underline{\dot{\varepsilon}}^{ne}$ est parallèle au déviateur des contraintes de Cauchy $\underline{\sigma}' = \underline{\sigma} - [(\underline{\sigma}:\underline{1})/3]\underline{1}$.

Pour compléter le modèle rhéologique il reste à établir un lien entre deux variables scalaires positives : une sollicitation représentée par la contrainte équivalente de Von Mises $\sigma = [(3/2)\underline{\sigma}':\underline{\sigma}']^{(1/2)}$ et une réponse du matériau caractérisée par la déformation non élastique équivalente dont la vitesse est $\dot{\varepsilon}^{ne} = [(2/3)\underline{\dot{\varepsilon}}^{ne}:\underline{\dot{\varepsilon}}^{ne}]^{(1/2)}$. Durant un essai triaxial classique réalisé sur un échantillon cylindrique, la grandeur scalaire cumulative ε^{ne} représente la déformation axiale non élastique de l'éprouvette.

Certains auteurs remettent en cause cette démarche (qui reste néanmoins courante) soit par ce qu'ils attribuent de l'importance à un faible fluage inverse que présentent certains sels et ont donc besoin de variables tensorielles d'écrouissage soit lorsqu'ils tiennent compte du phénomène de dilatance ou bien pour les deux raisons. Mais la suite de cette présentation est en fait indépendante du choix du modèle tridimensionnel car durant un essai classique de laboratoire le tenseur des contraintes présente une base constante dans le temps. On peut donc toujours, à un moment ou à un autre, ramener le problème posé par l'essai, à la corrélation de deux fonctions scalaires du temps : une déformation axiale non élastique et une contrainte équivalente de Von Mises.

La loi de comportement n'est complète que si elle permet de fournir à tout instant t, la déformation équivalente $\varepsilon^{ne}(t)$ en fonction de l'historique { $\sigma(\tau), T(\tau), \tau < t$ } jusqu'à l'instant

t de la contrainte équivalente et de la température. En Automatique on dit que l'on a affaire à un "Système Dynamique Stationnaire" car le temps n'intervient pas explicitement (ce qui est, en mécanique, un corollaire du principe d'objectivité).

2.2.4 Description externe du système

Si on se limite au comportement mécanique, le problème d'identification du matériau revient à déterminer une fonctionnelle \mathcal{F} qui relie les historiques des deux variables mécaniques : $\varepsilon^{ne}(t) = \mathcal{F}(\{\sigma(\tau), \tau < t\})$. Cette égalité correspond en Automatique à la description externe du "Système Dynamique Stationnaire".

Un moyen pour identifier le système, un tant soit peu, consiste à appliquer sur une éprouvette, à l'instant t = 0, une sollicitation instantanée σ_0 qui est ensuite maintenue constante. En introduisant la fonction échelon d'Heaviside H on a donc durant un essai : $\sigma(t) = \sigma_0 H(t)$. Durant ces essais, dits de fluage, on mesure la déformation différée ε^{ne} . Supposons, pour fixer les idées, que durant une campagne de plusieurs essais de fluage sous diverses contraintes σ_0 on ait pu établir de manière empirique que $\varepsilon^{ne}(t) = f(\sigma_0)t^{\alpha}$ où l'exposant $\alpha > 0$ est un paramètre indépendant de σ_0 et où f est une fonction que l'on a pu identifier. Par exemple : $f(\sigma) = (\sigma/K)^{\beta}$ ou $f(\sigma) = A \sinh(\sigma/C)$ où K, β , A et C sont des paramètres rhéologiques. Un tel résultat empirique est effectivement un grand pas vers la connaissance de la loi de comportement du matériau. Mais, malheureusement, la loi de fluage n'est pas la loi de comportement.

Pour nous en convaincre, introduisons l'exposant $\gamma > 0$ et définissons la fonctionnelle \mathcal{F} comme suit : $\varepsilon^{ne}(t) = [\int_{[-\infty,t]} f(\sigma(\tau))^{\gamma} \dot{h}(t-\tau) d\tau]^{(1/\gamma)}$ avec $h(t) = t^{\alpha\gamma}$ et donc $\dot{h}(t) = \alpha\gamma t^{\alpha\gamma-1}$. Cette égalité relativement simple permet de définir une infinité de matériaux (caractérisés chacun par une valeur de γ) qui répondent tous exactement de la même façon à tout essai de fluage mono palier. Une campagne d'essais de fluage mono palier est donc insuffisante pour déterminer une loi de comportement d'un matériau réel. Pour mieux s'en rendre compte, il suffit maintenant de réaliser sur les matériaux fictifs que viennent d'être définis d'autres essais tels que par exemple des essais de chargement à vitesse constante : $\sigma(t) = vt$. Après intégration on constate que la réponse $\varepsilon^{ne}(t)$ dépend du paramètre γ ce qui permet alors une discrimination entre les matériaux de cette famille.

2.2.5 Description interne du système

Revenons à l'exemple de la famille de matériaux fictifs (modèles rhéologiques) présentée ci-dessus et considérons le cas particulier où h(t) = t qui correspond donc au paramètre $\gamma = 1/\alpha$. Posons $\varepsilon^{ne} = \xi^{\alpha}$. Cette égalité définit une variable d'écrouissage scalaire ξ dont la vitesse est donnée par l'égalité : $\dot{\xi} = f(\sigma)^{\gamma}$. Ainsi, la réponse ε^{ne} à tout instant est une fonction connue de la valeur à cet instant de la variable cachée ξ dont la vitesse est une fonction de la valeur actuelle de la sollicitation. Si la fonction f correspond à la loi puissance, on retrouve ici le matériau que Jean Lemaitre avait proposé, dans sa thèse, pour décrire le comportement ductile de certains métaux.

Plus généralement, un matériau est dit à variables internes (ou un système automatique est dit régi par une description interne) lorsque la réponse ε^{ne} à tout instant est une fonction connue des valeurs à cet instant d'un nombre fini de variables $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ et que la vitesse $\dot{\xi}$ est une fonction connue de σ et de ξ .

Dans le cadre des axiomes de la Mécanique des Milieux Continus, il est parfaitement possible de construire un matériau qui n'a pas de description interne (dans la famille construite ci-dessus on peut démontrer que le matériau ne peut être à paramètres internes que si et seulement si le produit $\alpha\gamma$ est un entier).

Les mécaniciens des solides évitent les matériaux qui n'admettent pas de description interne pour une raison pratique liée à l'introduction de la loi dans un code numérique. En effet, la description externe nécessite de garder en mémoire un nombre de valeurs de la sollicitation qui augmente au fur et à mesure que le temps s'écoule (historique de la sollicitation) alors que dans la description interne le nombre de valeurs à conserver est fixé une fois pour toutes (le nombre de variables internes et la sollicitation).

2.2.6 Le "bon" modèle rhéologique

Nous venons de voir qu'avec un raisonnement mathématique simple, mais rigoureux, on peut justifier l'existence actuelle d'un si grand nombre de modèles rhéologiques (Norton-Hoff, LMS, Munson-Dawson, SUVIC ...) proposés comme décrivant le mieux possible le comportement ductile des roches salines. La plupart de ces modèles sont à paramètres internes. Certes, la famille des matériaux à variables internes est très vaste, mais elle ne constitue qu'un cas particulier de ce que les axiomes de base de la Mécanique des Milieux Continus laissent comme éventail possible pour une vraie loi de comportement. Sans oublier que l'axiomatique de base elle même n'est qu'un ensemble de postulats (que des spécialistes élargissent actuellement avec la notion de gradient d'ordre supérieur à un).

Face à une telle incertitude, il ne s'agit pas pour le géomécanicien de démissionner mais seulement de se rappeler l'usage qui est fait d'une loi de comportement : l'introduire dans un code numérique pour modéliser les ouvrages souterrains (dimensionnement, étude de stabilité, prévision d'évolution ...). Le modèle rhéologique sera alors jugé correct (on peut avoir plusieurs modèles corrects) lorsqu'il est compatible avec un maximum d'essais de laboratoire et d'observations *in situ* et lorsqu'il est utilisé principalement en mode "interpolation" (gamme des sollicitations au laboratoire la plus large possible) en réduisant le plus possible le caractère "extrapolateur" (grâce à des essais de laboratoire de longues durées et à des re-calages sur des mesures *in situ*).

Un moyen efficace pour contrôler le caractère "interpolateur" est de profiter de l'étude numérique pour analyser en quelques points clefs les historiques de grandeurs physiques telles que les températures, les contraintes et les déformations et de voir si ces historiques (y compris en termes de vitesses) sont "inclus" dans ce que les éprouvettes ont subi au laboratoire dans l'étude expérimentale qui a permis de "déterminer" la loi de comportement.

Le contrôle de la suffisance de la durée des essais et de leur complexité peut se faire par une démarche simple qui consiste à ne prendre qu'une partie des essais pour le calage des paramètres et à prédire, avec le modèle ainsi développé, le reste des résultats expérimentaux (la fameuse "prédiction aveugle" à laquelle on procède dans certains projets internationaux de "compétition" scientifique).

2.3 Rupture, fluage tertiaire, endommagement, dilatance ...

2.3.1 Observations irréfutables

Au cours des essais classiques de laboratoire réalisés sur des éprouvettes de roches salines initialement cylindriques et se transformant en "tonneaux" après déformation, on observe effectivement et surtout sous faible confinement, une "rupture" (chute de la contrainte axiale pour les essais à vitesse de déformation imposée), une phase d'accélération de la déformation différée durant un essai de fluage (phase se terminant par la rupture, appelée phase de fluage tertiaire), une modification de la vitesse du son au cours de certains essais et l'existence d'une déformation volumique croissante (dilatance observée avec mesures locales de déformations).

On observe aussi *in situ* une fissuration des piliers d'exploitations minières classiques de sel gemme (NaCL) ou de potasse (KCl), des variations spectaculaires de la perméabilité et de la vitesse du son à la paroi de galeries ou de puits ...

Tous ces phénomènes ont une importance capitale et ont forcément donné lieu à de nombreuses recherches ([2, 15, 19, 22, 24, 48, 49] ...) avec une partie expérimentale (essais de laboratoire et mesures *in situ*) et une partie théorique qui donne lieu souvent à un modèle rhéologique global qui doit rendre compte à la fois du comportement ductile du sel gemme et des phénomènes de dilatance, d'endommagement et de rupture.

Cependant, pour le moment, les "lois" obtenues donnent nettement moins de satisfaction que celles relatives au comportement ductile. En effet, les dernières permettent en général de prédire relativement correctement les "déformations" (variations de volumes de cavités, convergences dans des mines classiques, affaissement de surface à l'aplomb de vides souterrains ...). En revanche, les "lois" de rupture, d'endommagement, de dilatance ... n'arrivent pas à expliquer de manière cohérente, ni les effondrements que l'on observe parfois dans les sites d'exploitation de sel [33], ni l'existence de très grands vides stables depuis des années (le site d'ASSE en Allemagne par exemple).

Sans remettre en cause ni l'intérêt industriel de l'étude de l'endommagement, ni les observations faites, ni les grandes avancées de la recherche dans ce domaine, le reste de ce paragraphe attire l'attention sur la nécessité de précautions à prendre lors de l'établissement de lois à partir d'essais classiques de laboratoire qui le plus souvent sont analysés comme si les champs des contraintes et des déformations dans l'éprouvette étaient homogènes.

2.3.2 Réalité des essais classiques

Une autre donnée irréfutable est qu'au cours d'un essai classique de laboratoire, les champs des déformations et des contraintes ne sont pas uniformes dans l'éprouvette (à cause du frettage au contact avec les plateaux de la presse). Il est même possible de montrer l'existence de zones dans l'échantillon où apparaissent des tractions alors que la surface de l'éprouvette est soumise à des pressions ([20], Tijani [44]).

L'hétérogénéité de la sollicitation de l'éprouvette peut se constater d'une part par la forme en tonneau mais aussi lorsqu'après "endommagement" (sans rupture), on découpe l'éprouvette par un plan méridien (on remarque que la modification de la couleur est répartie de manière hétérogène). La démarche courante consiste à analyser l'essai comme si le champ des contraintes était homogène et correspondait à un tenseur totalement déterminé par la mesure des pressions appliquées (confinement et pression axiale). Il reste alors juste à mesurer des déformations (mesures globales de variation de hauteur et de volume ou locales avec par exemple des jauges). Le lien alors entre ces contraintes et ces déformations permet l'identification des lois de comportement.

On peut alors montrer que tant qu'il s'agit de comportement ductile (paramètres élastiques, fluage ...), non perturbé par des phénomènes de fissuration ou de localisation des déformations, l'erreur commise sur le modèle identifié reste de nature quantitative et peut être réduite en réalisant les essais sur des éprouvette d'élancement suffisamment grand et en privilégiant les déformations locales (au centre de l'éprouvette). Pour s'en convaincre tout chercheur peut procéder comme suit :

- Identification du modèle rhéologique On analyse l'essai de la manière classique comme si l'éprouvette s'était déformée uniformément en restant cylindrique. On admet que le tenseur des contraintes est fourni par les pressions appliquées. On considère que les déformations locales mesurées au centre sont assez représentatives du champ des déformations de l'éprouvette ou à défaut on utilise les déformations globales. On identifie la loi de comportement de son choix.
- Modélisation de l'essai La loi étant introduite dans un code numérique, on modélise l'éprouvette réelle avec l'hypothèse de l'adhérence totale entre l'éprouvette et les plateaux de la presse. Et l'on compare les grandeurs calculées avec celles mesurées sur l'échantillon réel. L'expérience montre qu'en général l'écart est relativement faible surtout vis-à-vis des incertitudes dues à la dispersion des mesures.

En revanche, l'application de cette démarche à la recherche d'un critère de rupture ou d'endommagement est très dangereuse. En effet, au cours d'un essai de compression simple par exemple, on observe une rupture de l'éprouvette (en tant que structure et non en tant que volume élémentaire représentatif) lorsque la pression axiale (globale) atteint un certain seuil (résistance à la compression simple : R_c).

La démarche erronée consiste alors à conclure hâtivement à la rupture d'un élément de volume du massif rocheux soumis à un état homogène de contraintes caractérisé par deux valeurs propres nulles et une valeur propre négative d'intensité supérieure à R_c . En effet, il se peut que l'éprouvette soit rompue non pas par excès de pression mais par excès de cette traction parasite non voulue par l'expérimentateur.

Dans la démarche de vérification proposée ci-dessus, le chercheur peut profiter des résultats de la modélisation pour analyser la présence de traction et, en général, il constatera que bien que faible par rapport aux pressions globales appliquées, elle reste significative comparativement à la résistance à la traction mesurée indirectement (essais brésiliens).

2.4 Exemple de modèle pour la dilatance

2.4.1 Avertissement

Nous ne disposons pas de suffisamment d'observations analysées avec assez de recul scientifique, pour affirmer que lorsqu'un élément de volume homogène de sel est soumis à un état de contraintes dont toutes les valeurs propres sont des pressions, il peut présenter des déformations volumiques irréversibles. En effet les résultats des essais classiques (qui montrent cette dilatance) peuvent être interprétés en admettant que le matériau étudié a un comportement ductile caractérisé par une déformation non élastique sans variation de volume mais présente une fragilité à la traction. Le modèle exposé ici montre seulement qu'il est possible d'analyser le même essai de laboratoire à l'aide de lois dont l'application à un massif rocheux qui n'est soumis à aucune traction ne mettra en évidence aucune dilatance irréversible.

Ce modèle est à considérer uniquement comme un moyen pédagogique pour attirer l'attention sur l'insuffisance de nos connaissances actuelles de l'endommagement des roches salines et la nécessité de continuer les recherches pour aboutir à des méthodologies pour aider les experts dans les études de dimensionnement et d'évolution des ouvrages souterrains conçus dans des formations salines.

Le modèle présenté permet même de justifier l'influence du confinement et de la vitesse de mise en charge. De plus, tout chercheur peut l'adapter (couplage entre la déformation différée de "fluage classique" et celle relative à la traction) de sorte à construire un modèle rhéologique qui reproduit, même quantitativement, les résultats des essais triaxiaux classiques de chargement et de fluage (fluage en trois phases). Mais, un tel modèle théorique sera tel que lorsque l'élément de volume est soumis à un tenseur des contraintes dont les valeurs propres sont négatives (pressions) il n'y aura ni endommagement, ni dilatance, ni phase tertiaire de fluage.

Il est vrai que la rupture d'une éprouvette soumise à un essai classique de laboratoire peut être interprétée via la nouvelle axiomatique (notion de gradient d'ordre supérieur) en disant que c'est le gradient du tenseur des contraintes qui cause l'endommagement mais dans cette démonstration purement illustrative on en reste aux axiomes classiques de Noll.

2.4.2 Principe fondamental

Le principe même de la démarche proposée est vraiment très simple et peut donc être décliné avec beaucoup de variantes. L'idée de base consiste à inverser totalement le problème. En effet, habituellement nous avons affaire à un matériau réel dont la loi est inconnue et dont nous soumettons des échantillons à des essais spécifiques de laboratoire. Rien n'empêche de partir d'une loi de comportement (un matériau fictif choisi par le chercheur) et de le soumettre à des essais de laboratoire mais en modélisant le mieux possible les conditions de l'essai réel (et non l'image idéale faite de ces essais).

Dans le cas qui nous préoccupe ici (l'éventuelle dilatance irréversible des roches salines) le chercheur peut opter pour une loi classique de son choix qui représente le mieux possible le fluage du matériau réel qu'il complète "artificiellement" par ajout, dans la loi de partition, d'une déformation irréversible représentant le comportement à la traction du matériau caractérisé par une résistance obtenue de manière indirecte à partir d'un essai brésilien dit aussi "essai de compression diamétrale" (figure 1).



FIG. 1 – Photographie d'une éprouvette de sel après un essai brésilien

Les variantes sont alors nombreuses (choix des modèles de base : Lemaitre , Luby ..., choix du modèle de rupture diffuse orientée : plasticité, viscosité ..., éventuelle interaction entre les deux mécanismes : modification des paramètres rhéologiques du fluage en fonction de l'intensité de l'ouverture de la fissure de traction ...).

2.4.3 Modèle de Lemaitre modifié avec prise en compte de la traction

Le modèle pédagogique choisi ici est très sobre. Il consiste à décomposer la déformation irréversible en une partie régie par le modèle viscoplastique de Lemaitre et une partie obéissant à une loi viscoplastique simple représentant l'effet d'une traction et l'ensemble est sans couplage (on ne pourra donc pas rendre compte d'une chute de la pression axiale lors d'un essai de compression classique).

Le matériau fictif utilisé pour la démonstration est totalement explicité ci-dessous dans un formalisme qui permet une modélisation en transformations finies. Mais ce qui est à prouver (possibilité d'interpréter les dilatances observées simplement en invoquant la traction) reste vrai même lorsque le modèle est délibérément restreint aux petites déformations en annulant le tenseur ω des vitesses de rotation. La loi de partition pour des transformations isothermes, à partir d'un état de référence relâché, est exprimée en termes de vitesses : $\underline{\dot{\varepsilon}} = (1+\nu)(\underline{\dot{\sigma}}-\underline{\omega}\underline{\sigma}+\underline{\sigma}\underline{\omega})/E - [\nu(\underline{\dot{\sigma}}:\underline{1})/E]\underline{1} + \underline{\dot{\varepsilon}}^{ne}$. L'expression de la vitesse de la déformation non élastique utilise le déviateur des contraintes $\underline{\sigma}' = \underline{\sigma} - [(\underline{\sigma}:\underline{1})/3]\underline{1}$, la contrainte de Von Mises $\sigma = [(3/2)\underline{\sigma}':\underline{\sigma}']^{(1/2)}$, la contrainte principale majeure σ_1 (comptée positivement en traction) et la direction principale associée \vec{e}_1 (vecteur unitaire). Et l'on a : $\underline{\dot{\varepsilon}}^{ne} = (3/2/\sigma)\dot{\varepsilon}^{ne}\underline{\sigma}' + \dot{\zeta}\,\vec{e}_1\otimes\vec{e}_1$. Le dernier terme (qui fait appel à un produit tensoriel) signifie seulement que l'on a une vitesse de déformation orientée dans la direction de la traction.

La déformation équivalente $\varepsilon^{ne} = \xi^{\alpha}$ associée au fluage (comportement ductile) est régie par la loi de Lemaitre qui est telle que la variable d'écrouissage ξ a comme vitesse : $\dot{\xi} = (\sigma/K)^{\beta/\alpha}$. Pour la partie concernant la traction on a considéré une loi pseudo linéaire simple : $\dot{\zeta} = A < \sigma_1 - R_T > \text{sachant que} < x > = (x + |x|)/2$.

Les paramètres élastiques sont E = 24000 MPa, $\nu = 0,27$ (le séparateur des décimales est à la Française). Dans un système d'unité avec des déformations en micromètre/mètre, des contraintes en MPa et le temps en jour on a : K = 0,7, $\beta = 3$, $\alpha = 0,3$, $A = 2.10^7$ et $R_T = 0,1$. La forte valeur de A signifie seulement que, lorsque la traction est supérieure à 0,1 MPa (R_T), on a une très forte vitesse de déformation dans cette direction (modélisation tout à fait classique du phénomène de création d'une fissure par un matériau équivalent dans le cadre de la Mécanique des Milieux Continus).

2.4.4 Test réel de compression simple sur le matériau fictif

Le matériau fictif ayant été défini (n'oublions pas que son grand intérêt est qu'il est parfaitement connu) on se propose de le faire soumettre à un essai de compression simple.

L'éprouvette est cylindrique d'élancement 2 (rapport hauteur/diamètre). Ses deux sections sont soumises à un mouvement axial qui les forcent à rester planes et droites (orthogonales à l'axe du cylindre).

En ce qui concerne le mouvement radial dans ces deux sections, on considérera le cas idéal où le mouvement est libre (frottement nul : l'éprouvette reste cylindrique après déformation) et le cas, bien plus proche des essais réels de laboratoire, pour lequel on admet une "adhérence parfaite" donc un déplacement radial nul.

Dans le cas idéal (déformations homogènes), le champ des contraintes est homogène et connu à l'avance indépendamment du modèle rhéologique. Il correspond à une matrice diagonale dans un repère lié à l'éprouvette avec des composantes principales nulles radialement et tengentiellement et une composante axiale égale, au signe près, à la pression appliquée (force axiale globale divisée par la section actuelle dans le cas des contraintes de Cauchy). On n'a donc pas de traction. Par conséquent les réponses du modèle rhéologique initial (ici celui de Lemaitre) et du même modèle modifié pour prendre en compte la traction sont identiques.

Lorsque l'adhérence entre éprouvette et plateaux de la presse est imposée, non seulement le champ des contraintes devient hétérogène mais en plus il dépend fortement de la loi de comportement (quelle qu'elle soit). On doit donc s'attendre à ce que le modèle de base et le modèle modifié aient des réponses différentes pour certaines grandeurs. Il convient ici d'insister sur le fait que les différences ne concernent pas toutes les grandeurs mécaniques car le système physique étudié est régi aussi par des lois de conservation (quantité de mouvement) qui font que, par exemple, quelle que soit la loi de comportement, la moyenne dans toute section droite de la contrainte axiale est égale à la pression globale appliquée (au signe près).

Dans les trois tests réalisés (essai idéal sans adhérence, modèle de base et adhérence, modèle modifié et adhérence) la déformation axiale globale (variation relative de la hauteur de l'éprouvette) a été imposée avec une vitesse de 16,67 %/jour tant à la charge (diminution de hauteur) qu'à la décharge (réalisée lorsque la pression axiale a atteint environ 20 MPa).

2.4.5 Résultats des modélisations

L'objectif de cet exercice académique et pédagogique étant de montrer qu'il est possible d'interpréter la dilatance observée lors des essais réels sur des éprouvettes de sel par un critère en termes de traction au lieu d'un critère en termes de déviateurs des contraintes (éventuellement fonction du confinement), il est normal d'illustrer les résultats des modélisations par un diagramme (figure 2) représentant en abscisses la déformation volumique locale (au milieu de l'éprouvette, comme si elle avait déduite de mesures avec des jauges) et en ordonnées la pression axiale globale appliquée. Les courbes "Essai idéal" et "Essai réel - Lemaitre" sont confondues. La figure montre clairement que le modèle modifié (prise en compte de la traction) fait apparaître un phénomène de dilatance (déformation volumique croissante de manière irréversible). Le résultat théorique est très similaire à ce que l'on obtient au laboratoire. Malheureusement, cela ne prouve absolument pas que, désormais, nous tenons "un critère d'endommagement des roches salines" qui ne limite que la contrainte de traction mais prouve seulement que les critères proposés ne sont pas encore solidement justifiés et encourage les chercheurs à continuer leurs travaux mais en imaginant des essais dans lesquels le volume représentatif qui subit l'endommagement est réellement dans un état homogène de contraintes.



FIG. 2 – Phénomène de dilatance : comparaison des 3 modélisations

On peut profiter de ces modélisations pour montrer que la prise en compte de l'adhérence ne modifie pas radicalement le comportement ductile (figure 3) malgré l'existence de zones de traction illustrée sur le quart supérieur droit de l'éprouvette (figure 4).



FIG. 3 – Courbe effort-déformation : comparaison des 3 modélisations



FIG. 4 – Modèle de Lemaitre avec adhérence - Zones de traction

2.5 Retour au comportement ductile

2.5.1 Comportement ductile déduit d'essais réels

Nous venons de voir que lors de la détermination de la loi de comportement à partir d'essais de chargement à vitesse de déformation imposée (figure 3) l'analyse approchée qui consiste à négliger l'hétérogénéité des contraintes ne conduit pas à une trop grande erreur.

Un autre exemple avec le même modèle rhéologique de Lemaitre (mêmes valeurs des paramètres) a consisté à soumettre une éprouvette à un essai de fluage monoaxial sous une contrainte axiale de 15 MPa. La figure 5 présente la diminution relative de la hauteur de l'éprouvette en fonction du temps dans le cas d'essai réel (adhérence) et dans le cas idéal (contraintes homogènes).

Supposons que l'on réalise plusieurs essais de fluage monopalier sous des valeurs différentes de la contrainte. Les résultats des essais avec prise en compte de l'adhérence peuvent être analysés à l'aide d'un modèle de Lemaitre dont les paramètres élastiques et rhéologiques ont les mêmes valeurs que ceux du vrai matériau fictif à l'exception du diviseur K qui prend la valeur de 0,73 au lieu de 0,70 soit donc une erreur relative de 13 % sur les déformations différées, erreur souvent compatible avec la dispersion naturelle des résultats expérimentaux.



FIG. 5 – Essai de fluage sous 15 MPa avec et sans adhérence

Le géomécanicien peut ne pas être satisfait de la précision avec laquelle les valeurs des paramètres du modèle rhéologique sont déterminées en utilisant l'hypothèse simplificatrice de l'homogénéité des contraintes et des déformations. Une approche rigoureuse consiste alors à faire appel à un couplage d'un logiciel d'ajustement et d'un code numérique qui prend en compte l'adhérence en profitant aussi, bien entendu, du fait que les valeurs déduites par l'approche simplifiée peuvent constituer un bon point de départ pour le processus itératif d'ajustement. Il s'agit ici d'une méthodologie générale applicable à toute loi de comportement (et pas seulement au modèle de Lemaitre).

2.5.2 Ecrouissage isotope ou cinématique ou mixte?

Sur le plan théorique, la question qui se pose concernant les roches salines dont le comportement ductile présente un certain écrouissage "positif" (au cours d'un essai sous contraintes constantes, les vitesses des déformations diminuent en intensité au cours du temps) est de connaître le nombre et les natures des variables internes qui peuvent représenter ce phénomène dans le cadre restreint mais vaste de la théorie purement axiomatique des matériaux à variables internes. D'ores et déjà l'axiomatique plus générale des principes de Noll exclue le fameux "écrouissage par le temps". Il reste alors juste à savoir si certaines variables d'écrouissage sont tensorielles (écrouissage cinématique).

L'argumentaire expérimental le plus probant consiste à soumettre un élément de volume à un historique de contraintes (ou de déformations) dans lequel le repère propre varie dans le temps. Ce genre d'essais ne doit pas être confondu avec les essais *in situ* autour de vides souterrains, ni les essais de laboratoire sur des cylindres creux : essais intéressants mais dans lesquels le repère principal des contraintes varie dans l'espace mais au même point il reste quasi constant dans le temps.

Certains auteurs [25] assoient l'affirmation de la nécessité d'écrouissage cinématique sur l'analyse de résultats d'essais classiques de laboratoire. On peut cependant trouver un argumentaire contraire pour chacun de ces deux types d'essai :

◊ Hésitation au fluage

Au cours d'un essai de fluage, lorsque l'on baisse instantanément le déviateur des contraintes, on observe d'abord une variation instantanée de la hauteur de l'éprouvette puis une courte phase durant laquelle la hauteur varie dans le sens contraire qu'elle avait au préalable avant de reprendre le sens initial de variation (de manière moins intense). C'est cette phase, relativement courte, de changement du signe de la déformation différée que l'on peut désigner d'hésitation au fluage. Elle n'est pas systématique et elle est bien plus faible (en terme de déformation) que l'écart entre les courbes "réelle fictive" et "idéale fictive" du fluage étudié ci-dessus (figure 5). Cette affirmation est fondée non seulement sur les études spécifiques qui nous ont été confiées par Gaz de France pour quantifier le phénomène d'hésitation au fluage et plus généralement le comportement ductile du sel gemme sous sollicitations cycliques mais aussi sur des observations quasi quotidiennes des réponses de diverses roches salines soumises à des essais de fluage thermo-mécaniques par paliers durant lesquelles délibérément le déviateur des contraintes est annulé pour procéder au changement de la température.

◊ Essais cycliques contraction/extension

Aussi surprenant que cela puisse paraître, le modèle de Lemaitre (écrouissage isotrope) peut rendre compte correctement des essais réalisés dans certains laboratoires et qui ont consisté à soumettre une éprouvette cylindrique à une pression de confinement et une pression axiale de sorte que la différence des deux pressions change de signe de manière cyclique en passant d'un régime de contraction (l'éprouvette se déforme en tonneau) à un régime en extension (l'éprouvette prend la forme d'un diabolo avec en plus le risque que la membrane de protection s'infiltre entre l'éprouvette et le piston).

2.5.3 Influence du déviateur des contraintes

Rappelons que dans le modèle de Lemaitre la loi de fluage fait intervenir le déviateur par une loi puissance $(\sigma/K)^{\beta}$ définie donc par deux paramètres K et β . Fréquemment, les ajustements du modèle de Lemaitre des essais de fluage multi-palier avec une valeur croissante du déviateur d'un palier au suivant, sont globalement assez corrects mais avec une sous-estimation du fluage réel pour le premier palier (faible déviateur). En fait, cela signifie clairement que dans une grande gamme de valeurs du déviateur (depuis zéro jusqu'à une valeur jugée forte) il n'est pas possible de représenter correctement la réponse réelle avec uniquement deux paramètres. Il ne s'agit pas ici d'un simple problème académique, car comme on le montrera ultérieurement, une bonne prise en compte de l'effet d'un déviateur faible est nécessaire pour mieux décrire le comportement des cavités et ce pour deux raisons. La première raison évidente est que la variation du volume d'une cavité est influencée par une grande quantité de sel qui l'entoure et non seulement par la roche à sa paroi. Or le déviateur est nul à l'infini donc relativement faible à une certaine distance de la cavité. La seconde raison est que suite à un phénomène de relaxation [35], le déviateur des contraintes à la paroi même est très tôt nettement plus faible que celui de la réponse élastique.

Nous allons ici montrer que les essais de laboratoire (fluage multi-palier) programmés en tenant compte de l'éventuel fort déviateur de la réponse élastique d'un site de stockage et ne comportant pas assez de paliers à faible déviateur peuvent conduire à un ajustement globalement correct mais au détriment de la validité du modèle pour les faibles déviateurs. A cette fin, nous définissons un essai théorique sur un matériau fictif mais inspiré de résultats réels. La démonstration du fait que l'ajustement des essais de fluage avec le modèle de Lemaitre conduit souvent à sous-estimer les déformations différées du premier palier peut se trouver en consultant, entre autres, les nombreux rapports d'essais du laboratoire de Géosciences de l'Ecole des Mines de Paris (depuis 1970). Par ailleurs, le fait que les lois rhéologiques proposées pour le sel sous déviateurs élevés ne peuvent pas être extrapolées aux faibles déviateurs a été prouvé expérimentalement ([8, 9])

Le choix d'un matériau "fictif" est délibéré pour que d'autres chercheurs puissent procéder à la même démarche avec toute autre loi de comportement (on peut par exemple choisir un exposant du déviateur variable comme proposé par [39]). Le matériau "fictif" choisi ici est exactement celui de Jean Lemaitre dans lequel la contrainte équivalente de Von Mises σ est remplacée par $(1+c < 1-\sigma/p >^{\gamma})\sigma$ avec < x >= (x+|x|)/2. Ainsi, le fluage mono-palier du modèle d'origine (Lemaitre) et du nouveau modèle fictif sont identiques pour tout déviateur σ (différence entre la pression axiale et le confinement) qui dépasse une certaine valeur pfixée dans cet exemple à 6 MPa. En revanche, pour $\sigma < p$ les deux modèles donnent un fluage en t^{α} mais le facteur multiplicatif est plus grand dans le matériau fictif avec c = 0, 9et $\gamma = 1, 6$. La figure 6 représente ce facteur, non seulement pour les deux modèles (Lemaitre et Lemaitre modifié), mais aussi pour des vrais essais de fluage mono-palier qui ont été réalisés en 1979 sur du sel de Tersanne et qui ont fait l'objet d'une publication (Tijani et al [42]).

Insistons sur le fait que l'appel à des mesures réelles dans le contexte de cette démonstration par un exemple théorique n'a qu'un seul but : montrer que les ordres de grandeur des paramètres rhéologiques choisis dans l'illustration sont vraisemblables pour des roches salines. La discussion est donc tout à fait pratique et le caractère théorique de l'illustration a pour unique but de mieux asseoir la démonstration et la démarche peut aussi être appliquée à l'influence de la température sur le fluage du sel gemme (Tijani [41, 43])



FIG. 6 – Facteur de t^{α} fonction du déviateur

La figure 6 est relativement explicite pour montrer que les modèles sont pratiquement identiques (globalement) surtout lorsque l'on observe l'effet de la dispersion des essais réels qui ont été réalisés sur quatre éprouvettes (essais de fluage mono-palier).

Les valeurs des autres paramètres du modèle sont : un module d'Young E = 25000MPa, un diviseur du déviateur K = 0, 9 (Unités : jour, micromètre/mètre, MPa) et des exposants $\alpha = 0, 5$ et $\beta = 3, 7$. Le fluage réalisé sur ce matériau fictif présente 5 paliers de 15 jours chacun avec un déviateur de 4, 6, 8, 10 et 12 MPa respectivement. Le fichier du pseudo essai expérimental (que tout chercheur peut reproduire avec ces données) a été fourni au logiciel AJUSTE en précisant au logiciel que nous cherchons à caler les valeurs des paramètres rhéologiques avec un modèle de Lemaitre d'origine.

La régression réalisée par AJUSTE a été forcée en imposant les valeurs des exposants $\alpha = 0, 5$ et $\beta = 3, 7$ ainsi que celle du module E = 25000MPa. En revanche le logiciel est resté libre pour un décalage initial des déformations ainsi que pour la valeur de K. La valeur ajustée a été K = 0,9015 qui est très voisine de 0,9. Il convient de compléter les données de cet exemple illustratif en précisant que le fichier du pseudo essai comporte 100 points par paliers répartis régulièrement par rapport à la déformation et que l'ajustement a été réalisé en imposant le même poids aux 500 points expérimentaux dans l'expression de l'écart au sens des moindres carrés.

La figure 7 représente l'historique du déviateur imposé ainsi que la déformation du pseudo essai et celle du modèle de Lemaitre d'origine obtenu après ajustement.



FIG. 7 – Fluage multi-palier avec ajustement de la loi de Lemaitre



FIG. 8 – Fluage multi-palier avec ajustement de la loi de Lemaitre - Zoom

L'ajustement présenté sur la figure 7 est idéalement satisfaisant. Mais pour mieux comprendre ce qui arrivera lorsque l'on comparera le comportement d'une cavité réalisée dans le pseudo matériau réel (Lemaitre légèrement modifié) et celle creusée dans le matériau ajusté (Lemaitre d'origine), il convient de faire un agrandissement de cette figure. Ce zoom (fig. 8) souligne bien que le fluage (déformation différée) du premier palier (faible déviateur) est bien plus élevé dans la réalité (matériau "fictif") que ne le prévoit le modèle de Lemaitre ajusté. Dans cette comparaison, il convient de ne pas perdre de vue le décalage artificiel initial dont l'ajustement a bénéficié pour que la courbe théorique colle au mieux globalement à la courbe expérimentale. Insistons sur le fait que cet exemple théorique (matériau "fictif") est parfaitement conforme aux observations faites sur la vraie roche sel gemme et en particulier grâce à des essais de fluage sous de très faibles charges [8].

Comme nous le verrons par la suite, la nécessité d'améliorer les modèles rhéologiques pour qu'ils rendent compte du comportement du sel sous faible déviateur ne relève pas seulement de la recherche académique. Car, lors de la modélisation d'un site de cavités salines, on remarque que d'une part les déviateurs sont plus faibles que ceux auquels on s'attend avec un raisonnement en élasticité et d'autre part l'insuffisance de la loi de comportement pour les faibles déviateurs peut conduire à une sous-estimation des déformations du massif (variations de volumes, affaissements en surface ...). En attendant que la recherche dans la rhéologie du sel progresse suffisamment, un palliatif consiste à caler les modèles existants sur des essais de fluage réalisés dans les conditions (contraintes, températures, vitesses ...) du site réel.

2.5.4 Lois de comportement en transformations finies

Pour un matériau général obéissant aux axiomes de Noll, le tenseur des contraintes de Cauchy à tout instant t est une fonction de l'historique de la température T(t) et du gradient $\underline{F}(t)$ de la transformation géométrique qui amène à l'état actuel à partir d'un état initial relâché (configuration de référence). Une loi générale peut donc s'énoncer : $\underline{\sigma}(t) = \mathcal{F}\{T(\tau), \underline{F}(\tau)\}_{(\tau \leq t)}$. Si l'on décompose le tenseur régulier \underline{F} en le produit $\underline{F} = \underline{R}\underline{U}$ d'un tenseur symétrique défini positif \underline{U} (déformation) et d'un tenseur orthonormé \underline{R} (rotation) et en appliquant le principe d'objectivité (invariance vis-à-vis du référentiel de l'observateur) la loi se réduit à : $\underline{\sigma}(t) = \underline{R}(t)\mathcal{F}\{T(\tau), \underline{U}(\tau)\}_{(\tau \leq t)}\underline{R}^{T}(t)$.

Dans le cadre restreint, mais bien vaste, de la théorie des matériaux à paramètres internes, l'historique $\{T(\tau), \underline{U}(\tau)\}_{(\tau \leq t)}$ est résumé par les valeurs à l'instant t d'un nombre fini de variables qui sont pour un matériau élastoviscoplastique : les deux grandeurs observables T et $\underline{\sigma}$ et des variables cachées $\xi = (\xi_1, \xi_2, ...)$ appelées paramètres internes d'écrouissage. Chacune des variables ξ est soit scalaire (écrouissage isotrope), soit tensorielle d'ordre 2 symétrique (écrouissage cinématique). Le comportement est alors décrit par une loi de partition qui fait intervenir l'élasticité et la dilatation thermique et des lois d'évolution qui fournissent les vitesses de la déformation non élastique et des variables d'écrouissage en fonction de l'état thermodynamique ($\underline{\sigma}, T, \xi$). Ce cadre théorique général comprend un très grand nombre de modèles rhéologiques proposés pour décrire le comportement des roches salines. Mais, la plupart de ces modèles sont énoncés uniquement en transformations infinitésimales avec en particulier le fait que \underline{R} est approximé par $\underline{1}$. Pour la généralisation aux transformations finies, il est nécessaire de satisfaire le principe d'objectivité et on peut procéder soit via des dérivées objectives soit par des changements appropriés de variables tensorielles.

Considérons deux référentiels en mouvement relatif de sorte que l'on passe de l'un à l'autre par le tenseur orthonormé Q(t) tel que $Q(0) = \underline{1}$. En désignant par $(\underline{\sigma}, T, \xi, \underline{F}, \underline{R}, \underline{U}, \ldots)$ les grandeurs vues par l'un des deux observateurs alors l'autre verra les mêmes variables scalaires (la température et certains paramètres d'écrouissage). Mais le changement de référentiel n'opère pas de la même manière sur tous les tenseurs. Le second observateur verra $Q\sigma Q^T, QF, QR$ et aura le même tenseur <u>U</u>. Les variables tensorielles d'écrouissage peuvent se transformer comme σ ou comme U selon la signification physique qui a été attribuée à la variable considérée. Désignons par <u>a</u> une des variables ξ subissant la même transformation que $\underline{\sigma}$ (c.à.d : $\underline{a}^* = Q \underline{a} Q^T$). Alors la vitesse de cette variable $\underline{\dot{a}}^* = Q \underline{\dot{a}} Q^T + \underline{\Omega} \underline{a}^* - \underline{a}^* \underline{\Omega}$ n'obéit pas à la même transformation (ce n'est pas une grandeur objective puisqu'elle fait intervenir la vitesse de rotation relative des deux observateurs $\Omega = \dot{Q} Q^T$. Introduisons le tenseur antisymétrique : $W = \dot{R}R^T$ et posons $D_t a = \dot{a} - W a + a W$. Nous aurons alors dans le second référentiel : $D_t \underline{a}^* = Q D_t \underline{a} Q^T$ ainsi l'opérateur D_t définit une vitesse objective. Une loi de comportement élastoviscoplastique peut donc être généralisée en remplaçant les vitesses de certains tenseurs par des vitesses objectives comme celle qui vient d'être introduite ou comme la dérivée de Jaumann dans laquelle $W = \{\dot{F}F^{-1}\}$ (partie antisymétrique du gradient du champ des vitesses particulaires par rapport à la géométrie actuelle) ou encore l'opérateur de Jaumann mais par rapport à la configuration relâchée actuelle ([28]).

Une autre démarche de généralisation de lois de comportement élastoviscoplastiques en transformations finies consiste à remarquer que la vitesse objective $D_t\underline{a} = \underline{a} - \underline{W}\underline{a} + \underline{a}\underline{W}$ avec $\underline{W} = \underline{R}\underline{R}\underline{R}^T$ s'écrit aussi : $D_t\underline{a} = \underline{R}\underline{b}\underline{R}^T$ avec $\underline{b} = \underline{R}^T\underline{a}\underline{R}$. Le tenseur \underline{b} est maintenant, comme \underline{U} , invariant dans le passage d'un référentiel à un autre et donc sa vraie vitesse \underline{b} a un sens objectif et est la même dans tous les référentiels. Une telle approche simple consiste donc à poser $\underline{\sigma}(t) = \underline{R}(t)\underline{S}(t)\underline{R}^T(t)$ et à remplacer l'historique $\{T(\tau), \underline{U}(\tau)\}_{(\tau \leq t)}$ par les valeurs instantanées des variables d'état thermodynamique (\underline{S}, T, ξ) où chacune des variables d'état thermodynamique (\underline{S}, T, ξ) où chacune des variables d'écrouissage ξ est soit scalaire soit, comme \underline{S} , tenseur d'ordre 2 symétrique invariant dans tout changement de référentiel. La loi générale $\underline{S}(t) = \mathcal{F}\{T(\tau), \underline{U}(\tau)\}_{(\tau \leq t)}$ est alors remplacée par une loi de partition et des lois d'évolution en utilisant les vraies vitesses. Alors, compte tenu du choix des variables tensorielles, le principe d'objectivité est d'office vérifié et la loi de comportement est conforme aux principes de Noll dès lors que les équations différentielles dans le temps permettent de déterminer $\underline{S}(t)$ en fonction de l'historique $\{T(\tau), \underline{U}(\tau)\}_{(\tau \leq t)}$.

Afin d'être plus explicite, introduisons la fonction tensorielle symétrique $\underline{H}(t)$ telle que sa valeur initiale soit nulle et sa vitesse $\underline{\dot{H}}$ soit la parite symétrique de $\underline{\dot{U}}\underline{U}^{-1}$. En posant $\underline{D} = \{\underline{\dot{F}}\underline{F}_{-}^{-1}\}$ la partie symétrique du gradient du champ des vitesses particulaires par rapport à la géométrie actuelle (vitesse de déformation), il vient : $\underline{D} = \underline{R}\underline{\dot{H}}\underline{R}^{T}$. On a donc $\underline{\sigma} : \underline{D} = \underline{S} : \underline{\dot{H}}$ (puissance reçue par unité de volume actuel). Les nouvelles grandeurs \underline{S} (contrainte) et \underline{H} (déformation lagarithmique) sont les tenseurs de Hencky. Lorsque la base propre de \underline{U} est fixe dans le temps on a : $\underline{H} = Ln(\underline{U})$.

Au cours d'une transformation infinitésimale à partir de l'état de référence, on a $\underline{R} = \underline{1}$, $\underline{S} = \underline{\sigma}$ et $\underline{\dot{H}} = \underline{\dot{\varepsilon}}$. La loi de partition $\underline{\dot{\varepsilon}} = \mathcal{L}(\underline{\dot{\sigma}}) + \underline{\alpha}\dot{T} + \underline{\dot{\varepsilon}}^p$, dans laquelle l'opérateur linéaire \mathcal{L} représente l'élasticité et le tenseur $\underline{\alpha}$ (fonction éventuellement de T) caractérise la dilatation thermique, peut se généraliser sous la forme : $\underline{\dot{H}} = \mathcal{L}(\underline{\dot{S}}) + \underline{\alpha}\dot{T} + \underline{\dot{H}}^p$. Une loi d'évolution qui définit $\underline{\dot{\varepsilon}}^p = \mathcal{R}(\underline{\sigma}, T, \xi)$ devient $\underline{\dot{H}}^p = \mathcal{R}(\underline{S}, T, \xi)$ avec les mêmes variables d'écrouissage (en nombre et en natures) dont les vitesses sont fournies par des lois dans lesquelles on remplace $\underline{\sigma}$ par \underline{S} , à savoir : $\dot{\xi} = \mathcal{X}(\underline{S}, T, \xi)$.

Il est maintenant aisé de montrer que si le modèle d'origine (en "petites déformations") est tel que la donnée d'un historique arbitraire de $\underline{\varepsilon}$ et de T jusqu'à l'instant t permet de connaître, entre autres, le tenseur des contraintes $\underline{\sigma}(t)$, alors le modèle généralisé permet d'obtenir $\underline{\sigma}(t) = \underline{R}(t)\mathcal{F}\{T(\tau), \underline{U}(\tau)\}_{(\tau \leq t)}\underline{R}^{T}(t)$. On peut aussi montrer que tout groupe de symétrie de la configuration de référence est respecté dès lors que les lois \mathcal{L} , \mathcal{R} et \mathcal{X} définies dans le modèle d'origine sont conformes à ce groupe. On assure ainsi la compatibilité avec tous les "niveaux d'isotropie" reconnus pour le matériau dans sa configuration relâchée initiale. Il va de soi que, comme nous avons déclaré que le triplet (\underline{S}, T, ξ) représente l'état thermodynamique du matériau à tout instant, à l'état de référence, il doit respecter le groupe de symétrie du matériau. Par exemple, dans le cas d'un état de référence isotrope, toute variable tensorielle doit être isotrope (égale au produit d'un scalaire et du tenseur unité).

Nous venons ainsi de décrire une procédure qui permet de généraliser des lois de comportement élastoviscoplastiques établies en transformations infinitésimales pour qu'elles respectent tous les axiomes de Noll en transformations finies. Il ne s'agit que d'une procédure théorique parmi tant d'autres et seules des expériences peuvent valider le modèle final obtenu. Il convient de souligner que ces expériences sont nécessairement sophistiquées : il faut que l'élément représentatif du matériau suive des trajets de transformations finies avec des rotations \underline{R} et des déformations \underline{U} (y compris un mouvement du repère principal de \underline{U}).



3 Modélisation des ouvrages en couches salines

Dans le domaine de la modélisation, mes travaux de recherche se sont concrétisés principalement par la réalisation de codes numériques utilisant entre autres la Méthode des Eléments Finis (annexes B à E). Bien que j'ai réalisé des logiciels qui permettent des calculs à deux et trois dimensions, j'ai été l'un des fervents défenseurs de l'idée qu'il est souvent préférable de trouver des simplifications idoines de la géométrie de la structure étudiée pour se ramener à un problème qui peut être traité de manière analytique ou semi-analytique (logiciel CYSIF que j'ai conçu et réalisé, [10], Tijani et al [50]).

Ce chapitre est non seulement une synthèse de mes travaux de recherche sur une méthodologie pour ramener le problème d'une cavité réelle à un problème 1D, mais il présente aussi une application originale au problème de l'influence du déviateur sur le fluage des roches salines, application qui ne manquera pas de faire l'objet de publications.

3.1 Approche en symétrie cylindrique ou sphérique

3.1.1 Introduction

Considérons une cavité réelle réalisée dans une formation saline assez homogène et profonde (ce qui justifierait le caractère infini du milieu). Supposons, de plus, que la cavité soit assez loin des cavités voisines (réseau de cavités) pour justifier que son comportement puisse être étudié comme s'il s'agissait d'une cavité isolée dans un massif salin homogène et "infini". Alors, l'étude de la stabilité locale de la paroi de la cavité nécessite effectivement une modélisation dans laquelle on prend en compte la forme réelle de la cavité. Mais, lorsque la cavité contient un fluide (avec une pression P_f et une température T_f assez uniformes) et lorsque l'on ne s'intéresse qu'à une grandeur globale concernant la cavité comme par exemple la variation relative de son volume V_f , on se retrouve avec trois historiques de grandeurs scalaires $P_f(t)$, $T_f(t)$ et $V_f(t)$ qu'il s'agit de relier.

Il est alors naturel de chercher à simplifier la géométrie de la cavité en la ramenant à un cas unidimensionnel cylindrique ou sphérique. La relation entre les trois historiques pour la cavité 1D peut alors être considérée comme une approximation de la relation dans le cas de la géométrie réelle avec une éventuelle correction (coefficient de forme) ou tout simplement un "encadrement" (le comportement de la cavité réelle est "compris" entre les comportements du cylindre et de la sphère).

Il faut ici souligner fortement que nous ne disposons d'aucune démonstration mathématique relative à ce changement de la géométrie entre une forme arbitraire et une forme cylindrique ou sphérique et ce même dans le cas le plus scolaire de l'élasticité linéaire en transformations infinitésimales (le coefficient de forme est déterminé, au cas par cas, par un calcul numérique).

Toutes les règles pratiques du bon choix du problème 1D voisin du problème réel (cylindre ou sphère, pression moyenne à adoptée, corrections à apporter aux résultats des calculs 1D ...) relèvent de ce qui peut être qualifié d'heuristique et peut faire l'objet de travaux de recherches (thèses) durant lesquelles, avec sérénité, on utilise des simulations numériques sophistiquées (souvent longues à mettre en oeuvre) pour en déduire des règles pratiques pour que l'industriel puisse utiliser à bon escient des logiciels 1D. Malgré le caractère purement heuristique du passage de la géométrie réelle au problème 1D, la modélisation unidimensionnelle présente de nombreux avantages. Tout d'abord, comme nous le verrons au chapitre suivant, elle est quasi inévitable pour la résolution du problème thermique transitoire durant la phase de lessivage. De plus, elle peut être utilisée pour comprendre "qualitativement" certains phénomènes (voir ci-dessous : couplage thermo-mécanique et influence des faibles déviateurs) et pour mieux définir les données des modélisations 2D ou 3D de la géométrie réelle (simulation du lessivage, paragraphe 3.4).

Mais, même en ramenant le problème réel à une formulation 1D, les difficultés ne manquent pas. En effet, les solutions totalement analytiques correspondent systématiquement à des données particulières : la thermique transitoire linéaire avec des paramètres thermiques indépendants de la température et un rayon de la cavité constant (la solution avec prise en compte du lessivage proposée par [13] est erronée comme nous le verrons au chapitre suivant), la mécanique en transformations infinitésimales avec des modèles rhéologiques choisis pour permettre un développement analytique ([5], Tijani [40]) ... Ainsi l'approche numérique du problème 1D s'impose, quitte cependant à pousser le plus loin possible le raisonnement analytique. C'est l'esprit avec lequel le logiciel CYSIF a été réalisé.

3.1.2 Logiciels semi-analytiques

La "notice de conception" (tous les détails théoriques nécessaires pour un codage informatique) du logiciel CYSIF (ou CYSIPHE) a été compilée dans un rapport interne de Gaz de France (Octobre 1981, Réf : 50143, P. Boucly [10]). Le logiciel permet de résoudre un problème mécanique concernant une cavité cylindrique ou sphérique de rayon éventuellement fonction non décroissante du temps (lessivage) réalisée dans une milieu continu infini et homogène constitué d'un matériau isotrope, siège de contraintes initiales (champ uniforme, isotrope dans le cas sphérique) et de températures et pressions interstitielles dont les historiques sont connus. La loi de comportement du matériau est arbitraire (élastoplasticité, élastoviscoplasticité, prise en compte des grandes déformations). La condition à la paroi peut varier dans le temps en imposant soit la pression (cavité à puits ouvert) soit une relation entre la pression P_f , la température T_f et la variation relative du volume V_f (cavité à puits fermé et prise en compte du comportement thermodynamique du fluide).

Comme dans le cas du logiciel VIPLEF (2D et 3D), la non linéarité géométrique (transformations finies) est abordée en décomposant l'historique complet en une succession d'étapes en petites transformations avec réactualisation de la géométrie et des contraintes (technique connue depuis quelques années sous le nom de "Updated Lagrangian Method"). La non linéarité matérielle (rhéologie), est comme dans VIPLEF, intégrée par la méthode dite de la "contrainte initiale" qui consiste à ramener tout problème mécanique non linéaire soit à un problème de point fixe (élastoplasticité), soit à un problème de Cauchy (élastoviscoplastivité). La fonction globale qui intervient dans les deux cas est la composition d'un opérateur qui correspond à la loi de comportement et qui est atomique (relations en un point donné entre les grandeurs physiques associées à ce point) et un opérateur global qui se traduit par un système différentiel dans l'espace (équations d'équilibre et de compatibilité) avec conditions aux limites. C'est cet opérateur global qui est "numérisé" dans VIPLEF par une Méthode d'Eléments Finis (via une formulation variationnelle) et dans CYSIF par une approche semi-analytique qui ramène tout l'opérateur à de simples intégrales à une dimension (le rayon) qui peuvent être calculées numériquement par tout procédé d'intégration tel que la "Méthode des trapèzes" ou la "Technique des points de Gauss".

Les historiques des champs de températures et d'éventuelles pressions intertitielles sont solutions de problèmes classiques de conduction ou diffusion qui sont résolus par le logiciel POTCSF qui procède à une intégration dans le temps par la méthode d'Euler implicite et à une intégration dans l'espace par la Méthode des Eléments Finis (1D) via une formulation variationnelle. Le logiciel permet bien entendu la prise en compte de la variabilité du rayon de la cavité pour simuler le lessivage. Il est vrai que l'approche Eléments Finis peut être avantageusement remplacée par le procédé "analytique" utilisé dans le logiciel CHALES récemment développé (voir chapitre suivant). Cependant, la technique utilisée dans CHALES n'est valable, en thermique par exemple, que pour une conductivité et une chaleur volumique constantes alors que POTCSF permet de prendre en compte l'éventuelle variation de ces paramètres thermiques en fonction de la température (problèmes non linéaires). Dans le logiciel POTCSF, la condition à la paroi de la cavité, à l'instar de CYSIF, peut varier dans le temps en imposant soit la température, soit le flux thermique, soit une loi thermodynamique du fluide y compris pour des systèmes matériellement ouverts. La loi du fluide peut être introduite dans un petit module du logiciel. Actuellement deux lois ont été programmées (L'air et le méthane) à partir de "THERMODYNAMIC PROPERTIES IN SI, W.C. Reynolds -Department of Mechanical Engineering, Standford University, 1979".

3.1.3 Choix de la bonne pression P_f

Considérons une cavité réelle de surface Σ fixe, soumise à une variation de pression Q variable dans l'espace (généralement, fonction de la profondeur). Remplacer le problème réel par un problème 1D (cavité sphérique par exemple) impose d'attribuer à la dépression uniforme P_f une valeur appropriée pour que les variations relatives du volume de la cavité calculée par les deux approches (réelle et simplifiée) soient les plus proches possibles.

Il va de soi que, si Q est uniforme et si la simplification de la géométrie est justifiée sans coefficient de correction, alors nous aurons $P_f = Q$. Par exemple, lorsque le rapport hauteur/profondeur d'une cavité est assez petit on peut considérer que Q est uniforme. Par ailleurs, on devine que dans le cas général (Q variable) une valeur correcte de P_f serait une sorte de moyenne de Q. Mais quelle moyenne prendre : en pondérant par la profondeur z, ou la surface latérale ou le volume?

Faisons d'abord un raisonnement théorique en imaginant que dans le problème réel le matériau est élastique linéaire et la transformation est infinitésimale. Procédons alors à deux calculs élastiques mais avec la cavité réelle et désignons par \vec{u}_f le champ de déplacement obtenu avec une dépression uniforme P_f et par \vec{u} celui associé à la vraie dépression Q (variable dans l'espace).

Nous voulons déterminer P_f à partir de Q de sorte que les deux variations de volume soient égales : $\int_{\Sigma} \vec{u}_f \cdot \vec{n} dS = \int_{\Sigma} \vec{u} \cdot \vec{n} dS$. Dans ces deux intégrales de surface sur la paroi de la vraie cavité on désigne par \vec{n} un vecteur normal unitaire. La fonction à intégrer dans le premier membre (\vec{u}_f, \vec{n}) est uniforme lorsque la surface Σ est une sphère (car il s'agit du déplacement radial consécutif à la dépression uniforme P_f). Par expérience (de nombreux calculs réalisés sur diverses formes de cavités) on a observé, dans le cas d'une dépression uniforme, que la fonction $\vec{u}_f \cdot \vec{n}$ est assez uniforme de sorte que même pour une surface réelle Σ nous écrirons que la condition voulue est : $\vec{u}_f \cdot \vec{n} = (\int_{\Sigma} \vec{u} \cdot \vec{n} dS)/S$ où S est l'aire totale de la surface Σ . Utilisons alors le théorème de réciprocité (le travail de P_f dans \vec{u} est le même que celui de Q dans $\vec{u_f}$) : $\int_{\Sigma} Q \vec{u}_f . \vec{n} dS = \int_{\Sigma} P_f \vec{u} . \vec{n} dS$. Compte tenu de l'uniformité de P_f et de $\vec{u}_f . \vec{n}$, cette égalité se transforme en : $(\vec{u}_f . \vec{n}) \int_{\Sigma} Q dS = P_f \int_{\Sigma} \vec{u} . \vec{n} dS$. Pour que les deux variations de volume soient égales il faut et il suffit que $P_f = (\int_{\Sigma} Q dS)/S$. Ainsi la bonne pondération se fait par la surface et dans le cas où Q varie linéairement en fonction de z, la valeur de P_f est celle de Q au centre d'inertie de la surface latérale de la cavité.

De ce raisonnement, le seul théorème rigoureux (construit à partir du théorème de réciprocité) qui ressort est le suivant : toute cavité de frontière Σ sphérique, réalisée dans un matériau élastique linéaire, a la même variation de volume, qu'elle soit soumise à une dépression Q variable dans l'espace ou que la dépression soit uniforme P_f , pour peu que sa valeur P_f corresponde à la moyenne de Q au sens d'une intégrale de surface sur Σ . Extrapoler ce théorème au cas d'une cavité de forme arbitraire est une heuristique (déduite de constats empiriques). Mais cela n'est absolument pas grave car notre objectif est d'étendre ce résultat à tout matériau (loi de comportement arbitraire) et subissant des transformations finies.

Dans l'état actuel de la recherche dans ce domaine nous ne pouvons pas éviter l'empirisme et donc toute règle heuristique vérifiée sur un grand nombre de cas est la bienvenue.

Bien qu'il s'agisse d'heuristique on reste absolument dans une démarche scientifique qui a son éthique. L'unique vraie définition de cette règle empirique est "que faut-il faire pour qu'un calcul 1D donne les mêmes résultats globaux (variation de volume) qu'un calcul 2D ou 3D, toutes choses égales par ailleurs?". Cette définition n'est donc pas à confondre avec "quel historique imposer à la pression P_f dans un calcul 1D pour obtenir les résultats réels mesurés *in situ*?".

Certes, l'objectif final est de rendre compte le mieux possible de la réalité et de préférence par des approches simples mais à condition que toutes les hypothèses simplificatrices de la démarche soient justifiées en dehors de l'objectif lui même.

A titre purement illustratif, on a choisi un exemple d'une cavité présentant une symétrie de révolution par rapport à un axe vertical (figure 9) soumise à une dépression $Q = -0,01162z \min(t/600,1)$ et réalisée dans un matériau de Lemaitre de module E = 25000, de coefficient de Poisson $\nu = 0,25$, de diviseur du déviateur K = 0,9 et d'exposants $\beta = 3,7$ et $\alpha = 0,5$ (unités : mètre, jour, micromètre/mètre et MPa).

On compare alors les résultats (variation du volume, figure 10) du calcul 2D réalisé à l'aide de VIPLEF avec ceux correspondant au même matériau avec une cavité sphérique soumise à la dépression $P_f = 17,5 \min(t/600,1)$.

Bien que la comparaison soit encourageante il convient de rappeler que lorsque nous remplaçons un problème 2D ou 3D par un problème 1D, nous n'obtenons que des informations partielles sur la solution réelle : une variation du volume de la cavité par exemple. L'étude d'autres phénomènes tels que la remontée de la cavité ou la stabilité locale de sa paroi nécessite un calcul complet.



FIG. 9 – Cavité soumise à une dépression variable Q et uniforme P_f



FIG. 10 – Cavité soumise à une dépression variable Q et uniforme P_f

3.2 Couplage thermo-mécanique

3.2.1 Introduction

Une des caractéristiques de l'exploitation des cavités salines profondes est que la sollicitation subie par le massif avoisinant la cavité n'est pas seulement mécanique (création des vides souterrains) mais aussi thermique, ne serait-ce que par le fait que, durant la phase de lessivage, le massif rocheux est en contact, pendant longtemps, avec une grande quantité d'eau initialement à une température inférieure à celle de la roche. Comme par ailleurs le comportement visqueux des roches salines est fortement sensible à la température (Tijani [41, 43]), on ne peut que rappeler qu'il est souhaitable que les modélisations des sites de cavités salines soient réalisées en prenant en compte le couplage thermo-mécanique.

L'utilisation d'une logiciel 1D comme CYSIF permet de réaliser des études visant principalement à comprendre les phénomènes physiques comme par exemple l'influence de la vitesse de soutirage du gaz dans une cavité de stockage (Rapport interne pour Gaz de France, 1987). Le principal phénomène est que la diminution de la température conduit à une diminution de la pression tangentielle (qui risque de devenir une traction). C'est ce phénomène qui sera souligné ici pour justifier l'intérêt du paragraphe suivant concernant les faibles déviateurs.

3.2.2 Déviateur des contraintes à la paroi d'une cavité

La création d'une cavité saline (lessivage) puis son éventuelle exploitation pour le stockage de fluides conduisent à une baisse (en valeur absolue) de la contrainte radiale (par rapport à la pression géostatique) et à une baisse de la température (par rapport à l'état géothermique).

Si l'on oublie la variation de la température et si l'on considère une roche élastique, la chute de la contrainte radiale conduit à une augmentation de la contrainte tangentielle et donc à un déviateur élevé (différence des deux contraintes). C'est en général ce déviateur qui est utilisé pour définir les conditions des essais de fluage au laboratoire. Et comme ces essais durent longtemps, on choisit souvent un nombre fort limité de valeurs du déviateur et ce en privilégiant les fortes valeurs.

Continuons à ignorer la variation de la température mais prenons en compte le vrai comportement fluant des roches salines. Alors, suite à un phénomène de "relaxation", le déviateur des contraintes à la paroi de la cavité est souvent nettement plus faible que celui du cas élastique.

En thermo-élasticité (voir par exemple [6]) une baisse de la température s'accompagne d'une baisse du déviateur qui peut être plus élevée que la hausse consécutive à la chute de la contrainte radiale. Ce phénomène n'est lié évidemment qu'à la dilatation thermique puisque les paramètres élastiques du matériau ne dépendent pas de la température.

Ainsi, les phénomène de viscosité (relaxation) et de dilatation thermiques (lors d'une chute de la température) se conjuguent et finissent largement par conduire à une forte baisse du déviateur des contraintes au voisinage des parois des cavités justifiant l'intérêt à porter au comportement rhéologique des roches salines sous faible déviateur et ce principalement pour les études de l'évolution à long terme des cavités salines (en particulier dans le contexte de l'abandon).

3.2.3 Cavité sphérique en thermo-élasto-viscoplasticité

Il est possible d'expliquer par voie analytique tous ces phénomènes en choisissant un exemple simple. Considérons en effet un milieu infini, homogène et isotrope avec une cavité sphérique de rayon a(t) (fonction non décroissante du temps). Le milieu est initialement sous un état homogène de température T_0 et de contraintes $\sigma_0 = -P_0 \mathbf{1}$.

Le matériau est élastoviscoplastique sans plasticité instantanée. Il est caractérisé par un module d'Young E, un coefficient de Poisson ν , un coefficient de dilatation thermique linéique α_L et une loi rhéologique arbitraire mais qui rend compte correctement du fluage du sel gemme (en particulier la vitesse de déformation équivalente non élastique est une fonction croissante du déviateur des contraintes). Le raisonnement est fait dans le cadre des transformations infinitésimales.

L'espace est repéré par la distance r au centre de la cavité (qui est fixe). L'historique du champ des températures $T(r,t) = T_0 + \Theta(r,t)$ est supposé connu. Dans la pratique (c.à.d. avec des données habituelles du terrain), la fonction $\Theta(r,t)$ est négative ou nulle (baisse de la température dans le massif rocheux). Nous supposons aussi que la contrainte radiale à la paroi $\sigma_r(a(t),t) = -P0 + s_r(a(t),t)$ est connue et que la fonction $s_r(r,t)$ est positive ou nulle (chute de la contrainte radiale). Par ailleurs nous nous placerons dans une situation fréquente où en tout point et à tout instant le déviateur des contraintes $\sigma = \sigma_r - \sigma_{\theta}$ est positif.

Les fonctions de (r, t) inconnues sont : la contrainte radiale $\sigma_r = -P_0 + s_r$, le déviateur des contraintes $\sigma = \sigma_r - \sigma_{\theta}$, le déplacement radial u et les déformations viscoplastiques déviatorique $\varepsilon^p = \varepsilon^p_r - \varepsilon^p_{\theta}$ et volumique $\varepsilon^p_v = \varepsilon^p_r + 2\varepsilon^p_{\theta}$. Pour obtenir la contrainte moyenne, il suffira d'utiliser l'égalité $\sigma_r + 2\sigma_{\theta} = 3\sigma_r - 2\sigma$.

La loi de partition (décomposition de la déformation totale en partie élastique, partie thermique et partie non élastique) se résume en les deux égalités suivantes dans les quelles $u/r = \varepsilon_{\theta}$ est la déformation tangentielle et $u_{,r} = \varepsilon_r$ est la déformation radiale :

$$u_{,r} - u/r = [(1+\nu)/E]\sigma + \varepsilon^p$$

$$u_{,r} + 2u/r = [(1-2\nu)/E](3s_r - 2\sigma) + 3\alpha_l\Theta + \varepsilon^p_v$$

En utilisant l'équation d'équilibre $s_{r,r}+2\sigma/r=0$ la première relation de partition devient : $[u/r]_{,r} = -[(1 + \nu)/(2E)]s_{r,r} + \varepsilon^p/r$. Sachant que $s_r(+\infty, t) = 0$ (condition à la limite) et qu'il en est de même pour u/r (nous admettons juste que le déplacement radial à l'infini reste fini) on en déduit que :

$$u(r,t)/r = -[(1+\nu)/(2E)]s_r(r,t) - \int_r^\infty \varepsilon^p(x,t)/xdx$$

Cette relation est déjà intéressante : on y retrouve le fait (signalé par d'autres auteurs) que le déplacement à la paroi de la cavité r = a(t) (donc sa variation relative de volume) n'est pas directement influencée par la variation Θ de la température (l'influence se fait via la variation des paramètres rhéologiques). Mais ce qui nous importe ici est de remarquer que la variation du volume de la cavité dépend des déformations non élastiques de tout le massif (via l'intégrale $\int_r^{\infty} \varepsilon^p(x,t)/xdx$). Donc, même les zones loin de la cavité (dans lesquelles le déviateur est faible) contribuent à la variation du volume de la cavité. D'où l'intérêt et la nécessité de bien modéliser le fluage du matériau sous faible déviateur. L'utilisation des équations de partition et de l'expression de u/r permet de déterminer le déviateur des contraintes σ en fonction de s_r , Θ , ε_v^p et de $\zeta(r,t) = \varepsilon^p(r,t) - 3 \int_r^\infty \varepsilon^p(x,t)/x dx$. On obtient, en tout point et à tout instant :

$$\sigma = (3/2)s_r + [E\alpha_L/(1-\nu)]\Theta + [E/(1-\nu)/3](\varepsilon_v^p - \zeta)$$

Le déviateur des contraintes est la somme de trois termes. Les deux premiers ne dépendent que de ce qui se passe au point considéré r via la baisse de la pression s_r (différence entre la pression géostatique et la pression actuelle) et la variation Θ de la température (par rapport à l'état géothermique). Sachant qu'en général, à la paroi de la cavité, $s_r \geq 0$ et $\Theta \leq 0$, les deux mécanismes ont des effets opposés et le phénomène de dilatation thermique est loin d'être négligeable dans le cas du sel gemme (de l'ordre de 1 MPa/degré). Retenons donc qu'en thermo-élasticité, le déviateur des contraintes à la paroi de la cavité est plus faible que celui obtenu en élasticité isotherme.

Le troisième terme est lié au comportement visqueux du matériau et dépend donc du modèle rhéologique. Il est constitué de deux parties. La première est due à la déformation viscoplastique volumique qui à l'instar de s_r et Θ ne fait intervenir que la valeur au point rde ε_v^p . Lorsque cette quantité est positive (phénomène de dilatance), on a une augmentation du déviateur des contraintes. Quand nous en saurons plus sur la dilatance du sel gemme il faudra revenir sur cette remarque car le phénomène est "amplifié" ($\varepsilon_v^p \ge 0$ entraîne un accroissement du σ qui conduit à une augmentation de ε_v^p). Il est même possible de construire une loi de comportement pour laquelle c'est tout le terme ($\varepsilon_v^p - \zeta$) qui est positif.

La seconde partie du terme "visqueux" est due à la déformation viscoplastique déviatorique du massif par l'intermédiaire de la fonction $\zeta(r,t) = \varepsilon^p(r,t) - 3 \int_r^\infty \varepsilon^p(x,t)/x dx$. Contrairement aux trois premiers termes, cette fois ci, tout le massif rocheux $x \leq r$ intervient dans la valeur en r de ζ .

Pour r = R fixé et $x \leq R$, procédons au changement de variable $\xi = (R/x)^3$ et posons $\gamma_R(\xi, t) = \varepsilon^p(x, t)/\xi$. Comme $d\xi/\xi = -3dx/x$, il vient $\zeta(R, t) = \gamma_R(1, t) - \int_0^1 \gamma_R(\xi, t)d\xi$ qui est la différence entre la valeur prise par la fonction γ à l'extrémité de l'intervalle]0,1] et de sa moyenne sur cet intervalle.

Par conséquent, si γ est une fonction croissante de ξ on aura $\zeta(R,t) \geq 0$. Cela signifie que si $r^3 \varepsilon^p(r,t)$ est une fonction décroissante de r on aura la positivité de $\zeta(r,t)$ et donc une baisse du déviateur (phénomène de relaxation).

En fait, les modélisations numériques montrent qu'à chaque instant, l'espace $r \ge a(t)$ est constitué de deux zones : une partie proche de la cavité dans laquelle ζ est positive (d'où relaxation des contraintes) et une partie où on a une augmentation du déviateur, montrant ainsi une fois de plus l'intérêt de la partie du massif rocheux située loin de la cavité.

On peut aussi s'intéresser à la contrainte moyenne, soit pour définir une valeur raisonnable du confinement des essais triaxiaux de fluage, soit lorsque le modèle rhéologique fait intervenir la contrainte moyenne et en particulier quand il s'agit du phénomène de dilatance. La relation $-(\sigma_r + 2\sigma_\theta)/3 = P_0 + (2/3)\sigma - s_r$ montre alors que la variation de la contrainte moyenne ne fait intervenir que les deux mécanismes de dilatation thermique et de viscosité :

$$-(\sigma_r + 2\sigma_\theta)/3 = P_0 + [2E\alpha_L/(1-\nu)/3]\Theta + [2E/(1-\nu)/9](\varepsilon_v^p - \zeta)$$

3.3 Influence des faibles déviateurs

3.3.1 Définition du problème "réel fictif"

Dans un but illustratif nous imaginons ici un problème fictif qui sera traité comme s'il était réel. L'avantage du problème fictif est que nous en connaissons à l'avance toutes les données. Par conséquent, d'une part, nous connaissons sa vraie solution (à la précision près d'éventuelles simulations numériques) et d'autre part, nous pouvons le traiter comme nous le faisons avec un problème réel sauf que nous pouvons choisir la partie des données à considérer comme inconnue. Ainsi, dans la comparaison entre la solution réelle (du problème fictif) et la solution de notre modélisation nous saurons que la différence est due forcément à la partie des données que nous avons décidé d'ignorer. Pour prouver, par un exemple, l'importance du comportement du sel sous faible déviateur, nous considérons un exemple dans lequel toutes les données s'adaptent bien à une résolution numérique dont la précision est suffisante pour admettre que la solution obtenue est la "solution de référence" appelée dans la suite "mesures *in situ*".

Le problème "réel fictif" concerne une cavité sphérique de rayon fixe, réalisée dans un milieu continu, infini, homogène et isotrope. Toute la phase étudiée est isotherme (problème purement mécanique). Le milieu est initialement sous contraintes nulles (compte tenu de la rhéologie choisie pour le matériau on peut partir d'un état contraint isotropiquement). La cavité est soumise à une dépression $P_f(t) = 17,5 \min(t/600,1)$ (unités : jour et MPa).

Evidemment nous connaissons à l'avance la loi de comportement du matériau constitutif du milieu. Il s'agit ici de la loi de Lemaitre légèrement modifiée dans la gamme des "faibles déviateurs". Mais il convient d'insister sur le fait que cette expérience numérique peut se faire avec tout autre modèle rhéologique. Toutes les équations et les données du modèle choisi sont définies au paragraphe 2.5.3 (page 36) sauf le coefficient de Poisson ($\nu = 0, 25$). Cependant, dans la suite, nous allons admettre que nous connaissons avec certitude toutes les données du problème réel à l'exception de la loi de comportement du matériau.

3.3.2 Essais de laboratoire

Comme dans un problème réel, nous avons besoin de réaliser des essais d'identification d'un modèle rhéologique. A cette fin nous soumettons le matériau "réel fictif" à un essai standard de fluage multi-paliers (dont la réponse est évidemment celle du modèle défini cidessus mais que nous ne sommes pas censés connaître). Le résultat du pseudo-essai est alors analysé avec le modèle de Lemaitre classique, qui après ajustement des paramètres nous donne pratiquement les mêmes valeurs ($K = 0, 9, \alpha = 0, 5, \beta = 3, 7$) mais, cette fois, la loi puissance du déviateur est valable pour toute valeur du déviateur.

Certes, l'ingénieur chargé de l'étude a bien remarqué (figure 8) que l'ajustement est globalement satisfaisant mais le modèle sous-estime le fluage du premier palier (réalisé sous faible déviateur). Cependant, c'est avec le modèle ajusté qu'il procède à la résolution du problème "réel fictif".

3.3.3 Insuffisance du modèle

Contrairement à un site réel notre site "réel fictif" présente le très grand avantage d'être totalement informé : nous pouvons y effectuer toutes les mesures *in situ* que nous voulons.



La comparaison (figure 11) entre les mesures et la réponse du modèle ajusté sur l'essai de fluage multi-paliers montre que la théorie sous-estime fortement la diminution du volume.

FIG. 11 – Comparaison entre la réalité et le modèle $\alpha = 0, 5$



FIG. 12 – Comparaison entre la réalité et le modèle $\alpha = 0,57$

Une attitude courante face à une telle situation est d'expliquer ce désaccord entre réalité et modèle en arguant que l'échantillon utilisé au laboratoire pour déterminer la loi de comportement du matériau n'est pas assez représentatif du massif rocheux et/ou que les durées des essais de laboratoire sont trop courtes (effet d'échelle). Un palliatif consiste alors à recaler les valeurs déduites du laboratoire pour obtenir une meilleure adéquation avec les mesures *in situ*. L'application de cette démarche à notre cas "réel fictif" a permis d'améliorer notablement le modèle en ce qui concerne la variation du volume (figure 12) et ce en ne modifiant que l'exposant α qui passe de 0,5 à 0,575 avec comme justificatif la prise en compte du changement d'échelle des temps.

Sur les mêmes figures de comparaison (11 et 12) on a représenté l'évolution dans le temps du déviateur à la paroi de la cavité qui montre que cette contrainte est loin d'atteindre la valeur de (3/2)*17,5=26,25 MPa prévue par la réponse élastique. Si, de plus, on tient compte de la décroissance du déviateur dans l'espace (en fonction de la distance au centre de la cavité) on ne peut qu'en déduire que c'est notre mauvaise connaissance du comportement du matériau sous "faible déviateur" qui a été la vraie cause de la divergence entre réalité et modèle (figure 11).

L'objectif principal de l'exemple illustratif est déjà atteint mais nous pouvons en profiter pour faire un parallèle osé avec une réalité fréquente. Notre expérience "réelle fictive" peut faire l'objet d'un "benchmark". On fournit aux diverses équipes toutes les données géotechniques du problème ainsi que les résultats de l'essai de fluage. Les équipes doivent alors prédire la variation de volume mesurée in situ ("blind prediction"). Une équipe a choisi d'ajuster un modèle de Lemaitre sur l'essai de fluage et a obtenu les résultats de la figure 11. Dans une deuxième phase les équipes sont invitées à faire un calage de leur modèle connaissant les vrais résultats (mais uniquement la variation de volume). Notre équipe modifie alors la valeur de l'exposant du temps α en le justifiant (effet d'échelle) et obtient de bons résulats (figure 12). Cependant, dans une troisième étape, on exhibe des mesures complémentaires (la contrainte tangentielle à la paroi de la cavité, donc le déviateur). Un nouveau calage s'impose. Or, comme le montrent clairement les deux figures ci-dessus, aucune des deux valeurs de l'exposant α ne rend compte correctement de cette nouvelle mesure in situ. Cette parenthèse souligne une évidence : la qualité d'un modèle (au sens général) réside principalement dans sa cohérence globale avec toutes les données réelles (mesures *in situ*, essais de laboratoire, justifications théoriques ...) et non dans sa souplesse à s'adapter parfaitement, au cas par cas, à chaque partie des données.

3.3.4 Un autre calage

En refaisant un ajustement du modèle de Lemaitre sur toutes les mesures *in situ* disponibles (volume et déviateur) on constate qu'il n'est pas nécessaire de modifier la valeur de l'exposant $\alpha = 0,5$ déduite de l'essai de fluage. Mais l'influence du déviateur (paramètres β et K) est à revoir. Le résultat (figure 13) montre non seulement une amélioration de l'adéquation concernant le déviateur mais aussi une représentation quasi parfaite de l'évolution de la variation relative du volume de la cavité. Cependant, le retour à l'essai de fluage (figure 14) montre que le modèle est incomplet. Cela n'est pas grave en soi (car l'objectif final d'un modèle est son application à une réalité industrielle) mais cela souligne que l'identification de lois au laboratoire doit être fondée sur des essais réalisés dans des conditions (températures, contraintes, vitesses ...) analogues à celles du terrain.



FIG. 13 – Réalité in situ et modèle $\alpha = 0, 5 - \beta = 3 - K = 0,525$



FIG. 14 – Réalité laboratoire et modèle $\alpha=0,5-\beta=3-K=0,525$

3.3.5 Ampleur de la zone à faible déviateur significatif

Nous venons de voir que, suite au comportement viscoplastique du sel et au phénomène de relaxation, l'amplitude du déviateur à la paroi de la cavité est notablement plus faible que celui que prévoit la théorie de l'élasticité (de plus, ceci est accentué par la dilatation thermique en cas de refroidissement de la paroi). Par ailleurs, les conséquences de ce phénomène (en particulier sur la variation du volume de la cavité) se retrouvent exacerbées parce qu'il s'étend à un grand volume du massif rocheux. Autrement dit, si le fluage du sel ne conduisait qu'à une baisse du déviateur au voisinage immédiat de la cavité sans une grande modification de sa distribution dans le reste de l'espace, l'influence sur la variation relative du volume ou les affaissements en surface aurait été plus réduite. Mais, dans la pratique, on a effectivement cette atténuation du déviateur au voisinage de la paroi de la cavité mais aussi une augmentation de la zone où le déviateur a une valeur significativement non nulle.

Les résultats du logiciel CYSIF correspondant au cas "réel-fictif" ont été analysés à la fois dans le temps et dans l'espace (en fonction du rayon qui est la distance au centre de la cavité) pour exhiber un rayon $r_D(t)$ fonction du temps tel que le déviateur (différence des contraintes radiale et tangentielle) soit supérieur à une valeur fixée D dans toute la zone $[a, r_D(t)]$ entourant la cavité de rayon a. La figure 15 représente l'évolution dans le temps du rayon adimensionnel $r_D(t)/a$ et ce pour deux valeurs de D (0,25 et 0,50 MPa). Sur la même figure, on a représenté la réponse théorique de la même structure soumise à la même sollicitation mais avec un matériau élastique. Le résultat, qui d'ailleurs a été obtenu avec d'autres lois de comportement programmées dans CYSIF telles que Norton-Hoff, Munson-Dawson, Passaris ..., se passe de commentaire (ampleur de la zone de roche sollicitée sous faible déviateur mais significatif vis-à-vis du fluage).



FIG. 15 – Rayon de la zone où le déviateur est supérieur à 0,25 ou 0,50 MPa
3.4 Simulation du lessivage

3.4.1 Présentation

La prise en compte de la phase de lessivage lors de la résolution du problème thermomécanique concernant le massif rocheux, à l'aide de logiciels 2D ou 3D, est une opération relativement compliquée à cause de l'existence d'une frontière mobile (paroi de la cavité). Le chapitre suivant (consacré au problème thermique) présentera un exemple qui montre le niveau de difficulté. Mais, dans ce paragraphe, nous allons admettre qu'il est difficile de prendre en compte l'évolution de la paroi de la cavité dans un vrai calcul mécanique 2D ou 3D (maillage mobile). Ces calculs par Eléments Finis sont alors réalisés avec des cavités dans leur état final (après lessivage). Nous pouvons alors connaître l'historique du massif rocheux à l'extérieur de ces cavités uniquement en connaissant l'historique du vecteur effort $\vec{\sigma}(\vec{x},t) = \sigma \vec{n}$ exercé sur les parois. Cette affirmation est rigoureuse et concerne tout l'historique y compris durant la phase de lessivage et est valable pour tout massif rocheux (hétérogénéité, non linéarité des lois de comportement des matériaux ...). Cependant, le champ $\vec{\sigma}(\vec{x},t)$ sur les parois des vides souterrains modélisés (géométrie finale fixe) n'est pas connu durant la phase de lessivage. On ne le connaît qu'au début de la phase (t = 0, t)contraintes géostatiques) et à la date finale t_F (la saumure est maintenant en contact avec les parois des cavités).

Pour pallier notre ignorance de l'historique de l'effort, les calculs sont souvent effectués en admettant une variation linéaire dans le temps :

$$\vec{\sigma}(\vec{x},t) = (1-f(t))\vec{\sigma}(\vec{x},0) + f(t)\vec{\sigma}(\vec{x},t_F)$$
$$f(t) = t/t_F$$

Cette simplification du problème contient en fait deux hypothèses. La première égalité exprime que l'évolution dans le temps de l'effort est "indépendante" du point \vec{x} sur la paroi : les historiques de $\vec{\sigma}(\vec{x})$ pour tous les points utilisent la même fonction du temps f(t). C'est seulement la seconde hypothèse qui stipule la linéarité de l'application f de $[0, t_F]$ sur [0, 1]. En ce qui concerne le premier point, rappelons qu'au paragraphe 3.1.3 (page 45) nous avons vu que, dans la pratique, l'effort $\vec{\sigma}(\vec{x})$ correspond à une pression $Q(\vec{x}, t)$ qui, suite à une heuristique, peut être remplacée par une simple fonction du temps $P_f(t)$. Si cette heuristique est admise alors elle justifie la première hypothèse.

En revanche, la seconde hypothèse amène une question d'une autre nature. Même sans développement mathématiques sophistiquées on sent que la fonction f(t) ne peut pas être indépendante de l'historique de l'évolution de la paroi de la cavité et est certainement liée aussi à la rhéologie du matériau. Pour nous convaincre, si besoin en était, de l'influence de l'évolution de la cavité sur f(t), il suffit de nous rappeler que si le matériau est élastique et que la cavité est sphérique de rayon a(t) et qu'elle est soumise à une dépression constante P_f , la dépression au rayon fixe $r = a(t_F)$ serait $P_f[a(t)/a(t_F)]^3$. Donc la fonction f(t) = $[a(t)/a(t_F)]^3$ dépend bien de l'historique du rayon de la cavité et n'est linéaire que lorsque le lessivage se fait avec une production de masse de sel à vitesse constante et lorsque le sel est élastique linéaire. Pour déterminer le lien entre a(t) et f(t) dans le cas d'une vraie rhéologie du sel (élastoviscoplasticité) on est amené à faire appel à un code numérique tel que CYSIF à moins de disposer d'une solution analytique (qui existe pour certains modèles rhéologiques qui se prêtent à une analyse mathématique jusqu'à la solution).

3.4.2 Dépression réduite dans le cas du sel gemme

A titre encore d'exemple, on reprend le modèle de Lemaitre (E = 25000, $\nu = 0, 25$, K = 0, 9, $\alpha = 0, 5$, $\beta = 3, 7$, unités : jour, MPa) avec une cavité sphérique créée en une durée $t_F = 600$ jours et telle que, dès qu'elle existe (aussi petite soit elle), elle est soumise à une dépression constante de 17,5 MPa. Nous allons considérer trois cas pour l'évolution du rayon de la cavité sous la forme $a(t)/a(t_F) = (t/t_F)^k$ avec k=1 (lessivage durant lequel l'épaisseur dissoute varie à vitesse constante), k=3 (lessivage durant lequel la masse dissoute varie linéairement dans le temps) et k=2 (situation intermédiaire). On peut démontrer que le rayon final $a(t_F)$ ne joue qu'un rôle "d'unité de longueur" pour l'espace et pour les déplacements (étude adimensionnelle). Durant le lessivage, la dépression (contrainte radiale) au rayon $r = a(t_F)$ varie en fonction du temps. En la divisant par la dépression constante de 17,5 MPa on obtient la fonction f(t) (dépression réduite).

Nous savons que si le matériau était élastique nous aurions $f(t) = [a(t)/a(t_F)]^3$. Il est alors naturel de représenter les résultats en portant en ordonnées la dépression réduite f(t)et en abscisses, non pas le temps, mais $a(t)/a(t_F) = (t/t_F)^k$ dans les trois situations de variation linéaire : du rayon (k = 1), de la surface (k = 2) et du volume (k = 3). Sur la même figure (16) on a aussi représenté la réponse d'un matériau élastique. Ce résultat montre que si on souhaite une modélisation correcte de la phase de lessivage dans un calcul 2D ou 3D il est préférable de déterminer la fonction f(t) par un logiciel 1D qui dispose de la fonctionnalité de prise en compte de la variation du rayon de la cavité. Cette démarche a été appliquée avec succès pour rendre compte de subsidences mesurées à l'aplomb d'un réseau de cavités de production de sel par dissolution.



FIG. 16 – Dépression réduite pour simuler la phase de lessivage

La figure 16 montre aussi que si l'on se contente d'une fonction f(t) simple il est conseillé de ne pas utiliser la solution élastique mais de considérer qu'en première approximation f(t)est le rapport entre le rayon moyen de la cavité à l'instant t et sa valeur à la fin de la phase de lessivage (géométrie après lessivage, celle là même qui fait l'objet d'une maillage pour des logiciels fondés sur la Méthode des Eléments Finis).

Comme nous avons déjà vu que la viscosité du sel gemme conduisait à une atténuation du déviateur et que la dilatation thermique avec baisse de la température à la paroi avait le même effet, il est logique de se demander si la concordance des effets de ces deux mécanismes très différents existe aussi pour le facteur de dépression f(t). La question est d'autant plus pertinente que justement durant une phase de lessivage des cavités salines la température du fluide dans la cavité est en général plus basse que la température du massif rocheux. Pour répondre à cette question, au moins à travers un exemple, faute de démonstration générale rigoureuse, un calcul thermo-élastoviscoplastique (figure 16) a été réalisé avec les logiciels 1D avec prise en compte du lessivage : POTCSF (pour la thermique transitoire) et CYSIF (pour la thermo-mécanique : mécanique avec un modèle rhéologique, dilatation thermique et effet de la température sur le fluage du matériau).

Il est clair pour les spécialistes que la fonction f(t) est analogue au "facteur de déconfinement" connu dans la Méthode Convergence-Confinement utilisée principalement pour l'étude du soutènement des tunnels. Ceci n'a rien de surprenant puisque dans les deux cas nous cherchons à tenir compte, dans notre modélisation du massif rocheux, d'une destruction volontaire de la matière (frontière mobile) par une technique approchée qui évite une simulation lourde dans laquelle, pas à pas, on supprimerait des mailles d'une discrétisation par Eléments Finis (désactivation des mailles).

4 Prise en compte du lessivage des cavités salines

Dans mes travaux de recherche, j'avais déjà été parmi les chercheurs qui ont souligné l'importance de la température dans l'étude des cavités réalisés dans les formations géologiques salines. D'une part, le comportement ductile du sel gemme est fortement influencé par la température (Tijani [41, 43] et rapport interne en 1976) et d'autre part, le couplage thermo-mécanique (non seulement via la rhéologie mais aussi via la dilatation thermique) doit être pris en compte, comme je l'ai signalé en 1977 dans un rapport interne pour Gaz de France intitulé "Influence des cycles d'injection/soutirage sur la variation du volume d'une cavité de stockage et sur l'extension de la zone plastique".

Par ailleurs, la cinétique de dissolution des roches salines étant influencée par la température, il est nécessaire de déterminer correctement l'évolution de la température dans la cavité qui devient alors une donnée pour les logiciels qui simulent le lessivage.

Ce chapitre est alors consacré à la résolution du problème thermique durant la phase de lessivage d'une cavité saline. Il consiste en une synthèse des résultats d'un projet de recherche durant lequel Ahmed Rouabhi a réalisé le logiciel CHALES sous ma direction (Tijani et al [37], voir annexe H). Durant ce projet CEP&M commun à Gaz de France, Géostock et Ecole des Mines de Paris nous avons pu confirmer des résultats auxquels j'avais déjà aboutis dans mes travaux scientifiques précédents et qui s'étaient concrétisés par la réalisation des logiciels CYSIF et POTCSF ([10], Tijani et al [50]).

La démarche suivie pour aborder le problème thermique complet n'est pas nouvelle. D'autres auteurs l'avaient adoptée depuis plus de 20 ans ([5]) en réalisant des codes numériques 1D. Raison pour laquelle, l'objectif initial du projet CEP&M était l'étude de faisabilité d'un logiciel 2D. Mais la recherche que nous avons menée, Ahmed ROUABHI et moi même, a montré clairement que malgré le progrès des Méthodes Numériques et Informatiques, l'approche par passage à 1D reste encore celle qui présente un meilleur compromis entre précision et temps de calcul. Gaz de France aurait donc continuer à utiliser l'ancien logiciel 1D ([5]).

Cependant, au cours de cette recherche, d'une part j'ai montré que dans la simplification de la géométrie de la cavité (passage à 1D) il est préférable de considérer une cavité sphérique de même surface que la cavité réelle (dans le passé on conservait le volume) et d'autre part, Ahmed ROUABHI et moi même avons poussé l'analyse de la mise en équations du problème simplifié aboutissant ainsi à une code numérique très efficace.

Les performances du logiciel CHALES (qui ne traite que le problème thermique durant la phase de lessivage) nous ont encouragés à définir un nouveau projet de recherche en collaboration avec Gaz de France pour l'étude du problème couplé thermo-mécanique durant la phase de lessivage (logiciel TEVLES comme Thermo-Elasto-Viscoplasticité durant le LESsivage) et la phase d'exploitation des cavités (logiciel TEVGAZ comme Thermo-Elasto-Viscoplasticité durant le stockage du Gaz).

Dans ce projet de recherche en cours de montage, avec l'aide d'Ahmed ROUABHI, j'utiliserai mes travaux scientifiques antérieurs (logiciel GEO1D, Tijani et al [50] et en particulier en ce qui concerne le couplage thermo-mécanique entre le solide (massif rocheux) et le gaz défini par ses fonctions thermodynamiques dont l'enthalpie.

4.1 Problème thermique avec frontière mobile

4.1.1 Evolution réelle de la forme d'une cavité

Durant la phase de lessivage la surface $\Sigma(t)$, paroi de la cavité, n'est connue qu'en un nombre très limité d'étapes (figure 17). En général, la cavité est presque symétrique (axe vertical de révolution) mais n'est pas, en toute rigueur, assimilable à une sphère. On remarque aussi l'existence d'une formation de zone d'insolubles au fond. Dans la suite, cette zone est "affectée" au liquide dans la cavité pour le bilan thermique. La dernière remarque est que le centre d'inertie de la surface $\Sigma(t)$ évolue dans le temps. La même figure présente aussi les 16 étapes de lessivage qui ont été calculées avec le logiciel CHEF (seul le maillage des 16 parties est dessiné mais le vrai maillage s'étend à une grande masse de terrain).



FIG. 17 – Paroi d'une cavité réelle à 4 dates et les 16 étapes modélisées

Le fait que la géométrie réelle (mesures *in situ*) de la cavité $\Sigma(t)$ ne soit pas connue de manière continue (à tout instant) n'est pas un problème en soi. En effet, le premier objectif d'une modélisation du problème thermique durant la phase de lessivage est de fournir l'historique des températures à la paroi de la cavité aux logiciels qui simulent le phénomène physico-chimique de dissolution comme par exemple SIMLESS ([16]). De tels logiciels détermineraient alors une estimation de l'évolution complète de la surface $\Sigma(t)$. Dans le couplage entre les deux modélisations ("thermique" qui reçoit $\Sigma(t)$ et fournit la température $T_f(t)$ dans le fluide contenu dans la cavité et "dissolution" avec une entrée/sortie inversée) le modèle thermique doit fournir, de manière correcte, une relation entre l'historique de la température $T_f(t)$ et celui du flux total $\Phi(t) = -\lambda \int_{\Sigma} \nabla T. \vec{n} dS$ échangé entre le massif rocheux et le contenu de la cavité. Cette relation qui ne dépend que du comportement thermique du massif rocheux (conducteur thermique de diffusivité k et de conductivité λ) est alors complétée par les lois de conservation de la masse et de l'énergie dans la matière contenue dans la cavité.

Lorsque l'on passe à la modélisation numérique avec des logiciels classiques (dans lesquels l'évolution de la frontière n'est pas déjà prise en compte par des algorithmes idoines), la véritable difficulté réside dans le fait que l'intégration dans le temps du problème ne peut se faire que par un découpage en un nombre fini de phases avec un changement brutal de la géométrie $\Sigma(t)$ entre deux phases (chacune des phases est traitée avec une paroi fixe de la cavité). A chaque passage d'une phase à la suivante, la nouvelle frontière $\Sigma(t)$ se retrouve soumise à un saut de la température qui conduit alors à une valeur infinie du flux $\Phi(t)$. Théoriquement, pour obtenir une bonne relation entre les historiques de $T_f(t)$ et de $\Phi(t)$ il faudrait que le nombre de phases soit infini. Comme il s'agit d'approche numérique il suffira que le nombre d'étapes soit assez grand. Mais nous verrons que cette démarche, sans algorithmes appropriés qui évitent à l'utilisateur ce découpage en phases, nécessite dans la pratique un trop grand nombre de phases (bien plus de 100).

Un logiciel 2D ou 3D muni des algorithmes nécessaires pour une bonne prise en compte de la variabilité de la frontière doit faire appel non seulement aux méthodes de résolution d'équations différentielles mais aussi à l'algorithmique géométrique (maillage adaptatif, suivi d'une frontière ...). Les rares logiciels 2D dédiés à la résolution du problème thermique en phase de lessivage ([3]) éludent cette difficulté en travaillant par "tranches horizontales" de sorte que le caractère mobile de la frontière soit finalement un problème 1D (par tranche). Mais de tels codes numériques ne sont pas adaptés à une évolution de la cavité avec changement de la hauteur et du centre d'inertie (figure 17).

En somme, il semblerait inévitable de continuer à faire appel à cette ancienne démarche [23] qui consiste à ramener le problème à une dimension en assimilant la cavité à une sphère. Mais, même en restant avec ces vielles hypothèses simplificatrices, les difficultés ne manquent pas pour aboutir à un code numérique efficace. D'une part, pour la prise en compte de la variabilité du rayon de la cavité, même en sphérique et même avec des paramètres k et λ constants, nous ne disposons pas de solution analytique générale et certaines démarches analytiques (transformée de Laplace, produit de convolution ...) s'adaptent mal au passage à une résolution numérique. D'autre part, la modélisation 1D ayant pour but de remplacer le cas réel, on peut se poser des questions importantes telles que le choix de la sphère qui représente le mieux la vraie cavité (conservation du volume ou de la surface ...?) et la prise en compte de l'évolution du centre d'inertie de la cavité réelle.

4.2 Modèle sphérique idoine

4.2.1 Choix du rayon de la cavité sphérique

Dans le passage de la vraie cavité $\Sigma(t)$ à une cavité sphérique de rayon a(t), jusqu'à présent, on a choisi une règle de conservation du volume. C'est cette règle qui avait été adoptée lors de l'étude du cas réel (figure 17) avec comparaison entre les résultats des calculs 2D et 1D (sphérique). Mais, comme les calculs 2D avaient été effectués en prenant en compte un gradient thermique dans l'état de référence, il nous a fallu trouver un moyen pour rendre compte dans le modèle 1D du fait que la cavité réelle non seulement grossit mais monte aussi. La réponse à cette question (paragraphe suivant) nous a amené à considérer que c'est la surface $\Sigma(t)$ qui compte et non le domaine $\Omega(t)$ qu'elle borde. C'est l'unique raison pour laquelle nous avons été tenté de faire un choix du rayon a(t) avec conservation de l'aire de $\Sigma(t)$ et non du volume de $\Omega(t)$. Evidemment, la différence entre les deux choix est faible tant que la vraie cavité reste assez compacte mais elle s'accentue lorsque l'élancement de la cavité (rapport hauteur/diamètre) s'éloigne de 1.

Nous avons évidemment tenté, mais en vain, de trouver une démonstration rigoureuse *a* posteriori de cette heuristique. Cela restera donc pour le moment dans les perspectives de la recherche en énonçant même un problème mathématique bien plus simple (frontière fixe). On se donne un problème thermique classique $k\Delta T = \dot{T}$ dans un milieu infini et isotrope avec un trou (surface fixe Σ). La température initiale est partout nulle. La paroi Σ est une surface isotherme (température $T_f(t)$) et on s'intéresse à la relation entre l'historique de T_f et celui du flux total $\Phi = -\lambda \int_{\Sigma} \vec{\nabla}T \cdot \vec{n} \, dS$. Le problème mathématique est alors de trouver le bon rayon *a* à attribuer à une cavité sphérique (dans le même milieu) de sorte que les deux relations (vraie surface Σ et sphère) soient les plus proches possibles.

Si de plus, la démonstration peut être généralisée au cas où Σ et *a* évoluent dans le temps et avec prise en compte d'un champs thermique initial (en équilibre permanent) alors l'heuristique sera démontrée.

En attendant, nous admettrons comme résultat empirique que le bon choix du rayon a(t) de la cavité sphérique représentant le mieux une vraie cavité $\Sigma(t)$ est celui qui vérifie la conservation des surfaces : $4\Pi a(t)^2 = \int_{\Sigma} dS$. Evidemment ce choix n'est imposé que dans le but de bien approximer la relation entre l'historique de la température T_f à la paroi de la cavité et celui du flux total Φ échangé entre le massif rocheux et le fluide contenu dans la cavité. L'historique du rayon a(t) de la cavité sphérique du problème 1D est déduit de celui de l'aire de la paroi réelle. En revanche, lorsque l'on complète la formulation du problème par l'équation du bilan d'énergie à l'intérieur de la cavité (problème 0D) on doit prendre en compte le vrai volume de la cavité réelle.

4.2.2 Prise en compte de la température initiale du massif

Dans le problème réel (surface $\Sigma(t)$) la température à la paroi est homogène (phénomène de convection) mais la température initiale du massif varie avec la profondeur z (fonction linéaire par morceaux). Le passage de la géométrie vraie à celle de la sphère (modèle 1D) ne nous pose donc pas de problème pour le choix de la température à affecter au rayon a(t) (il suffit de prendre $T_f(t)$) mais pour l'état initial on se retrouve avec une certaine difficulté. Ne disposant pas d'un cadre théorique général nous allons chercher à deviner une règle pratique qui sera alors vérifiée en comparant les résultats des deux calculs 2D (ou 3D) et le 1D sphérique. A cette fin, commençons d'abord par le cas où la paroi de la cavité $\Sigma(t)$ est une sphère de rayon a(t) et dont le centre est fixe (pris comme origine). En repérant l'espace par la distance r du point courant \vec{x} et par un vecteur \vec{n} qui décrit la sphère unité ($\vec{x} = r\vec{n}$), la température inconnue $T(\vec{x},t)$ dépend de \vec{n} car la température initiale $T(\vec{x},0)$ est une fonction affine de la composante verticale $z = \vec{x} \cdot \vec{k}$. Ainsi, bien que la cavité soit sphérique, le problème n'est pas encore 1D. Le fait que le champ initial $T(\vec{x},0)$ corresponde à un équilibre thermique permet de se ramener à un problème dont l'inconnue est $T(\vec{x},t) - T(\vec{x},0)$ qui est partout nulle à t = 0. Mais, pour la nouvelle inconnue, la paroi du trou n'est plus une isotherme et le problème demeure donc à deux dimensions.

Désignons par $\Gamma(r)$ une sphère de rayon r (indépendant du temps) et centré à l'origine et posons $\hat{T}(r,t) = \int_{\Gamma(r)} T(\vec{x},t) dS/S(r)$ avec $S(r) = 4\Pi r^2$. La fonction \hat{T} représente donc la moyenne de la vraie température sur la surface $\Gamma(r)$. En effectuant un changement de variable on se ramène à une intégrale sur la sphère unité : $\hat{T}(r,t) = \int_{\Gamma(1)} T(r\vec{n},t) dS/S(1)$. La dérivée de cette fonction par rapport à r est : $\hat{T}_{,r} = \int_{\Gamma(1)} \vec{\nabla} T \cdot \vec{n} \, dS / S(1)$. Le retour à la sphère $\Gamma(r)$ donne : $\hat{T}_{,r} = \int_{\Gamma(r)} \vec{\nabla} T \cdot \vec{n} \, dS/S(r)$. Etant donné que \vec{n} est un vecteur normal à la surface $\Gamma(r)$, il suffit de multiplier par la conductivité thermique pour obtenir le flux par unité de surface $\Psi(r,t)$ qui transite à travers $\Gamma(r)$ dans le sens croissant de r. Et on aura $\Psi(r,t) = -\lambda T_r$. Nous retrouvons la loi de Fourier pour un problème 1D. Il nous reste à utiliser la loi de conservation de l'énergie exprimée pour le domaine compris entre les sphères $\Gamma(r)$ et $\Gamma(r+dr)$. La puissance $(S(r)\Psi(r,t) - S(r+dr)\Psi(r+dr,t))$ sert à élever la température de ce domaine caractérisé par une chaleur volumique C (constante : $C = k\lambda$). En considérant que dr est un infiniment petit, l'intégrale de volume devient $\int_{\Gamma(r)} CT_{t} dS dr$. La sphère étant fixe, on peut sortir de l'intégrale la dérivation par rapport au temps et on obtient : $[-S(r)\Psi(r,t)]_r dr = CS(r)T_t dr$. D'où l'équation de conservation du problème 1D : $-\Psi_{,r} - 2\Psi/r = C\hat{T}_{,t}$. Le flux total $\Phi(t)$ à la paroi $\Sigma(t)$ de la cavité est : $\Phi(t) = S(a(t))\Psi(a(t),t)$ et la température T_f est telle que $T_f(t) = \hat{T}(a(t), t).$

Nous avons donc réussi à construire un problème 1D qui a la même réponse que le problème initial à condition de considérer le flux total à la paroi de la cavité et la moyenne sur cette paroi de la température. Compte tenu de la linéarité par rapport à z de la température initiale il suffit de la remplacer dans le problème 1D par la valeur qu'elle prend au centre d'inertie de la surface de la cavité.

Cette règle pratique de construction du problème 1D a été démontrée rigoureusement dans le cas où la cavité est une sphère et que son centre est fixe. Il est même possible de prouver que cette règle n'est vraie que dans ce cas. En effet, la démonstration ci-dessus utilise deux propriétés des surfaces S(r): l'élément dS/S est indépendant de r et la dérivée partielle de $T_{,r}$ est $\nabla T.\vec{n}$ pour toute fonction de l'espace $T(\vec{x})$ où \vec{n} est normal à S(r). D'autre part, la permutation de la dérivation par rapport au temps et de l'intégration sur la surface donnerait un "terme de transport" si le "centre" de la surface se déplace. Ainsi, l'application de cette règle au cas général ne peut être considérée que comme une approximation dont la précision est à apprécier par des expériences numériques.

4.2.3 Exemple d'application

L'exemple de la figure 17 a été traité avec le logiciel CHEF en tant que problème thermique transitoire 2D de révolution. Le modèle complet comporte diverses couches géologiques dont la couche saline où se trouve la cavité : $k=0,227 \text{ m}^2/\text{jour}, \lambda=0,432 \text{ MJ}/(\text{jour.m.K}).$

La phase de lessivage a été simulée en 16 phases. Durant chaque phase la cavité reste fixe et est soumise à une température uniforme et constante (la même pour toutes les étapes). A la fin de la phase, une "zone" est supprimée instantanément et la valeur fixe de la température est imposée sur la nouvelle frontière. Cette modélisation du lessivage n'est pas réaliste. Mais cela n'a pas d'importance car le modèle 2D constitue un problème mathématique bien défini et c'est ce problème que nous souhaitons remplacer par un problème 1D qui nous fournirait le même historique du flux total $\Phi(t)$ à la paroi de la cavité.

Le forme de la cavité à chacune des 16 étapes est traitée par un petit logiciel pour calculer la surface, le volume et la cote des centres d'inertie de la surface et du volume (informations utiles pour les calculs 1D).

Nous avons alors construit 4 problèmes 1D sphériques dans lesquels le rayon de la cavité sphérique a(t) a un historique constant par morceau (en 16 phases). Dans les 4 problèmes nous avions à choisir la correspondance entre le rayon a(t) et la cavité 2D (option classique : conservation du volume ou nouveau choix : conservation de la surface). De même, en ce qui concerne la température initiale à affecter au problème 1D nous avons une alternative : procéder comme avant en choisissant une valeur constante associée au centre de la cavité à l'état final ou suivre la nouvelle règle en prenant la valeur au centre d'inertie de la paroi de la cavité actuelle.

Les figures suivantes qui représentent le flux total en fonction du temps permettent de comparer la réalité (modèle 2D) et les 4 modèles 1D :

- \diamond Modèle avec conservation du volume (figures 18 et 20)
 - Les deux modèles 1D (centre fixe et centre mobile) sous-estiment systématiquement le flux durant les 16 phases.
- \diamond Modèle avec conservation de surface (figures 19 et 21)

Le modèle 1D avec centre mobile fournit les résultats les plus proches de ceux du modèle de référence 2D.

Ces figures montrent que la technique nouvelle de conservation de la surface est nettement plus efficace et que la prise en compte de la variabilité du centre d'inertie de la cavité apporte une petite amélioration à moindres frais. Ceci étant, ne perdons pas de vue que cette astuce originale de "température initiale variable dans le temps !" n'est qu'un artefact qui n'a aucun sens, même lorsqu'il s'agit d'une cavité réellement sphérique dont le centre se déplace verticalement. Raison pour laquelle, dans le logiciel CHALES, nous avons laissé à l'utilisateur la liberté d'utiliser ou non cet artefact en attendant que nous ayons suffisamment de recul. En revanche, il est indéniable que lorsque la cavité réelle est remplacée par une sphère, il est préférable d'affecter à la sphère un rayon avec le principe de conservation de la surface. Bien entendu, comme tous les spécialistes de la conduction thermique le savent, lorsque la cavité est allongée, le modèle 1D approprié est cylindrique (cylindre infini) car le vecteur flux thermique est principalement dans le plan orthogonal à l'axe de symétrie.



FIG. 18 - Conservation du volume - Centre fixe ou mobile



FIG. 19 - Conservation de la surface - Centre fixe ou mobile



FIG. 20 - Conservation du volume - Centre fixe ou mobile - Détail



FIG. 21 - Conservation de la surface - Centre fixe ou mobile - Détail

Par ailleurs, le modèle 2D lui même n'est pas réaliste : à cause de la mauvaise simulation de la vraie phase de lessivage on se retrouve avec des valeurs théoriquement infinies pour le flux total $\Phi(t)$ entre deux phases successives. Mais, nous allons justement profiter de la confiance que nous avons en la modélisation 1D pour montrer que le seul moyen pour que le lessivage soit bien simulé dans le modèle 2D est de prévoir un nombre d'étapes dépassant la centaine. Autant dire que dans l'état actuel de nos outils numériques une telle opération serait fastidieuse à mettre en oeuvre.

La modélisation 1D (surtout dans le cas sphérique qui se ramène aisément au problème du mur par un simple changement d'inconnue) a deux grands avantages : le premier, bien entendu, est de faciliter la prise en compte de la frontière mobile même dans des approches purement numériques mais le second est que nous disposons d'une littérature abondante concernant les solutions analytiques pour de tels problèmes dans un grand nombre de cas de figures (à titre de parenthèse, on retrouve d'ailleurs des ouvrages analogues, terminologie mise à part, dans le domaine de l'écoulement d'un fluide dans un milieu poreux : mathématiquement on a les mêmes problèmes mais les ouvrages thermiques ne citent pratiquement pas les ouvrages hydrauliques et la réciproque est vraie!).

Le second avantage peut être exploité pour construire des tests de validation des logiciels numériques 1D tels que POTCSF (1984) ou CHALES (2007) ce dernier étant bien plus complet puisqu'il traite tout le problème thermique y compris avec la prise en compte du puits et du bilan d'énergie à l'intérieur de la cavité.

Quant au premier avantage, il peut être exploité dans les problèmes industriels non seulement pour disposer d'une solution approchée la plus correcte possible concernant l'évolution de la température dans la cavité durant la phase de lessivage (information nécessaire pour les logiciels de lessivage) mais aussi pour se convaincre de constats pratiques tels que :

◊ Préférence pour la maîtrise des hypothèses d'une modélisation

Il est préférable de se contenter d'une approche 1D en maîtrisant l'impact des hypothèses simplificatrices que d'utiliser un logiciel 2D ou 3D qui n'est pas muni d'algorithmes appropriés pour la prise en compte de l'évolution d'une partie de la frontière du domaine étudié. Cette remarque d'ailleurs concernant la possibilité de mauvaises utilisations des codes 2D et surtout 3D est en fait générale.

◊ Utilisation pratique supplémentaire des modèles 1D

Diverses modélisations simplifiées mais raisonnables de la phase de lessivage conduisent pratiquement au même comportement thermique du site de cavités dans la phase postlessivage. On peut même montrer que le massif rocheux ne retient d'une phase antérieure (par exemple une phase de lessivage) assez ancienne que la quantité d'énergie totale échangée avec l'extérieur durant cette phase. Donc toutes les modélisations de cette phase passée qui conduisent à la même énergie sont équivalentes.

A l'instar du problème mécanique, il est donc possible de réaliser une étude 2D ou 3D de comportement à long terme (exploitation, abandon ...) en simplifiant la simulation de la phase de lessivage (par exemple en imposant à la paroi dans son état final l'historique de la température obtenu par une modélisation 1D de la phase de lessivage).

4.3 Problèmes thermiques 1D sphériques

4.3.1 Problème du mur

La température initiale du problème sphérique étant homogène (indépendante de r: distance au centre de la sphère) on peut se ramener au problème suivant : trouver la fonction T(r,t) avec $t \ge 0$ et $r \ge a(t)$ où a(t) est une fonction non décroissante connue (rayon de la cavité) qui vérifie la condition initiale T(r, 0) = 0 et les conditions aux limites T(a(t), t)fonction connue du temps (température à la paroi de la cavité) et $T(+\infty, t) = 0$. La condition à la paroi peut être aussi un flux ou une équation de conservation de l'énergie pour une masse (homogène) variable dans le temps. La fonction T(r,t) doit en plus vérifier l'équation différentielle qui exprime une loi de conservation de l'énergie dans laquelle on a tenu compte d'une loi de comportement (Fourier) : $k\Delta T = T_{,t}$ avec $\Delta T = T_{,rr} + 2T_{,r}/r$. Même lorsque a(t) est une constante, un moyen pour "simplifier" l'opérateur Laplacien consiste en un changement de fonction inconnue de la forme T = U/r car nous aurons $\Delta T = U_{rr}/r$. De plus, nous pouvons nous ramener à un espace fixe en posant x = r - a(t) de sorte que le vrai changement d'inconnue s'explicite sous la forme T(r,t) = U(r-a(t),t)/r. La nouvelle inconnue U(x,t) définie dans $x \ge 0, t \ge 0$ vérifie l'équation différentielle : $kU_{,rr} + \dot{a}U_{,r} = U_{,t}$ avec une condition initiale U(x,0) = 0 et une condition à la limite (à la paroi de la cavité) de la forme, par exemple, U(0,t) = a(t)T(a(t),t) fonction connue.

Une des variables qui nous intéresse dans le problème industriel traité est le flux total $\Phi(t) = -4\Pi a(t)^2 \lambda T_{,r}(a(t),t)$ à la paroi de la cavité mobile, flux qui s'exprime en fonction de la nouvelle inconnue en utilisant la relation : $T_{,r}(a(t),t) = U_{,x}(0,t)/a(t) - U(0,t)/a(t)^2$.

Lorsque $\dot{a} = 0$ (paroi fixe) nous aboutissons au problème classique du mur pour lequel nous disposons non seulement de solutions analytiques pour des données spécifiques mais aussi de démarches théoriques générales (transformée de Laplace, produit de convolution dans le temps, théorème de superposition conséquence de la linéarité du problème ...). On s'aperçoit d'ailleurs dans ces ouvrages combien est important le rôle de la Gaussienne $(exp(-(x^2)/2))$ et de sa primitive (erf(x)), fonctions qui ont une importance non seulement dans une discipline analogue (écoulement dans un milieu poreux) mais aussi en probabilité. La véritable particularité de l'équation différentielle $kU_{,rr} + \dot{a}U_{,r} = U_{,t}$ lorsque $\dot{a} = 0$ qui a permis des développements mathématiques poussés est que nous avons affaire à deux "coordonnées" scalaires (r et t) et que l'équation traduit l'égalité de deux opérateurs linéaires de dérivation par rapport à chacune des variables séparément et sans l'intervention explicite d'aucune des deux variables. La même situation se produit en élasticité linéaire dynamique monodimensionnelle.

Pour nous en convaincre il nous suffit d'appliquer à notre équation différentielle une transformée de Laplace par rapport au temps pour nous apercevoir que nous irions plus loin s'il n'y avait un produit de deux fonctions du temps $\dot{a}(t)U_{,r}(r,t)$. On remarque alors que pour progresser dans l'approche analytique il n'est pas nécessaire que $\dot{a} = 0$ mais la condition \dot{a} =constante est nécessaire et suffisante.

Ainsi le cas d'une cavité ayant un rayon a(t) qui évolue à vitesse constante peut être traité analytiquement surtout si en plus la température T(a(t), t) imposée à la paroi est constante. En effet, on retrouve le problème du mur en mouvement, traité complètement dans [14] au chapitre dédié à "d'autres applications de la transformée de Laplace". Cet exemple d'évolution linéaire du rayon a(t) a été utilisé pour comparer la solution théorique et les solutions numériques des logiciels POTCSF et CHALES qui peuvent traiter des historiques arbitraires du rayon de la cavité. Les deux logiciels restent dans la formulation d'origine $k(T_{,rr}+2T_{,r}/r) = T_{,t}$ en procédant à une intégration dans le temps par une méthode pas à pas dite d'Euler implicite. Le pas étant h on se retrouve à un instant t donné avec un problème dans l'espace $r \leq a(t)$ caractérisé par l'équation différentielle ordinaire $k(T_{,rr} + 2T_{,r}/r) = [T - T(r, t - h)]/h$ dans lequelle la fonction T(r, t - h) de r est connue. Cette équation est abordée dans POTCSF par la Méthode d'Eléments Finis 1D via une formulation variationnelle et dans CHALES par une solution analytique (Tijani et al [37]).

4.3.2 Solution du problème par produit de convolution

Revenons au problème de la sphère $k(T_{,rr} + 2T_{,r}/r) = T_{,t}$ et fixons un rayon $R \leq a(t)$. Alors, la température à tout instant t et pour tout rayon $r \leq R$, dépend uniquement de $T(R, \tau)$ pour tous les instants $\tau \leq t$ par un produit de convolution avec une fonction connue. On peut expliciter l'égalité et la dériver par rapport à r pour obtenir un flux qui utilisera donc à l'instant t, le rayon r et l'historique de $T(R, \tau)$ jusqu'à l'instant t. En particulier, le flux au rayon r = R est fonction de $\{T(R, \tau), \tau \leq t\}$. En passant à la limite R = a(t) on obtient le résultat comme quoi le flux $\Phi(t)$ qui nous intéresse (paroi de la cavité) est fonction de $\{T(a(t), \tau), \tau \leq t\}$ et non de $\{T(a(\tau), \tau), \tau \leq t\}$ comme proposé par [13].

Par conséquent, l'application du produit de convolution ne conduit pas à une approche numérique efficace car, pour obtenir le flux à un instant donné, nous devons "mémoriser" l'historique des températures de toute la matière supprimée (lessivée). Raison pour laquelle nous avons cherché une autre approche au moment de la rédaction du logiciel CHALES.

4.3.3 Simulation du lessivage par phases

Un code numérique 1D apte à prendre en compte une évolution a(t) arbitraire du rayon peut aussi fournir la solution lorsque la fonction a(t) est constante par morceaux. Cela permet alors de simuler ce que donnerait un code général 2D/3D lorsque le lessivage est modélisé par désactivation progressive d'un nombre fini de zones et d'étudier donc l'impact de ce nombre sur le résultat. Nous avons déjà vu précédemment, sur un cas emprunté à l'industrie, que le découpage de la phase de lessivage en 16 paliers à géométrie de cavité fixée par palier n'est pas raisonnable, que ce soit en 2D ou avec le modèle 1D équivalent, qui ont d'ailleurs donné des résultats assez voisins, pour nous fier ensuite aux conclusions dégagées de l'utilisation d'un modèle 1D quant au nombre suffisant d'étapes. Pour l'étude de l'influence de ce nombre, il suffit d'ailleurs de choisir un cas dont tout chercheur est en mesure de produire une solution analytique. On propose alors de revenir au cas d'une évolution du rayon de la cavité à vitesse \dot{a} constante.

Les données du problème de référence sont donc : une cavité sphérique dans un milieu infini de diffusivité $k=0,227 \text{ m}^2/\text{jour}$, de conductivité $\lambda=0,432 \text{ MJ}/(\text{jour.m.K})$ et dont la température initiale est nulle. La cavité évolue avec un centre fixe et un rayon en mètre a(t) =46,28t/600 où t est en jour. Nous nous intéressons au flux total $\Phi(t) = -4\Pi a(t)^2 \lambda T_{,r}(a(t),t)$ lorsque la température à la paroi est T(a(t),t) = 1 pour t > 0. Nous disposons déjà d'une solution analytique [14], mais le logiciel POTCSF a été utilisé pour résoudre ce problème de référence et aussi pour traiter le cas d'un rayon constant par phase. Sur la figure 22 qui présente $\Phi(t)$ on remarque que même avec 1000 phases le résultat n'est pas satisfaisant.





FIG. 22 – Influence du nombre de phases dans la modélisation du lessivage

4.3.4 Comportement thermique post-lessivage

L'exemple simple traité ci-dessus a été continué après la phase de lessivage $t_F=600$ jours en maintenant à 1 la température à la paroi fixe $a(t) = a(t_F)$ pour $t \ge t_F$. La figure 23 qui présente le flux $\Phi(t)$ dans la phase post-lessivage montre que même lorsque la phase de lessivage a été mal modélisée cela n'a pas de répercussion importante sur le comportement thermique post-lessivage de la cavité (exploitation pour stockage, abandon ...).



FIG. 23 – Influence du nombre de phases sur le comportement post-lessivage

En somme, dans son comportement thermique, le massif rocheux oublie au bout d'un temps plus ou moins grand ce qui lui est arrivé pendant la phase de lessivage. Ce phénomène est dû au fait que ce qui se passe en un point donné du massif et à un instant t est une fonction linéaire de ce qui s'est passé sur toutes les frontières des cavités (dans un réseau) pour tous les temps $\tau \leq t$. Dans cette "combinaison linéaire" (produit de convolution) les poids sont des fonctions décroissantes de $t - \tau$ de sorte qu'un événement qui s'est passé sur les cavités à un instant τ bien antérieur t se retrouve avec un poids suffisamment faible pour ne plus avoir d'influence. Comme cela a été dit précédemment, d'une phase (comme par exemple une phase de lessivage) antérieure assez ancienne, le massif rocheux ne retient que la quantité d'énergie échangée avec l'extérieur durant cette phase.

5.1 Présentation

Le thème général de recherches appliquées concernant le sel gemme (extractions minières classiques, production de sel par lessivage, réalisation de vides souterrains pour le stockage de divers produits ...) a été largement alimenté avec des problèmes scientifiquement riches et non moins largement soutenu financièrement par des industriels et des collectivités nationales et internationales et ce depuis une quarantaine d'années.

Le résultat actuel de cet effort collectif colossal est un très grand nombre de publications et de thèses avec une diversité de modèles et de points de vue. Mais, lorsqu'on côtoie régulièrement les industriels en charge d'études du fonctionnement de sites d'exploitation de sel, on prend réellement conscience que la recherche appliquée dans ce domaine a encore beaucoup à réaliser pour faciliter la tâche de l'industriel et ce dans une très grande variété de problèmes géotechniques pluridisciplinaires.

Le présent document peut alors être considéré comme une synthèse des problèmes scientifiques issus de cette recherche à finalité industrielle. Il est le fruit d'une longue activité du Centre de Géosciences de L'Ecole des Mines de Paris de recherches appliquées au comportement thermo-mécanique du sel gemme et des cavités salines.

Cette activité, qui continue grâce aux partenaires industriels (Gaz de France, Géostock, Salins du Midi, Solvay ...), comporte le développement et la réalisation d'essais de laboratoire spécifiques pour comprendre et quantifier le comportement thermo-mécanique des roches salines, le suivi de mesures et de tests *in situ* et la conception d'outils informatiques (numériques ou semi-analytiques) de modélisation des cavités salines.

Pour cet axe de recherche, le Centre de Géosciences dispose d'une halle d'essais et de chercheurs permanents qui, non seulement réalisent les expertises et les études expérimentales et numériques demandées par les partenaires mais aussi participent à des projets de recherche et de développement qui donnent lieu parfois à des sujets de formation par la recherche (stages, thèses ...).

Ce mémoire a cherché à souligner quelques uns des problèmes scientifiques liés aux préoccupations actuelles des partenaires industriels :

- ◊ critère de "stabilité" d'un réseau de cavités (dimensionnement, choix des formes, distances entre cavités ...);
- $\diamond \mod ele rhéologique du sel gemme qui rende compte le mieux possible des observations in situ (convergences dans les exploitations minières classiques, évolution des volumes des cavités, affaissements en surface, essais sur les cavités à puits ouvert ou fermé ...);$
- ◊ détermination du champs des températures durant la phase de lessivage (nécessaire pour mieux modéliser l'opération de lessivage dans les logiciels de prédiction qui résolvent les équations de dissolution et utile comme état initial pour le comportement thermo-mécanique des cavités dans la phase post-lessivage : exploitation et éventuellement abandon ou réhabilitation).

5.2 Critère de stabilité d'un réseau de cavités salines

La question posée ne concerne ici que la formation géologique saline et s'énonce ainsi : après un calcul thermo-mécanique dans lequel on a introduit toutes les lois physiques et les valeurs des paramètres qui représentent le mieux possible le comportement du sel gemme, comment juger de la stabilité du réseau de cavités à partir de l'historique des champs des contraintes, déformations et températures?

Lorsque le sel était supposé avoir une cohésion, on pouvait répondre à cette question en analysant l'évolution de l'étendue des zones plastiques.

Maintenant que la plupart des spécialistes sont d'accord sur le fait que le sel gemme est un "liquide visqueux" (cohésion nulle), il a fallu faire appel à un "critère pratique" tel que la limitation des vitesses des déformations non-élastiques et plus récemment un critère en termes de contraintes qui exprime le passage à une phase de dilatance.

Durant les essais classiques de laboratoire (compression triaxiale), l'existence de phase de dilatance est irréfutable. Mais nous n'avons aucune preuve que lorsqu'un élément de volume représentatif de sel est soumis à un champ uniforme de contraintes de compression il peut présenter une augmentation de volume de manière irréversible.

Pour démontrer l'absence de preuve de validité du "critère de dilatance" on peut analyser les mêmes essais réels de laboratoire en expliquant la dilatance observée par l'existence de contraintes de traction consécutives à l'hétérogénéité des contraintes dans l'éprouvette causée par le frettage au niveau des plateaux de la presse.

Ce même modèle simple qui ne s'appuie que sur la rupture par traction peut aussi expliquer la fissuration radiale observée sur les piliers dans les exploitations minières par chambres et piliers (justement, le pilier initialement "cylindrique" se déforme en "tonneau" : déformations hétérogènes).

La démarche qui consiste à utiliser un critère de rupture par traction est pratiquement sans utilité dans le cas de cavités salines profondes (peu de probabilité de créer une traction à moins d'une catastrophe : vidange de la cavité et chute brutale de la température). Donc, en attendant mieux, nous sommes obligés de continuer à faire appel à une règle empirique utilisant le critère de dilatance déduit des essais triaxiaux.

Cependant, de nouvelles recherches devront être menées sur l'endommagement des roches ductiles. Elles pourront partir de l'existant (de nombreuses études) mais elles devront s'assurer que l'endommagement et/ou la dilatance peuvent se produire sous contraintes homogènes et proposer aussi un critère qui ne fasse pas intervenir uniquement les contraintes puisque nous savons que le comportement du sel est influencé par son historique (écrouissage).

Par ailleurs et surtout, le critère d'endommagement proposé devra être construit à partir d'essais réalisés dans des conditions de contraintes, de températures et de vitesses de déformation dans des gammes analogues à celles *in situ* (une vitesse de chargement de 25 MPa/minute n'est pas réaliste même lorsque l'essai est vraiment triaxial : [24]).

5.3 Bonne loi de comportement rhéologique du sel gemme

Le comportement ductile thermo-mécanique des roches salines a fait l'objet de nombreuses recherches et en particulier sous forme de thèses. Une caractéristique frappante de ces travaux est que pratiquement chaque chercheur s'est senti obligé non seulement de réaliser ses propres essais de laboratoire mais aussi de proposer soit un nouveau modèle rhéologique soit une modification d'une loi existante mais en général issue du même laboratoire où s'est déroulée la recherche.

On trouve aussi de nombreux "catalogues" des modèles rhéologiques proposés par divers laboratoires (surtout dans des colloques où les présentations sont indépendantes) et les rares fois où ces "catalogues" comportent une étude comparative des modèles le résultat reste relativement succinct.

Une vraie étude comparative serait un travail de bénédictin mais aurait un énorme intérêt pour les industriels. Il consisterait à rassembler des résultats d'essais de laboratoire sur divers sels et provenant de divers organismes, à considérer plusieurs lois de comportement actuellement en usage dans des applications industrielles, à caler les valeurs des paramètres de ces lois sur tous les essais (un jeu de valeurs pour chaque sel évidemment), à juger l'adéquation de ces modèles par rapport aux mesures réelles et à comparer ensuite les réponses de tous ces modèles ajustés à des sollicitations imaginées (historique arbitraire du tenseur des contraintes avec variabilité de son repère principal puisque certaines lois de comportement proposent des variables tensorielles : écrouissage cinématique). La comparaison peut alors s'étendre à des cas *in situ* simplifiés car il se peut que dans les vrais problèmes industriels les différences entre les modèles soient assez faibles pour décider de ne garder que celui ou ceux qui sont assez pratiques à mettre en oeuvre.

En attendant le résultat d'un tel travail, colossal mais réalisable, qui nécessite une solidarité de divers laboratoires et aussi l'aval et le soutien de divers partenaires industriels (mise en commun des résultats des essais de laboratoire), on ne peut ici que rappeler une évidence : les diverses lois de comportement ont été établies par les chercheurs avec tout le sérieux nécessaire mais une loi de comportement a besoin d'être calée sur des résultats d'essais de laboratoire. Mais comme il n'existe pas de "loi miracle" qui décrive le comportement du sel dans toutes les gammes des variables pertinentes, à savoir contraintes, températures et durées, il est nécessaire de caler le modèle choisi sur des essais réalisés dans des conditions les plus représentatives possibles de ce qui se passe *in situ*.

Un exemple typique est celui relatif au comportement du sel sous faible déviateur qui a déjà été signalé par d'autres auteurs [8] et dont nous venons de voir l'impact sur la modélisation de l'évolution de la cavité (et ce indépendamment du choix du modèle rhéologique).

Une démarche simple et facile à mettre en ouvre face à un site nouveau est de réaliser quelques essais de laboratoire dans les conditions établies grâce aux expériences acquises sur d'autres sites. Le modèle rhéologique, quel qu'il soit, calé sur ces essais est alors utilisé dans une modélisation simplifiée du site. Les résultats de ces modélisations sont analysées pour en déduire les "bonnes conditions" de réalisation d'essais complémentaire au laboratoire.

5.4 Modélisation du lessivage

Il ne s'agit pas ici, bien entendu, de la modélisation des phénomènes physico-chimiques qui régissent la dissolution d'une roche saline avec prise en compte de son hétérogénéité (insolubles) et des données opératoires de la phase de lessivage. Il s'agit seulement de la conséquence de l'existence d'une frontière mobile sur les difficultés que l'on rencontre au moment de résoudre un problème thermo-élasto-viscoplastique concernant le solide (équations différentielles dans l'espace et dans le temps dans un domaine à géométrie variable).

Nous avons vu que, dans le cadre d'un projet de recherche commun entre Gaz de France, Géostock et l'Ecole des Mines, nous avions été amenés, dans le cas du problème thermique, à abandonner les simulations numériques réalistes (2D ou 3D). Nous avons montré qu'il est possible d'aboutir à un code numérique correct (CHALES) grâce à une décomposition du problème complet (puits, cavité, roche autour de la cavité) en problèmes 0D (cavité) et 1D (cylindrique pour le puits à diverses cotes et sphérique autour de la cavité) avec couplages de ces problèmes. Il suffisait pour cela de trouver les bonnes règles de passage d'une forme de la cavité réelle à la sphère qui la remplace et de choisir les bons algorithmes numériques qui pallient les difficultés que présente le problème concernant les contrastes des constantes de temps du système (transport d'énergie dans le puits à forte vitesse, conduction autour d'un puits à petit diamètre, conduction autour d'une cavité de grande taille), la bonne prise en compte de la variabilité du rayon de la cavité et le bon choix d'un infini dynamique.

Il nous restera, après avoir contrôlé avec nos partenaires le bon couplage entre les logiciels SIMLESS [16] (problème de dissolution) et CHALES (Tijani et al [37], problème thermique), de passer au développement d'une méthodologie et d'un logiciel pour la modélisation du couplage thermo-mécanique de la phase d'exploitation des cavités de stockage avec prise en compte non seulement des lois thermodynamiques des fluides stockés et de l'historique des cycles d'injection/soutirage mais aussi de la variation des volumes libres des cavités suite aux déformations du massif salin (fluage et grandes déformations). La partie recherches sera principalement d'ordre numérique et consistera d'une part à introduire dans les logiciels 2D le couplage entre le solide et la thermodynamique du fluide comme cela a déjà été réalisé à une dimension (logiciel GEO1D = CYSIF+POTCSF+fluide) et d'autre part à trouver un moyen astucieux pour récupérer du modèle 1D de lessivage ce qui servira comme état initial thermo-mécanique de la phase de lessivage. Il est fort probable que ce dernier point soit résolu en utilisant ce qui a été développé dans ce mémoire concernant l'historique approché des efforts et de la température sur les parois fixes des cavités dans leur géométrie finale.

Références

- [1] ACHIQ, M., Analyse des problèmes tridimensionnels en géotechnique Validité des approches simplifiées, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris (1995).
- [2] ALKAN, H., CINAR, Y., PUSCH, G., Rock salt dilatancy boundary from combined acoustic emission and triaxial compression tests, International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences 44, Elsevier (2007).
- [3] ANDRZEJ, S., K., KAZIMIERZ, M., U., Computer simulation of temperature distribution around well and cavern during leaching, SMRI meeting, New Orleans, USA (1995).
- [4] AUBERTIN, M., On the physical origin and modeling of kinematic and isotropic hardening of salt, Proc. 3rd Conf. Mech. Beh.of Salt. Clausthal-Zellerfeld, Transactions of Technical Publishers, Germany (1996).
- [5] BEREST, P., NGUYEN M.D., Response of a spherical cavity in an elastic viscoplastic medium under a variable internal pressure, Int. J. Solids Structures, vol. 19, pp. 1035-1048, (1983).
- [6] BEREST, P., VOUILLE, G., Notions de base de la theromomécanique, Dans 'La thermomécanique des roches', BRGM, Orléans, (1988).
- [7] BEREST, P., Les problèmes soulevés par l'abandon des cavités de dissolution profondes dans le sel gemme, Stockage en souterrain, Presses des Ponts et Chaussées, Paris (1990).
- [8] BEREST, P. et al., Fluage du sel sous très faibles charges, C.R. Geoscience 336, (2004).
- [9] BEREST, P., BLUM P., A., CHARPENTIER J., P., GHARBI, H., VALES, F., Very slow creep tests on rock samples, International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences 42, Elsevier (2005).
- [10] BOUCLY, P., Expériences in situ et modélisation du comportement des cavités utilisées pour le stockage du gaz, Revue Française de Géotechnique, Paris (1982).
- [11] BOUGNOUX, A., Modélisation thermo-hydro-mécanique des massifs fracturés à moyenne ou grande échelle, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris (1995).
- [12] BRODSKY, N., S., MUNSON, D., E., Effect of brine on the creep of WIPP salt in laboratory tests, Rock Mechanics as a Multidisciplinary Science : Proc 32nd US Symposium, p 703?712, Norman (1991).
- [13] BROUARD, B., Sur le comportement des cavités salines Etude théorique et expérimentale in situ, Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, Paris (1998).
- [14] CARSLAW, H.S, JAEGER, J.C, Conduction of heat in solids, Deuxième édition, Oxford University Press (1959).
- [15] CHAN K., S., MUNSON, D., E., FOSSUM, A., F., BODNER, S., R., A constitutive model for representing coupled creep, fracture and healing in rock salt, Proc. 4th Conf. Mech. Beh. of Salt. Clausthal-Zellerfeld, Transactions of Technical Publishers, Germany (1996)
- [16] CHARNAVEL, Y., LECA, D., POULAIN, F., Advanced geometrical modelling of salts dissolution during cavern leaching - Illustration with a case study, SMRI meeting, Las Vegas, Nevada, USA (1999).
- [17] CRISTESCU, N.,D., HUNSCHE, U., Time Effects in Rock Mechanics, West Sussex, John Wiley & Sons Ltd, England (1998).
- [18] De GRENIER, F., TIJANI, S-M., Programme VIPLEF : résolution des problèmes d'élastoviscoplasticité, GAMNI, Méthodes Numériques dans les Sciences de l'Ingénieur, Congrès International, ABSI, E., GLOWNSKI, R., p 585-591, DUNOD, Paris (1978).

- [19] DEVRIES, K., L., Geomechanical Analyses to Determine the Onset of Dilation Around Natural Gas storage Caverns in Bedded Salt, Proc. SMRI Spring Meeting, Brussels (2006).
- [20] FILON, L., N., G., On the elastic equilibrium of circular cylinders under certain practical systems of load, Phil. Trans. Roy. Soc., Ser. A, London (1902).
- [21] HAMAMI, M., TIJANI, S-M. Le logiciel AJUSTE pour l'analyse des essais de laboratoire, 1^{er} Congrès de Mécanique, Avril, Rabat (1993).
- [22] HOU, Z., Mechanical and hydraulic behavior of rock salt in the excavation disturbed zone around underground facilities, International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences 40, Elsevier (2003).
- [23] HUGOUT, B., Conception des modèles d'exploitation des cavités salines, Gaz de France, rapport interne, M.D5-BH/BZ E 50423, Paris (1984).
- [24] HUNSCHE, U, Determination of dilatancy boudary and damage up to failure for four types of rock salt at different stress geometry, Third conference on the mechanical behavior of salt, Ecole Polytechnique & McGill University, Montréal (1996).
- [25] JULIEN, M., Une modélisation constitutive et numérique du comportement rhéologique du sel gemme, Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, Montréal (1999).
- [26] LEMAITRE, J., Sur la détermination des lois de comportement des matériaux élastoviscoplstiques, Thèse de doctorat, Publication ONERA n°135, Paris (1970).
- [27] LUX, K., H., HEUSERMANN, S., Creep tests on rock salt with changing load as a basis for the verification of theoretical material laws, Proc. 6th Int. Symp. on Salt (1983).
- [28] MANDEL J., *Milieux à paramètres directeurs*, Séminaire "Plasticité et viscoplasticité", Laboratoire de Mécanique des Solides, Ecole Polytechnique, Paris (1972).
- [29] MENAND, S., SELLAMI, H., TIJANI, M., STAB, O., DUPUIS, D., SIMON, C., Advancements in 3D drillstring mechanics : from the bit to the topdrive, SPE Drilling Conference, IADC/SPE 98965, Florida. SPE 98965, IADC/SPE Drilling Conference, Miami, Florida (2006).
- [30] MERAR, J., *Elaboration d'une loi de comportement pour le sel gemme*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris (1999).
- [31] MUNSON, D., E., DAWSON, P., R., Salt constitutive modeling using mechanism maps, Proc. 1st Conf. Mech. Beh. of Salt. Clausthal-Zellerfeld, Transactions of Technical Publishers, Germany (1984).
- [32] MUNSON, D., E., DE VRIES, K., L., FOSSUM, A., F., CALLAHAN, G., D., Extension of the Munson-Dawson model for treating stress drops in salt, Proc. 3rd Conf. Mech. Beh. of Salt. Clausthal-Zellerfeld, Transactions of Technical Publishers, Germany (1996).
- [33] NOTHNAGEL, R., Modélisation des instabilités en mécanique des roches Application a l'exploitation de Drouville, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris (2003).
- [34] ORTIZ, R., Mise au point d'une loi de comportement et de fragmentation dynamique du béton soumis à une énergie explosive, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris (2000).
- [35] PARASCHIV-MUNTEANU, I., CRISTESCU, N.,D., Stress relaxation during creep of rocks around deep boreholes, International Journal of Engineering Science 39, Pergamon (2001).
- [36] ROUABHI, A., Comportement et fragmentation dynamiques des matériaux quasifragiles, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris (2004).

- [37] ROUABHI, A., STAB, O., CHARNAVEL, Y., YOU, T., TIJANI, M., A semi-analytical approach for modelling heat transfer during salt-cavern leaching process, Int. J. for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, en attente de parution (2007).
- [38] SELLAMI, H., Etude des pics usés Application aux machines d'abattage, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris (1987).
- [39] SPIERSC, J., CARTER, N., L., Microphysics of rocksalt flow in Nature, Proc. 4th Conf. Mech. Beh. Salt (1998).
- [40] TIJANI, M., Résolution numérique des problèmes d'élastoviscoplasticité, Thèse de Docteur-Ingénieur, Université P. & M. Curie, Paris VI (1978).
- [41] TIJANI, S-M., VOUILLE, G., De GRENIER, F., Experimental determination of rheological behaviour of Tersanne rock salt, Proceedings of the first conference on the mechanical behaviour of salt, Novembre, Pennsylvania State University (1981).
- [42] TIJANI, M., VOUILLE, G., HUGOUT, B., Le sel gemme en tant que liquide visqueux, Congrès International de Mécanique des Roches, p 241-246, Melbourne (1983).
- [43] TIJANI, S-M., Thermomechanical behaviour of rock salt, CEC COSA project (1987).
- [44] TIJANI, M., Zones de traction au cours d'essais de compression, Congrès International de Mécanique des Roches, p 1279-1281, Rotterdam (1987).
- [45] TIJANI, S-M. VOUILLE, G., DURUP, J-G., The consideration of the leaching phase in the study of the evolution of gas storage caverns in rock salt, Fall meeting of the Solution Mining Research Institute, Hannover (1994).
- [46] TIJANI, M., VOUILLE, G., FEM analysis of coupled THM processes in fractured media with explicit representation of joints, 'Coupled Thermo-Hydro-Mechanical Processes of Fractured Media', STEPHANSSON, O., JING, L., TSANG, C-F., p 165-180, DECO-VALEX project, ELSEVIER (1996).
- [47] TIJANI, S-M., Short description of VIPLEF code, 'Coupled THM Processes of Fractured Media', STEPHANSSON, O., JING, L., TSANG, C-F., p 507-511, DECOVALEX project, ELSEVIER (1996).
- [48] THOREL, L., Plasticité et endommagement des roches ductiles Application au sel gemme, Thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, Paris (1994).
- [49] THOREL, L., GHOREYCHI, M., Rock salt damage experimental results and interpretation, Proc. 3rd Conf. Mech.Beh.Salt, Trans Tech Publications (1996). Thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, Paris (1994).
- [50] VOUILLE, G., TIJANI, S-M., NUNEZ FARFAN, J., YOU, T., HENRION, H., 3D geomechanical simulations of leached cavern : are they mandatory?, Eurock'96, p 1139-1152, Rotterdam (1996).
- [51] VOUILLE, G., BERGUES, J., DURUP, J-G., YOU, T., Study of the stability of caverns in rock salt created by solution mining proposal for a new design criterion, 'Third conference on the mechanical behavior of salt', GHOREYCHI, M. BEREST, P., REGINALD HARDY, H., JR., LANGER, M., p 53-66, Ecole Polytechnique, Palaiseau (1993).

A Curriculum Vitae - Michel TIJANI

NOM : Michel TIJANI - michel.tijani@ensmp.fr NAISSANCE : LE 15/11/51 A CASABLANCA (MAROC) SITUATION FAMILIALE : Marié sans enfants DOMICILE : 7 Bis, Rue des Piats - 77250 VENEUX-LES SABLONS NATIONALITE : Française SERVICE NATIONAL : 1978 - Officier de Réserve DISTINCTION : Chevalier des Palmes Académiques



A.1 Positions statutaires et titres

- $\diamond\,$ Ingénieur civil des Mines de Paris 1974.
- Docteur-ingénieur Paris VI 1978.
 Première thèse : "Résolution numérique des problèmes d'élastoviscoplasticité."
 "Application aux cavités de stockage de gaz en couches salines profondes."
 Seconde thèse : "Application du second principe de la thermodynamique à l'étude des milieux à paramètres internes".
- ◊ Maître de recherche à l'Ecole des Mines de Paris habilité à diriger des thèses.
- $\diamond\,$ Professeur et responsable d'une formation doctorale à l'Ecole des Mines de Paris.
- $\diamond\,$ Coordinateur des activités de recherche en Géomécanique et en Numérique au Centre de Géosciences de l'Ecole des Mines de Paris.

A.2 Expérience professionnelle

- ◊ Développement de méthodologies d'essais de laboratoire pour la détermination de lois de comportement des roches (rhéologie).
- \diamond Développement d'approches de modélisation des phénomènes physiques intervenant dans le domaine de la géomécanique et de l'étude des ouvrages souterrains.
- \diamond Développement de logiciels fondés sur des méthodes numériques ou semi-analytiques pour la résolution de problèmes allant de l'identification de paramètres à partir d'essais de laboratoire ou de mesures *in situ* jusqu'à des problèmes plus complexes (couplage hydro-thermo-mécanique tridimensionnel et en non linéaire).
- ◊ Expertises techniques fréquentes en géomécanique auprès de plusieurs entreprises telles que Gaz de France, Géostock, Salins du Midi, Solvay ... La principale caractéristique de ces expertises est qu'en général le problème industriel posé présente au moins une difficulté nouvelle qui nécessite une démarche inédite.
- ◊ Enseignement à l'Université P. & M. Curie, au DEA de Géosciences (années 1980), à l'Ecole des Mines de Paris et séminaires de formation à des ingénieurs.
- ◊ Direction de thèses de doctorats à l'Ecole des Ponts et Chaussée et à l'Ecole des Mines.
- ◇ Participation à divers projets nationaux et internationaux de R&D dans le domaine des techniques et procédés de travaux souterrains en mines, génie civil, pétrole et stockage de gaz et de déchets nucléaires (COSA, INTERCLAY, DECOVALEX, BENCHPAR, MODEXREP ...).

A.3 Activités professionnelles

A.3.1 Enseignement et formation

- ◇ Co-responsable du cours de "Mécanique des Matériaux Solides" destiné à tous les élèves de l'Ecole des Mines de Paris en 1^{re} année (25 heures). Georges CAILLETAUD et moi avons créé, en 1994, le cours de Mécanique des Matériaux Solides afin de préparer les élèves aux diverses disciplines qui utilisent la Mécanique des Milieux Continus avec l'objectif de réduire, voire supprimer, le temps consacré par les enseignants aux "rappels" du cours de tronc commun. Mon apport personnel à ce cours peut se résumer en un objectif : faire sentir aux élèves que cette vieille science qu'est la Mécanique des Milieux Continus a l'avantage, non seulement d'utiliser un cadre théorique axiomatique rigoureux (NOLL, TRUSDELL ...) qui s'appuie fortement sur les principes de la thermodynamique, mais aussi de présenter un caractère applicatif direct dont les impacts industriels sont de plus en plus cruciaux dans divers domaines (matériaux nouveaux, génie civil, géotechnique ...). Le cours de "Mécanique des Matériaux Solides" a donné lieu à un polycopié co-rédigé avec Georges CAILLETAUD.
- ◊ Option "Sol et Sous-sol" de l'Ecole des Mines de Paris : cours sur le Couplage Thermo-Hydro-Mécanique en géotechnique et encadrement de sujets de stage de fin du cycle ingénieur civil des Mines. Ma participation a l'option correspond à une moyenne de 10 heures par an depuis 1974.
- ◊ Enseignement au DEA : un cours de "Mécanique des Roches" (une quarantaine d'heures par an) au DEA de Géosciences de Paris 6 (années 80) et un cours de "Mécanique des Milieux Continus" (une vingtaine d'heures par an) au DEA "Méthodes quantitatives et modélisation des bassins sédimentaires" (années 90). Ce dernier cours consistait surtout en une remise à niveau pour les élèves. Je me suis alors arrangé pour l'adapter, chaque année, au public.
- ◊ Responsable de la formation doctorale "Techniques et Economie de L'Exploitation du Sous-sol" (TEES) de l'Ecole des Mines de Paris, depuis 1997 et membre de la Commission des Etudes Doctorales du Doctorat de l'Ecole des Mines de Paris. Dans la pratique, j'étais responsable de cette formation depuis 1990 en tant que Directeur Adjoint du Centre de Géotechnique et d'Exploitation du Sous-sol responsable des recherches.

Les principaux thèmes de recherche de la spécialité doctorale TEES sont : - les phénomènes de couplage Thermo-Hydro-Chimio-Mécanique en géotechnique, - l'interaction structure-roche et le comportement mécanique d'interface avec une forte application au forage pétrolier - l'évolution, la stabilité et la rupture des massifs rocheux - le processus de fragmentation et de forabilité des roches - les outils de simulation et d'aide à la décision pour l'exploitation du sous-sol - les principes, méthodes et instruments de mesure en géotechnique.

A.3.2 Activités de recherche

Les principaux thèmes de recherche sont :

- ◊ Modélisation des problèmes thermo-hydro-mécanique avec des applications entre autres à l'étude du stockage de produits pétroliers et de déchets nucléaires. Les difficultés particulières relèvent de la poro-mécanique en non saturé et du couplage avec la "chimie" pour des matériaux qui présentent le phénomène de "gonflement/retrait".
- ◊ Recherche de lois de comportement thermodynamique des géomatériaux à partir d'essais de laboratoire comme par exemple l'élaboration d'une loi qui permet de décrire correctement le fluage de roches isotropes transverses telles que certaines argilites. Cette recherche est nécessairement à compléter par les précautions à prendre lors de l'introduction de telles lois dans un code numérique pour maintenir une cohérence avec les axiomes de Noll lors de transformations finies.
- ◊ Application des compétences en mathématique et en méthodes numériques dans des domaines autres que la géomécanique tels que la mécanique d'un système de forage pétrolier. Cette activité qui se traduit par l'encadrement scientifique et technique de toutes les thèses réalisés sur la thématique du forage pétrolier correspond non seulement au développement de logiciels (codage informatique) mais aussi à une mise en équations des problèmes étudiés (modélisation) et à une numérisation (algorithmique).
- ◊ Adaptation et amélioration d'algorithmes numériques pour résoudre des problèmes de plus en plus complexes (contact et frottement des systèmes de forage avec flambage, couplage hydro-mécanique dans des milieux poreux et des discontinuités . . .). L'objectif principal est le développement de logiciels qui profitent le plus possible des progrès en mathématiques appliquées et en algorithmique informatique en restant en cohérence totale avec la mise en équations mathématique du problème réel (modélisation).

A.3.3 Activités de développement

Les logiciels que j'ai réalisés seul (depuis la conception jusqu'au codage informatique, la validation et la rédaction des manuels) ont eu d'abord comme objectif de répondre aux besoins de notre centre de recherches (pratiquement une demie douzaine d'utilisateurs permanents). Certains de nos partenaires (Gaz de France, Géostock, IRSN, INERIS ...) en disposent et contribuent à leur évolution par des demandes spécifiques. Cela correspond à environ cinq utilisateurs permanents externes à l'Ecole des Mines de Paris.

L'ensemble des codes que j'ai réalisés totalisent environ 310 000 lignes (instuctions hors commentaires en Fortan et un peu de C).

Les principaux logiciels que j'ai réalisés sont :

AJUSTE : logiciel d'identification de paramètres rhéologiques avec des lois de comportement arbitraires. Comme il s'agit d'une librairie numérique d'ajustement de paramètres pour que des lois représentent le mieux possible des observations elle est utilisée, non seulement pour l'étude des essais de laboratoire mais aussi pour l'analyse des mesures *in situ* (1 200 lignes).

Tous les rapports de notre laboratoire qui concernent les essais de fluage et de relaxation font appel à la librairie AJUSTE (cela correspond à au moins une cinquantaine d'études depuis la réalisation du logiciel en 1980). Il en est de même des publications et des thèses dont le thème principal est le fluage des roches comme par exemple les deux thèses de Doctorat de l'Ecole des Mines de Paris : HAMAMI Mounir (1993) *"Rhéologie du sel gemme - Application à la conception des dépôts souterrains des déchets nucléaires"* et MERAR Jasmina (1999) *"Elaboration d'une loi de comportement pour le sel gemme"*.

CYSIF(GEO1D) : progiciel semi-analytique pour résoudre les problèmes thermo-hydromécaniques autour de vides souterrains cylindriques ou sphériques avec la possibilité de prendre en compte l'évolution de la réalisation de la cavité et la loi thermodynamique du fluide stocké (4 000 lignes).

Il convient de signaler que le logiciel CYSIF a été couramment utilisé non seulement par Gérard VOUILLE mais aussi par des personnes de la Recherche et de Développant de Gaz de France donnant lieu à diverses publications dans lesquelles CYSIF a été cité. Par ailleurs, dans deux des exercices Européens de comparaison de codes ("benchmark") auxquels j'ai participé, la solution obtenue avec le logiciel CYSIF a servi de référence avec l'accord de tous les participants : projet COSA (COmparison of geomechanical computer codes for SAlt - Commission of the European Communities - Nuclear Science and Technology Final Report - EUR 12134 EN 1989) et projet MODEXREP (MODélisation, EXPérimentation, REPonse) concernant les essais menés par ANDRA sur le puits de Bure en Meuse/Haute-Marne (voir MIEHE Baptiste, 2004, "Modélisation de la zone endommagée induite par le creusement du puits d'accès au laboratoire", thèse de Doctorat de l'Ecole des Mines de Paris).

VIPLEF(GEO3D) : progiciel fondé sur la méthode des éléments finis pour la résolution de problèmes thermo-hydro-mécaniques pour des structures à 2 ou 3 dimensions y compris sous des sollicitations dynamiques (81 000 lignes).

Depuis au moins 1985, le logiciel VIPLEF est le code par Eléments Finis utilisé dans notre laboratoire dans toutes les études et recherches qui nécessitent cette méthode numérique. La liste des rapports d'étude, des publications et des thèses qui ont fait appel à ce logiciel est relativement longue. Citons à titre d'exemple les deux thèses de l'Ecole des Mines : ACHIQ Mohamed (1995) "Analyse des problèmes tridimensionnels en géotechnique. Validité des approches simplifiées" et ROUABHI Ahmed (2004) "Comportemennt et fragmentation dynamiques des matériaux quasi-fragiles". **ABIS :** logiciel de calcul des systèmes de forage pétrolier (frottements dans des puits complexes , flambage et prévision des trajectoires) et VBIS pour l'étude des vibrations de ces structures élancées (2 300 lignes).

Le logiciel ABIS est une version totalement révisée en 2006 d'une procédure numérique que j'ai développée en 1995 (dans le logiciel STEL que j'avais réalisé en 1981). Cet outil numérique était indispensable pour mener à bien une grande partie de nos recherches dans le domaine du forage pétrolier.

La première utilisation de cette technique numérique a eu lieu dans le cadre de la thèse de MAOUCHE Zakaria (1999) "Contribution à l'amélioration de la prédiction en inclinaison des systèmes de forage rotary. Couplage garniture-outil de forage". Trois autres thèses ont suivi et deux sont en cours. Le logiciel STEL (puis ABIS) a été cité des les publications suivantes, entre autres :

- Menand S., Sellami H., Akowanou J., Isambourg P., Simon C., Macresy L., Dupuis D., *How Drillstring Rotation Affects Critical Buckling Load*?, paper SPE 112571, under review for SPE Drilling & Completion.
- Boualleg R., Sellami H., Menand S. and Simon C., Effect of Formations Anisotropy on Directional Tendencies of Drilling Systems, paper IADC/SPE 98865, IADC/SPE Drilling Conference, Miami, Florida.
- Boualleg R., Sellami H., Rouabhi A., Menand S., Simon C., Effect of rocks anisotropy on deviation tendencies of drilling systems, International Congress On Rock Mechanics, 9-11 July 2007, Lisbon, Portugal
- Studer R., Simon S., Genevois J.M., Menand S., Learning Curve Benefits Resulting From the Use of a Unique BHA Directional Behaviour Drilling Performances Post-Analysis, paper SPE 110432, 2007 SPE Annual Technical Conference and Exhibition held in Anaheim, California, U.S.A., 11-14 November 2007
- Menand S., Sellami H., Akowanou J., Isambourg P., Simon C., Macresy L., Dupuis D., *How Drillstring Rotation Affects Critical Buckling Load*?, paper SPE 112571 in preparation for the 2008 IADC/SPE Drilling Conference

A.4 Etudes et Expertises

- 1975- Commentaires sur la théorie de l'élasticité généralisée de M. Louis MENARD.
- 1975- Sur un modèle décrivant le comportement du sel.
- 1976- Etude des caractéristiques du sel de Bresse.
- 1976- Influence de la température sur les propriétés mécaniques du sel gemme.
- 1976- Rapport de synthèse de la collaboration avec Gaz de France.
- **1977-** Influence des cycles d'injection/soutirage sur la variation du volume d'une cavité de stockage et sur l'extension de la zone plastique.
- 1979- Fluage du sel de Tersanne.
- 1979- Manuscrit du cours "Calculs des Structures" (Méthode des Eléments Finis)
- $1980\mathchar`-$ SOFREGAZ KGS5 mechanical tests of pure and impure rock salt, eutectic siltstones and blue marks.
- 1980- L'étude de l'écrouissage des roches ductiles.
- 1980- Domaine d'élasticité de l'argile de Tersanne.

- 1980- Domaine d'élasticité du sel gemme. Influence de la contrainte intermédiaire.
- 1980- Fluage et loi de comportement du sel gemme.
- 1981- Stabilité de la carrière de Helling.
- 1981- Domaine d'élasticité de l'anhydrite de Tersanne.
- 1981- Simulation du gisement d'Afasto.
- 1981- Synthèse des résultats expérimentaux relatifs à la rhéologie du sel de Tersanne.
- **1981-** Logicial BIAXE.
- 1981- Fluage des argiles de Tersanne.
- **1981-** Calcul de l'exploitation de la concession du Cauroy.
- 1982- Etude de la faisabilité d'une cavité d'eau chaude. Collecte des données.
- 1982- Caracteristiques mécaniques d'un bloc cathodique.
- 1982- Les grandes déformations dans le logiciel VIPLEF. Etude de faisabilité.
- 1982- Etude de la préfaisabilité d'une cavité de stockage d'eau chaude.
- 1982- Essai de fluage en régime d'extension sur le sel de Tersanne.
- **1982-** Rupture du sel de Tersanne.
- 1982- Fluage de l'anhydrite de Tersanne.
- 1982- Fluage du sel d'Etrez.
- 1983- Rhéologie du sel d'Etrez inférieur.
- **1983-** Fluage de la sylvinite.
- 1983- Simulation d'un bloc cathodique (Aluminium Pechiney).
- 1983- Fluage du sel d'Etrez supérieur.
- 1984- Rhéologie du vitrious en phase de cuisson.
- 1984- Comportement ductile du sel. Fluage cyclique du sel d'Etrez.
- 1984- Simulation du compactage dynamique par un modèle rhéologique.
- 1984- Version 1985 de VIPLEF.
- 1985- Etude de la subsidence à Ekofisk.
- 1985- CEC PROJECT COSA. Second benchmark. Thermal problem.
- 1986- Rupture du sel.
- 1987- Ekofisk subsidence project. Influence of the underberden.
- 1987- Influence de la vitesse de soutirage sur la stabilité d'une cavité de stockage.
- 1987- Comportement thermomécanique du sel gemme (projet COSA).
- 1987- Etude d'une cavité de 400000 m3. Lessivage en 2000 jours.
- 1987- Déviation des Grezes. Stabilité de la carrière de Chancelade.
- **1988-** Approche analytique du comportement mécanique des cavites cylindriques et sphériques.
- 1988- Essais mécaniques sur le sel d'Atochem.
- **1989-** Calcul des structures des têtes du siphon du 3^{me} lot de l'émissaire de Sèvres-Achères.
- 1989- Analyse des essais de flexion de plaques de plâtre.

- 1989- Comportement mécanique du sel d'Etrez inférieur sous faible déviateur.
- 1989- Module d'élasticite du plâtre dans les plaques.
- 1991- Essais post-rupture sur échantillons de Berkaoui
- 1991- Lavera Primagaz. Essais mécaniques sur les échantillons.
- 1991- Essais mécaniques sur les échantillons de Berkaoui.
- 1991- Mine de Mohammedia. Essais mécaniques.
- 1992- Modélisation des frottements dans les puits déviés. Logiciel TUBAGE (ELF).
- 1992- Rhéologie du produit antifissure Filaflex.
- 1992- Essais de compression sur le calcaire de Saint Astier.
- 1992- Essais de cisaillement sur les flysh du barrage de Louberria.
- 1994- Polycopié du cours "Mécanique des Matériaux Solides"
- **1994-** Couplage thermo-hydro-mécanique en milieu poreux sature. Test d'un algorithme de couplage entre les logiciels HYDREF et VIPLEF et comparaison a la solution analytique de Booker et Savvidou.
- 1994- Calcul d'écrasement de tube.
- 1994- Etude du comportement mécanique des schistes de Casamozza.
- **1995-** Programmation dans le logiciel VIPLEF3D de la loi de comportement du polyéthylène.
- 1995- Projet DECOVALEX. Modélisation thermomécanique tridimensionnelle.
- **1995-** Essais de dilatation thermique sur du granite de Fanay Augères.
- 1998- Contraintes dans un bloc cylindrique avec trou sous pression.
- 1998- Caractéristiques mécaniques d'échantillons de sel de Barbastro Balaguer.
- **2001-** Caractéristiques mécaniques d'échantillons de calcaires et de marnes en provenance de Tournemire.
- 2002- LESSFINE PROJECT. Mechanical behavior of rocks.
- 2002- Mechanical behavior of Salado rock salt.
- **2003-** Dimensionnement d'une exploitation de sel par dissolution dans la Bresse.
- 2003- Mechanical damage of Salado rock salt.
- 2004- Etude numérique à l'aide de VIPLEF3D de la stabilité du stockage de Manosque.
- 2005- Manuel de vérification (validation) des logiciels CHEF, HYDREF et VIPLEF.
- 2005- Etude géomécanique du réservoir souterrain de Beynes supérieur.
- 2005- Etude de la possibilité d'extension de la cavité saline 811 à Dax.
- 2005- MODEX-REP PROJECT.
- **2005-** Etudes expérimentale et théorique du comportement des argilites en vue de la compréhension des zones endommagées autour des ouvrages souterrains du site de Tounemire.
- 2006- Analyse des mesures des déformations des piliers de la Mine de Varangeville.

A.5 Contrats de recherche

Mes études et travaux de recherche et de développement se sont déroulé dans le cadre de contrats entre un partenaire et l'Ecole des Mines de Paris via ARMINES.

Le partenaire peut être un industriel (ALLIA, LAFARGE, SOLETANCHE, SCHLUM-BERGER, GERHART, PETROFINA, ELF AQUITAINE, GEOSTOCK, SOLVAY, MDPA, SALINS DU MIDI ET SALINES DE L'EST ...) qui arrive avec une demande spécifique ou à qui je suggère de nouveaux thèmes de recherche concernant ses activités.

Il peut aussi être un organisme d'état avec lequel j'ai des relations suivies qui permettent des rencontres assez régulières au cours desquelles un échange bilatéral conduit à définir des axes de recherche communs (Gaz de France, qui n'est plus un organisme public, IRSN, ANDRA, INERIS ...).

Les contrats avec comme partenaire la CEE (projets européens) auxquels j'ai activement participé ont concerné principalement le stockage des déchets nucléaires (projets COSA, INTERCLAY, DECOVALEX, BENCHPAR, MODEXREP ...). Le projet LESSFINE (réduction des "fines" dans les exploitations de "pierre" dans les carrières) a été mené avec la collaboration de l'Université de Leoben (Autriche) et s'est concrétisé par la thèse soutenue à l'Ecole des Mines de Paris de ROUABHI Ahmed (2004) "Comportemennt et fragmentation dynamiques des matériaux quasi-fragiles".

J'ai participé et je continue à participer à des contrats que notre Centre a avec des financements DGRST, ANR ...

A.6 Encadrement de thèses à l'Ecole des Mines de Paris

Seules sont citées les thèses où ma participation a pris plus de 20 % de la durée de la recherche. Les thèses où j'ai été officiellement directeur sont indiquées par une astérisque à côté de la date. Par ailleurs, j'ai participé activement à la définition et à l'analyse de la pertinence des sujets de toutes les thèses dans la spécialité TEES depuis 1990 (environ 30 thèses).

CHOQUET Pierre (1981) Etude du comportement des cintres de soutènement de galerie.

SAGHAFI Abounavasse (1981) Etude du comportement mécanique post-rupture du minerai de fer.

Application au dimensionnement des exploitations minières par îlots réduits.

BENYAKLHEF Rachid (1983) Etude du mécanisme du foudroyage.

CHARLET Bernard (1985) Modélisation numérique du soutènement par cintre.

SABIR Mustapha (1986) Application de la mécanique des milieux continus à l'étude du comportement post-rupture des roches confortées par du remblai.

BOUTECA Maurice (1987*) Fracturation hydraulique.

Calcul de propagation d'une fracture induite dans un massif rocheux.

HADJ HASSEN Faouzi (1988) Modélisation par un milieu continu du comportement mécanique d'un massif rocheux à fissuration orientée.

- **KORINI Thoma (1988)** Modélisation tridimensionnelle par un assemblage de blocs rigides du comportement mécanique d'un massif rocheux à fissuration individualisée en vue de la stabilité d'ouvrages miniers.
- **BAHEDI Moulay Lakbir (1990)** Modélisation par un milieu continu équivalent du comportement mécanique des massifs rocheux à fissuration diffuse et isotrope.
- GARCIA Michel (1991) Génération automatique de maillage appliquée aux domaines complexes du sous-sol.
- **REJEB Amel (1992)** Comportement thermomécanique du granite. Application au stockage des déchets radioactifs.
- HAMAMI Mounir (1993) Rhéologie du sel gemme.

Application à la conception des dépôts souterrains des déchets nucléaires.

- LI Hua (1993^{*}) L'étude de l'écoulement des fluides dans un réseau par la méthode des éléments finis.
- ACHIQ Mohamed (1995^{*}) Analyse des problèmes tridimensionnels en géotechnique. Validité des approches simplifiées.
- **BOUGNOUX Anne (1995)** Modélisation thermo-hydro-mécanique des massifs fracturés à moyenne ou grande échelle.
- KHARROUBI Adel (1997) Influence de la dépressurisation sur la perméabilité des roches réservoir.

Application à un gisement Haute-Pression-Haute-Température.

- LAMBARKI Abderrahim (1997) Etude théorique et expérimentale du comportement mécanique des terrains lors de l'exploitation du gisement de Hajar.
- CHALLAMEL Noël (1999) Etude de stabilité d'une structure de forage à partir du processus de destruction de la roche.
- MAOUCHE Zakaria (1999) Contribution à l'amélioration de la prédiction en inclinaison des systèmes de forage rotary. Couplage garniture-outil de forage.
- MERAR Jasmina (1999*) Elaboration d'une loi de comportement pour le sel gemme.
- **ORTIZ Roland (2000)** Mise au point d'une loi de comportement et de fragmentation dynamique du béton soumis à une énergie explosive.
- SAVIGNAT Jean Michel (2000) Approximation diffuse Hermite et ses applications.
- **FREISSMUTH Harald (2002*)** Influence de l'eau sur le comportement mécanique des roches argileuses.
- KHARKHOUR Hanan (2002*) Modélisation des couplages thermo-hydro-mécaniques et de l'endommagement des roches viscoplastiques dans le contexte du stockage de déchets radioactifs.
- **IVANTCHENKO-KAPLAN Julia (2003)** Modélisation tridimensionnelle du comportement directionnel du système de forage rotary.
- **ROUABHI Ahmed (2004*)** Comportement et fragmentation dynamiques des matériaux quasi-fragiles.
- MIEHE Baptiste (2004) Modélisation de la zone endommagée induite par le creusement d'un puits d'accès au laboratoire souterrain de Meuse-Haute-Marne (argilites de l'Est).
- **BELAID Abdessalem (2005)** Modélisation tridimensionnelle du comportement mécanique de la garniture de forage dans les puits à trajectoires complexes.

- WAKIM Jad (2005) Influence des solutions aqueuses sur le comportement mécanique des roches argileuses.
- Riadh BOUALLEG (2006) Modélisation des systèmes de forage en formations géologiques anisotropes.

A.7 Publications

A.7.1 Publications dans des revues à comité de lecture

- 1979- FINE, J., TIJANI, S-M., VOUILLE, G., Nouveau dispositif expérimental pour l'étude de la rhéologie des roches, Revue Française de Géotechnique N°8, Août, Paris.
- **1982-** TIJANI, S-M., TINCELIN, E., Calcul analytique approché de la stabilité des mines exploitées par piliers abandonnés, Industrie Minérale, Les techniques, Février, Paris.
- **2001-** VIOLETTE, S., MARSILY, G. de, GOBLET, P., LEDOUX, E., VOUILLE, G., TIJANI, S-M., Can rainfall trigger volcanic eruptions? A mechanical stress model of an active volcano : "Piton de la Fournaise", Réunion island, Terra Nova, 13, 1, 18-24.
- 2002- ORTIZ, R., TIJANI, M., Quantification de l'énérgie transférée à la roche lors du tir à l'explosif : élaboration d'une méthodologie, Les Techniques de l'Industrie Minérale, nº 13, p 127-132, Paris.
- 2003- REJEB, A., TIJANI, M., Champs de contrainte dans les argilites de Tournemire, mesures in situ et interprétations, Revue Française de Géotechnique, n° 103, p 75-84, Paris.
- 2005- ROUABHI, A., TIJANI, M., MOSER, P., GOETZ, D., Continuum modelling of dynamic behaviour and fragmentation of quasi-brittle materials, application to rock fragmentation by blasting, Int. J. for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, Vol 29, Iss 7, p 729-749.
- **2006-** MENAND, S., SELLAMI, H., TIJANI, M., STAB, O., DUPUIS, D., SIMON, C., *Advancements in 3D drillstring mechanics : from the bit to the topdrive*, SPE Drilling Conference, IADC/SPE 98965, Florida.
- 2007- WAKIM, J., HADJ-HASSEN, F., TIJANI, M., GORDINE, D., Gonflement tridimensionnel et anisotrope des roches argileuses, Revue Française de Géotechnique, n°118, Paris.
- 2007- ROUABHI, A., TIJANI, M., REJEB, A., Triaxial behaviour of transversely isotropic materials : application to sedimentary rocks. Int. J. for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, Vol 31, Iss 13, p 1517-1535.
- 2007- ROUABHI, A., STAB, O., CHARNAVEL, Y., YOU, T., TIJANI, M., A semianalytical approach for modelling heat transfer during salt-cavern leaching process, Int. J. for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, en attente de parution.

A.7.2 Autres publications et congrès

1978- TIJANI, S-M., Résolution numérique des problèmes d'élastoviscoplasticité : application aux cavités de stockage de gaz en couches salines profondes, Thèse de Docteur-Ingénieur, Université P. & M. Curie, Paris VI. La seconde thèse (sujet proposé par l'Université) est intitulée : Application du second principe de la thermodynamique à l'étude des milieux à paramètres internes.

- 1978- De GRENIER, F., TIJANI, S-M., Programme VIPLEF : résolution des problèmes d'élastoviscoplasticité, GAMNI, Méthodes Numériques dans les Sciences de l'Ingénieur, Congrès International, ABSI, E., GLOWNSKI, R., p 585-591, DUNOD, Paris.
- **1979-** FINE, J., TIJANI, S-M., VOUILLE, G., BOUCLY, B., *Détermination expérimentale de paramètres élastoviscoplastiques des roches*, Congrès International de Mécanique des Roches, Montreux.
- **1981-** TIJANI, S-M., VOUILLE, G., De GRENIER, F., *Experimental determination of rheological behaviour of Tersanne rock salt*, Proceedings of the first conference on the mechanical behaviour of salt, Novembre, Pennsylvania State University.
- 1983- TIJANI, S-M., VOUILLE, G., HUGOUT, B., Le sel gemme en tant que liquide visqueux, Congrès International de Mécanique des Roches, p 241-246, Melbourne.
- **1983-** CHEMALI, R., GIANZERO, S., STRICKLAND, R., TIJANI, S-M., The shoulder bed effect on the dual laterlog and its variation with the resistivity of the borehole fluid, SPWLA, 24th Annual Logging Symposium, Jun. 27-30.
- **1985-** BOUTECA, M., TIJANI, S-M., On the use of single function for intergral equation of a plane crack under normal loading, 26th US Symposium on Rock Mechnics, p 643-649, Rapid City, SD.
- 1987- TIJANI, S-M., Zones de traction au cours d'essais de compression, Congrès International de Mécanique des Roches, p 1279-1281, Rotterdam.
- 1987- TIJANI, S-M., Thermomechanical behaviour of rock salt, CEC COSA project.
- 1993- HAMAMI, M., TIJANI, S-M. Le logiciel AJUSTE pour l'analyse des essais de laboratoire, 1^{er} Congrès de Mécanique, Avril, Rabat.
- 1993- HAMAMI, M., TIJANI, S-M. VOUILLE, G., A methodology for the identification of rock salt behavior using multi-steps creep tests, 'Third conference on the mechanical behavior of salt', GHOREYCHI, M. BEREST, P., REGINALD HARDY, H., JR., LANGER, M., p 53-66, Ecole Polytechnique, Palaiseau.
- **1994-** TIJANI, S-M. VOUILLE, G., DURUP, J-G., *The consideration of the leaching phase in the study of the evolution of gas storage caverns in rock salt*, Fall meeting of the Solution Mining Research Institute, Hannover.
- 1995- ACHIQ, M., TIJANI, S-M., Stabilité des intersections de galeries souterraines, 2^{me} Congrès de Mécanique, Société Marocaine des Sciences Mécaniques, Casablanca.
- 1996- VOUILLE, G., TIJANI, S-M., NUNEZ FARFAN, J., YOU, T., HENRION, H., 3D geomechanical simulations of leached cavern : are they mandatory ?, Eurock'96, p 1139-1152, Rotterdam.
- **2003-** REJEB, A., TIJANI, M., *The influence of in situ stresses on the coupled HM response of saturated rock against tunnelling excavation*, International Conference on coupled THMC processes in geosystems, Stockholm.
- **2004-** WAKIM, J., HADJ-HASSEN, F., TIJANI, M., *Study of the clayey rock behaviour under the action of water*, Int. Conf. On Geotechnical Engineering, GEO-Beyrouth.
- **2005-** WAKIM, J., HADJ-HASSEN, F., TIJANI, M., NOIREL, J-F., *Effect of water on the mechanical behaviour of shales*, Colloque Post-Mining, Novembre 16-17, Nancy.
- 2005- BELLAID, A., SELLAMI, H., MENAND, S., TIJANI, M., Modélisation du comportement mécanique d'une structure élancée rigide à l'intérieur d'un trou de forage à trajectoire complexe : application au dimensionnement du forage pétrolier, 17^{me} Congrès Français de Mécanique, Troyes.
- **2006-** MENAND, S., SELLAMI, H., TIJANI, M., AKOWANOU, J., *Buckling of Tubulars in Actual Field Conditions*, SPE 102850, Annual Technical Conference and Exhibition, September, Texas.
- **2007-** ROUABHI, A., TIJANI, M., CHARNAVEL, Y., YOU, T., *Temperature modeling during salt cavern leaching process*, SMRI spring meeting, Basel.
- **2007-** AKOWANOU, J., SELLAMI, H., MENAND, S., TIJANI, M., *Modélisation tridimensionnelle du flambage des tiges de forage*, Congrès Français de Mécanique, Grenoble.

A.7.3 Contributions à des ouvrages

- 1988- TIJANI, S-M., Calcul des structures soumises à des sollicitations thermiques, 'La thermomécanique des roches', BEREST, P., WEBER, Ph., p 150-157, BRGM, Orléans.
- 1996- TIJANI, S-M., VOUILLE, G., FEM analysis of coupled THM processes in fractured media with explicit representation of joints, 'Coupled Thermo-Hydro-Mechanical Processes of Fractured Media', STEPHANSSON, O., JING, L., TSANG, C-F., p 165-180, DECOVALEX project, ELSEVIER.
- **1996-** TIJANI, S-M., Short description of VIPLEF code, 'Coupled THM Processes of Fractured Media', STEPHANSSON, O., JING, L., TSANG, C-F., p 507-511, DECO-VALEX project, ELSEVIER.

Idées de futures publications :

Dans le mémoire de ma candidature à une Habilitation à Diriger des Recherches j'ai présenté deux idées que je pense originales et qui pourront faire l'objet de futures publications :

- Influence des faibles déviateurs sur le fluage du sel gemme : Comme je l'ai présenté dans mon mémoire nous avons tous les ingrédients pour une publication, d'autant plus que des essais de fluage réalisés, à mon initiative, pour un partenaire industriel ont largement confirmé le contenu scientifique de cette idée. Il me restera juste à voir avec l'industriel (pour d'éventuels problèmes de confidentialité) et à élargir la publication en la réalisant en commun avec un expert comme Pierre BEREST.
- Endommagement, dilatance et rupture du sel gemme : A mon initiative, une étude expérimentale est en cours (partenaire industriel : Gaz de France, responsable de l'étude : Ahmed ROUABHI). L'objectif de cette étude n'est pas seulement de confirmer ce que j'ai développé dans mon mémoire (l'influence du *modus operandi* dans les résultats des essais classiques) mais surtout d'ouvrir un axe de recherche "endommagement des roches salines".

Il est à prévoir aussi une publication commune (Michel TIJANI, Ahmed ROUABHI, personnes de Gaz de France) sur la suite du développement qui nous est confié actuellement concernant la modélisation des cavités salines. La première phase est terminée (modélisation de la création de la cavité : lessivage). Les deux phases qui restent à étudier sont : "l'exploitation : stockage de gaz" et "l'abandon".

B Short description of VIPLEF code

TIJANI, S-M., *Short description of VIPLEF code*, 'Coupled THM Processes of Fractured Media', STEPHANSSON, O., JING, L., TSANG, C-F., p 507-511, DECOVALEX project, ELSEVIER (1996).

B.1 Introduction

Numerical codes have always been needed for the geomechanical activities of the Centre de Géotechnique et d'Exploitation du Sous-sol (CGES) of the Ecole des Mines de Paris. Since its creation (1968), the CGES's strategy has been to develop its own codes in order that the mathematical formulation of the physical and mechanical phenomena derived from the experiments carried out in its laboratory or reported should not be influenced by the limitations of the existing codes.

As a consequence of this strategy in all CGES Finite Element Codes the algorithms are chosen in such a way as to allow, simply and rapidly, the implementation of any governing equation or constitutive law [1]. For instance, a specialist of VIPLEF (like the one who has written the code!) is able to introduce, within one day , any new rheological model (even a complex one) including validity tests.

The numerical VIPLEF Fortran code, was written in 1978 [2]. Its final "Computing Structure" was revised in 1985 [3] (Bidimensional Thermo-Hydro-Mechanical Finite Element Codes : CHEF, HYDREF and VIPLEF). A three-dimensional version was developed in 1993 (Codes : CHALEF3D, HYDREF3D and VIPLEF3D) and was updated in 1995 to take into account inetia forces (dynamic problems).

B.2 Governing equations

VIPLEF is frequently modified, principally to take into account the new industrial and scientific requirements and secondarily to take advantage of any new numerical technique provided it does not restrict the scientific aim of the code. The governing equations described hereafter correspond to the 1995 version of the code.

The various simplifications of the governing equations existing in this version of VIPLEF and indicated hereafter are not imposed by the numerical processes but have been chosen by the scientific experts.

B.2.1 Balance laws

The mass balance law (fluid mass flow throughout the skeleton of a porous continuum and inside the hydraulic joints) is simplified assuming that the fluid density has small variations in space so that the continuity equation is equivalent to the fluid volume balance law. In the momentum balance laws, static approach is used (inertia forces are neglected) and the classical Darcy's law governs the fluid flow. In the energy balance law only thermal energy is taken into account, neglecting energies associated with irreversible dissipation, thermal dilatancy and fluid transport.

B.2.2 Constitutive laws

Each of the three following problems may be solved separately using the relevant code (either CHALEF or HYDREF or VIPLEF).

A) Thermal conduction

Linear or non-linear transient or steady-state thermal conduction (Fourier's Law) problems can be solved with CHEF which allows :

- initial temperature field,
- complex time dependent boundary conditions as prescribed thermal flux or temperature or relationships between these two physical variables (for instance black-body radiation transfer condition of an external heat : $\Phi = K(T^4 - T_{ext}^4)$),
- heterogeneity and anisotropy,
- dependence of the thermal parameters upon the temperature using any given governing equation, possibly non-linear,
- any given time dependent right hand side of the energy balance equation (in order to take into account not only volumetric heat generation, but also other energies usually neglected),
- joints with any given relationship between the thermal flux and the discontinuity of the temperature.

B) Hydraulic diffusion

Linear or non-linear transient or steady-state hydraulic diffusion (Darcy's Law) problems can be solved with HYDREF which allows :

- initial pore pressure field,
- complex time dependent boundary conditions (prescribed pore pressure or fluid flow rate or hydraulic head or relationship between these two physical variables),
- heterogeneity and anisotropy,
- dependence of the hydraulic parameters upon the pressure (or upon specified mechanical or thermal variables) using any given governing equation, even non-linear relationships.
- any given time dependent right hand side of the fluid mass balance equation (in order to take into account not only distributed hydraulic sources but also the variation of the connected porosity),
- joints with a permeability which may be any given function of the pore pressure and mechanical and thermal external variables (for instance, in the well known cubic law, the permeability depends on the aperture of the joint which is defined by the displacement of its opposite sides, it depends also on the temperature which has an influence on the viscosity of the fluid).

C) Mechanical deformation

Linear or non-linear static finite (Jauman's objective stress rate) or infinitesimal deformation can be modeled with VIPLEF which allows :

- initial stresses and internal rheological fields,
- complex time dependent boundary conditions (prescribed loads or displacement or relationship between these two physical variables),
- heterogeneity and anisotropy,
- time dependent temperature (thermal dilatancy) and pore pressure (Biot's law) fields,
- any rheological model (non-linear elasticity, linear or non-linear viscoelasticity, elastoplasticity, elastoviscoplasticity ...),
- joints with any given constitutive law (for instance, the well known normal hyperbolic law associated with friction and dilatancy when sliding occurs).
- any prescribed governing equations for the influence of the temperature on the mechanical parameters of solids and joints.

B.3 Numerical methods

B.3.1 Discretisation

All continuous time dependent fields are replaced by discret sets of their values at the nodes of the mesh and at a finite number of given times.

The space approximation (interpolation) is based on the Finite Element Method and the three codes have a library of all classical types of elements ranging from the 2 node linear segments to the 9 node quadratic Lagrangian quadrilateral elements. All the second-order elements are isoparametric (the edges may be curvilinear).

The time interpolation is linear between two successive time steps.

B.3.2 Transient conduction and diffusion

The time integration is based on the implicit Euler's method with a prescribed or automatically controlled time step (CHEF and HYDREF).

B.3.3 Plasticity

In VIPLEF, all rheological non-linearities similar to plasticity are treated with an iterative process based on the Initial Stress Method. But the actual constitutive laws are used without any linearisation (i.e. the rheological equations are fully integrated by hands before the programming of the model) [2].

B.3.4 Viscoplasticity

In the case of viscosity, the Initial Stress Method is used with a step by step semi-implicit integration technique which needs only the response of the rheological model to a creep test (given constant stresses and temperature during the step), starting from any given initial state (Multi-Step Creep Technique) [1].

B.3.5 Finite deformation

The Updated Lagrangian Method is used. The actual deformation is divided into infinitesimal deformations at the end of which the geometry, the stresses (Jauman's rate) and the material tensors are updated.

B.3.6 Coupled T.H.M. processes

An external automatic "code" performs an iterative loop of calls to each of the three codes (CHALEF -> HYDREF -> VIPLEF -> CHALEF ...) until the convergence is achieved.

The straightforwardness of this iterative technique is required in order to ensure the easiness of introduction of any new theoretical formulation based on the actual observations and measurements.

B.4 Computing aspects

Written in Fortran the three codes are fully autonomous (i.e. no special mathematical or graphic external library is needed) :

- Pre-processors help the user to construct the mesh like DELOS (written in Fortran by Olivier Stab) which generate automatically meshes with triangular elements respecting the prescriebed geometry of external and internal boundaries, the given points and the desiered distribution of the element size.
- All needed mathematical operations are programmed in the codes even the linear algebraic systems solver which uses the Active Column Direct Gauss Method associated with Sky Line Storage Technique (Block decomposition and file storage when necessary) and an internal automatic Profile Reduction.
- In order to be easily installed in any computer environment the codes have their own graphic library, written in Fortran initially in 1978 and frequently modified since that time, to take into account the new graphic devices (X11, Post-script, HPGL, Xfig...).

B.5 References

- S-M. Tijani, Résolution numérique des problèmes d'élastoviscoplasticité Application aux cavités de stockage de gaz en couches salines profondes, Thèse de Docteur-Ingénieur. P. & M. Curie. Paris VI (1978).
- F. De Grenier and S-M. Tijani, Logiciel VIPLEF Résolution des problèmes d'élastoviscoplasticité, Méthodes Numériques dans les Sciences de l'Ingénieur. Congrès International. DUNOD. Paris (1978).
- 3. B. Plischke, A Survey of Computer Programs in Rock Mechanics Research and Engineering Practice, Int. J. Rock Mech. & Min. Sci., 25(4) (1988).

C Manuel de validation de VIPLEF

Début du manuel de validation des logiciels CHEF, HYDREF et VIPLEF et des algorithmes de résolution des problèmes couplés THM par Michel TIJANI (Ecole des Mines de Paris).

C.1 Progiciel VIPLEF

C.1.1 Historique

Les activités géomécaniques du Centre de Géosciences de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris ont toujours nécessité de faire appel à des codes numériques. Depuis sa création en 1968, le Centre de Géosciences a choisi comme stratégie de développer ses propres logiciels afin que les formulations théoriques des phénomènes physiques déduites des observations réelles ne soient jamais influencées par les limitations des codes existants. Une des conséquences de cette stratégie est que dans les codes du Centre de Géosciences les algorithmes sont choisis de sorte à permettre d'introduire simplement et rapidement toute nouvelle loi de comportement.

Le logiciel VIPLEF a été réalisé en 1978 (Tijani [40]) dans le cadre d'une collaboration avec Gaz de France. La structure informatique de tout le progiciel (codes numériques bidimensionnels CHEF, HYDREF et VIPLEF) a été fixée en 1985. La version 3D du progiciel a été rédigée en 1993 à la demande conjointe de Gaz de France et de GEOSTOCK.

Le progiciel VIPLEF n'a eu qu'un seul rédacteur. Même lorsque des chercheurs du Centre de Géosciences (thèses) participent au développement du logiciel (nouvelles formulations des problèmes physiques ou lois de comportement ou algorithmes numériques) toute modification des codes dans leurs versions officielles est faite par la même personne qui procède alors à tous les tests nécessaires pour s'assurer que la ou les nouvelles fonctionnalités sont correctement implémentées (tests élémentaires) et que ces modifications ne nuisent pas aux fonctionnalités existantes (tests d'intégration). Cette situation relativement particulière (un seul programmeur tout le long de l'existence du code) explique l'absence jusque là de "manuel de vérification" et explique la modestie du présent manuel qui a comme but principal de mettre à la disposition d'utilisateurs externes au Centre de Géosciences quelques fichiers de cas tests grâce auxquels ils peuvent procéder à une vérification du "binaire" généré par une compilation après un changement du système d'exploitation.

C.1.2 Formulation du problème

VIPLEF est souvent modifié, d'une part pour tenir compte de l'évolution de l'état de l'art (nouvelles lois physiques) et d'autre part pour profiter des progrès dans les techniques numériques et informatiques à condition cependant que les nouveaux algorithmes ne limitent pas l'objectif scientifique du code. La formulation théorique du problème physique à résoudre présentée ci-dessous correspond à la version actuelle de VIPLEF. Les diverses simplifications introduites dans cette formulation ne sont pas imposées par les algorithmes numériques utilisés dans le progiciel mais ont été choisies par des experts.

A) Lois de conservation

Dans le bilan de masse du fluide s'écoulant à travers un milieu continu poreux ou le long de surfaces de discontinuité, le plus souvent on néglige la phase gazeuse et l'on considère que la phase liquide est "incompressible" sans pour autant négliger la compressibilité dans la loi de comportement. Ainsi la loi de conservation de la masse se trouve réduite à une conservation du volume de la phase liquide. Dans la loi de Newton (conservation du moment cinétique) on utilise une approche statique (forces d'inertie négligées) et une loi de Darcy.

Le bilan d'énergie quant à lui est restreint à la chaleur par conduction négligeant ainsi les énergies de transformations chimiques, les chaleurs latentes, les énergies dissipées par comportement mécanique irréversible ou de dilatance thermique ainsi que celle transportée par le fluide.

B) Lois de comportement et d'état

- Conduction thermique (CHEF) : Le logiciel CHEF permet de traiter les problèmes linéaires et non linéaires de conduction thermique (Loi de Fourier) en régime permanent (stationnaire) et transitoire avec les fonctionnalités classiques de prise en compte de l'état initial du champ des températures, des conditions aux limites complexes dans l'espace et dans le temps (en terme de température, de flux et de relations entre les deux grandeurs), de l'hétérogénéité et de l'anisotropie, de la variabilité des paramètres thermiques en fonction de la température, de l'existence d'un terme source variable dans l'espace et dans le temps ...
- Ecoulement hydraulique (HYDREF) : Puisqu'il s'agit ici d'un manuel de vérification on peut rappeler qu'entre deux logiciels tels que CHEF et HYDREF il est logique que le programmeur agisse par un copier coller puisque mathématiquement il s'agit pratiquement de la même problématique à part un changement de langage (température/potentiel, flux thermique/vitesse d'écoulement, conservation de l'énergie/masse, loi de Fourier/Darcy ...) et quelques spécificités (CHEF propose une loi de rayonnement à la frontière, HYDREF propose des écoulements dans des discontinuités et surtout introduit une grandeur supplémentaire, la pression, qui peut avoir un rôle important lorsqu'il s'agit de couplage avec la mécanique ou de chercher une nappe libre ainsi que lorsque l'écoulement se fait en non saturé).
- Mécanique des milieux déformables (VIPLEF) : Le logiciel est principalement dédié à la mécanique des milieux "volumiques" mais propose aussi quelques éléments de structure élancés (boulons, cintres, ...) pour permettre aux géotechniciens de modéliser des moyens de soutènement de massifs rocheux. En ce qui concerne les milieux "volumiques", on retrouve les fonctionnalités classiques : état thermodynamique de référence en terme de contraintes initiales, conditions aux limites variables dans l'espace et dans le temps aussi bien en force qu'en déplacement et même en relations entre les deux grandeurs, hétérogénéité, anisotropie, influence de la température par dilatation thermique et sur les propriétés mécaniques et de la pression de pore selon la loi de Biot linéaire ou non linéaire, tout modèle rhéologique, existence de discontinuités obéissant à des lois de tout type, transformations finies en tenant compte non seulement des grands déplacements mais aussi des grandes déformations avec respect du principe d'objectivité en utilisant les vitesses de Jauman pour les contraintes. Il convient ici de signaler qu'avec le logiciel VIPLEF toutes les fonctionnalités sont cumulatives : la

structure étudiée peut être constituée de plusieurs matériaux avec des lois de natures différentes (plasticité, viscosité ...), comporter des discontinuités (joints), avoir un fluide extérieur, une sollicitation thermique, des éléments structuraux (soutènement) tout en subissant des grands déplacements et des grandes déformations. Par ailleurs, dans les lois de comportement (modèles rhéologiques) non seulement on peut faire intervenir la température mais aussi la pression interstitielle permettant ainsi d'avoir des critères faisant intervenir les contraintes effectives ou totales ou mêmes d'autres combinaisons (contraintes effectives non élastiques) y compris des combinaisons non linéaires.

C.1.3 Méthodes numériques

Dans les trois codes numériques on a affaire à un problème d'équations différentielles dans l'espace et dans le temps avec des éventuelles non linéarités dans les lois. La description cidessous des algorithmes implémentés dans le progiciel VIPLEF permet de comprendre le choix des tests de vérification.

Pour chacun des trois problèmes (conduction thermique, diffusion de fluide, mécanique des milieux déformables) on fait appel à un algorithme d'intégration dans le temps pas à pas et à un procédé itératif pour les non linéarités de sorte à ce que le "coeur" du processus soit un problème d'équations différentielles linéaires dans l'espace qui est abordé par une discrétisation par la Méthode des Eléments Finis.

Ainsi, la vérification (objet du présent manuel) peut parfaitement passer par un cas qui présente le plus possible de complexités spatiales (gros maillage avec divers types d'éléments finis, hétérogénéités, géométrie complexe, conditions aux limites mixtes et complexes ...) tout en ayant une solution analytique simple.

En effet l'objet d'un manuel de vérification n'est pas de valider une méthode numérique (la méthode des éléments finis par exemple) mais de montrer que la méthode a été proprement codée dans le logiciel. Un tel test est donc probant y compris en tant que test dit d'intégration (dans le sens où l'on passe pratiquement par tous les modules cruciaux du code et en particulier en ce qui concerne la gestion des entrées/sortie, de la mémoire et des divers appels).

Quant aux autres algorithmes (intégration dans le temps et processus itératif), ils peuvent être contrôlés par des tests classiques plus simples choisis selon leur pertinence eu égard à chacune des fonctinnalités que l'on cherche à contrôler.

A) Régime transitoire de la conduction et de la diffusion

Dans les logiciels CHEF et HYDREF l'intégration dans le temps est faite par la méthode d'Euler implicite avec un pas d'intégration spécifiée par l'utilisateur et qui peut varier au cours du temps.

B) Viscosité

Lorsque la structure présente un matériau avec une loi de comportement du type élastovisco-plastique le code VIPLEF utilise la Méthode des Contraintes Initiales et procède à une intégration dans le temps avec une technique de "fluage par paliers" qui consiste à ce que, au niveau de la structure, on effectue un pas de temps en admettant que les contraintes, les pressions de pore et les températures sont restées constantes durant ce pas. Cet algorithme permet une automatisation du calcul du bon pas d'intégration et est relativement robuste grâce au fait que les modèles rhéologiques sont explicitement intégrés y compris lorsqu'ils présente de l'écrouissage.

C) Non linéarités du type plasticité

Dans le cas de l'élastoplasticité, VIPLEF utilise la Méthode des Contraintes Initiales et fait appel à un procédé itératif pour satisfaire les critères de plasticité et les lois d'écoulement plastique sans aucune linéarisation des vraies lois de comportement.

D) Transformations finies

Les transformations finies (grands déplacements et/ou déformations) sont traitées dans VIPLEF par décomposition en une succession de transformations infinitésimales avec réactualisation de la géométrie et des contraintes (Méthode dite du Lagrangien Réactualisé utilisée dans VIPLEF depuis sa création en 1978).

E) Couplage

Le couplage entre les trois phénomènes (thermique, hydraulique et mécanique) est réalisé par un "automate" externe qui adopte un procédé itératif au cours duquel on effectue des appels successifs à CHEF, HYDREF et VIPLEF. A notre connaissance cette technique numérique n'a jamais fait l'objet d'étude générale par des spécialistes de mathématiques appliquées mais les nombreuses expériences nous ont prouvé son efficacité et puisqu'ici il s'agit de manuel de vérification précisons que l'on peut démontrer rigoureusement que lorsque cet algorithme de couplage externe converge alors la solution obtenue est bonne dans le sens qu'elle vérifie les équations discrétisées.

C.1.4 Aspects informatiques

Rédigés en Fortran les trois codes CHEF, HYDREF et VIPLEF ne nécessitent aucune librairie externe à part les librairies mathématiques élémentaires disponibles avec tout compilateur et éventuellement la librairie X11 pour les graphiques sur écran. Depuis 1995, les utilisateurs du progiciel VIPLEF font appel au logiciel DELOS (olivier.stab@ensmp.fr) pour la réalisation de maillages. Le logiciel DELOS est lui aussi en Fortran et est autonome (il n'a pas besoin de librairies particulières et est totalement indépendant du progiciel VIPLEF).

Pour le progiciel VIPLEF le réalisateur a opté pour une numérotation de la version qui consiste en une date à 6 chiffres (2 pour les derniers chiffres de l'année puis 2 pour le mois et en fin 2 pour le jour). A chaque version est associé un fichier texte qui explique ce qui a changé par rapport à la version précédente et qui signale la compatibilité ou non avec les fichiers de données existants. Par ailleurs la "traçabilité" d'une étude réalisée avec le progiciel VIPLEF est gérée simplement en mettant dans les fichiers de sortie "texte", la version du logiciel, la date courante fournie par l'ordinateur ainsi que les noms des fichiers de données.

C.2 Vérification des noyaux des codes

Comme cela a été dit précédemment dans chacun des trois codes numériques l'intervention du temps et l'existence de non linéarités font appel à des algorithmes dont le coeur (noyau) est un problème linéaire classique d'équations différentielles dans l'espace (formulation locale) qui se ramène à un problème de minimisation d'une forme quadratique moins une forme linéaire (formulation variationnelle) abordé dans le progiciel VIPLEF par une discrétisation par Eléments Finis de type Lagrangien (Triangle ou quadrilatère du premier ou du second degré).

Une méthode simple mais robuste pour tester le noyau de chaque code est de définir une structure à géométrie complexe avec un maillage mixte (triangles et quadrilatères), des trous et des hétérogénéités (plusieurs matériaux). Ensuite on choisit à l'avance une solution du type polynôme de degré correspondant à celui des éléments, solution pour la grandeur de référence (température pour CHEF, potentiel pour HYDREF et déplacements pour VIPLEF) et on impose les conditions aux limites et les seconds membres des équations différentielles déduites par calcul analytique de la solution décrétée. Ce procédé particulier mais efficace qui consiste à définir un problème à partir de sa solution connue a été utilisé pour tester la majeure partie des fonctionnalités du progiciel VIPLEF depuis 1978.

D Manuel de conception de VIPLEF3D

Extrait du manuel de conception du logiciel VIPLEF3D réalisé par Michel TIJANI.

D.1 Contraintes et équations du mouvement

D.1.1 Forces extérieures

A tout instant t la structure étudiée occupe une partie Ω de l'espace euclidien \mathbb{R}^3 et est en équilibre sous l'action de forces volumiques \vec{f} (définies dans Ω et représentant les actions à distance $\rho \vec{g}$ et les forces d'inertie $-\rho \vec{u}$) et de forces surfaciques \vec{G} (exercées sur la frontière $\partial \Omega$ de Ω). La résultante de ces forces est :

$$\int_{\Omega} \vec{f}(\vec{x}) dV + \int_{\partial \Omega} \vec{G}(\vec{x}) dS = \vec{0}$$

Le vecteur moment résultant par rapport à l'origine est :

$$\int_{\Omega} \vec{x} \wedge \vec{f}(\vec{x}) dV + \int_{\partial \Omega} \vec{x} \wedge \vec{G}(\vec{x}) dS = \vec{0}$$

D.1.2 contraintes

Soit P une partie arbitraire de Ω . Alors P est en équilibre sous les mêmes forces volumiques \vec{f} (définies dans P) et sous les forces surfaciques $\vec{\Sigma}$ exercées sur la frontière ∂P par contact entre les particules de P et celles du reste de la structure $\Omega - P$.

En tout point \vec{x} de ∂P on définit un vecteur normé \vec{n} normal à la surface ∂P et dirigé vers l'extérieur de P. On démontre alors (théorème de Cauchy) que la force par unité de surface $\vec{\Sigma}$ (vecteur contrainte) est une fonction linéaire de \vec{n} :

$$\vec{\Sigma} = \vec{\sigma} \vec{n}$$

En choisissant une base, cette écriture intrinsèque prend la forme matricielle suivante :

Σ_1		σ_{11}	σ_{12}	σ_{13}	n_1
Σ_2	=	σ_{21}	σ_{22}	σ_{23}	n_2
Σ_3		σ_{31}	σ_{32}	σ_{33}	n_3

La matrice 3 x 3 ainsi introduite est la matrice des contraintes représentant dans la base choisie le tenseur de contrainte de Cauchy σ .

Compte tenu du choix de la normale extérieure (au lieu de la normale intérieure) la convention de signe sur les contraintes diagonales σ_{ii} est telle que toute contrainte de compression se traduit par un nombre négatif.

D.1.3 Cas d'un milieu poreux saturé

Dans toute la notice $\underline{\sigma}$ désignera le tenseur de contraintes effectives alors que les équations du mouvement concernent le complexe squelette (milieu poreux) + fluide (pression p). Autrement dit les forces volumiques \vec{f} et surfaciques \vec{G} correspondent aux contraintes totales.

Raison pour laquelle la relation $\vec{\Sigma} = \underline{\sigma} \vec{n}$ est généralisée en écrivant que la force surfacique $\vec{\Sigma}$ exercée sur ∂P est la somme de la force $\underline{\sigma} \vec{n}$ due au contact solide-solide et de la force $-bp\vec{n}$ due au contact fluide-fluide où b est le coefficient de Biot (b = 1 correspond à la théorie classique de Terzaghi).

Par conséquent, la force totale exercée sur la frontière d'un milieu saturé est par unité de surface :

$$\Sigma = \underline{\sigma}\,\vec{n} - bp\,\vec{n}$$

En introduisant le tenseur unité $\frac{1}{2}$ (de composantes δ_{ij}) on fait apparaître le tenseur de contrainte totale $\underline{\sigma} - bp_{\underline{1}}$ qui intervient dans la relation $\vec{\Sigma} = (\underline{\sigma} - bp_{\underline{1}})\vec{n}$ et qui est fonction de la contrainte effective $\underline{\sigma}$ et de la pression interstitielle p.

D.1.4 Equations du mouvement

L'équilibre de toute partie P de Ω sous l'action de forces extérieures et d'inertie est assuré si et seulement si les deux relations vectorielles suivantes sont vérifiées :

$$\int_{P} \vec{f}(\vec{x}) dV + \int_{\partial P} (\underline{\sigma} - bp\underline{1}) \vec{n} dS = \vec{0}$$
$$\int_{P} \vec{x} \wedge \vec{f}(\vec{x}) dV + \int_{\partial P} \vec{x} \wedge (\underline{\sigma} - bp\underline{1}) \vec{n} dS = \vec{0}$$

En transformant les intégrales de surface (sur ∂P) en intégrales de volume (dans P), ces deux égalités se simplifient conduisant au théorème de l'équilibre (équations du mouvement lorsque les forces d'inertie sont prises en compte).

Pour que Ω (donc toute partie P de Ω) soit en équilibre il faut et il suffit que le champ tensoriel $\underline{\sigma}$ des contraintes effectives soit symétrique ($\sigma_{ji} = \sigma_{ij}$) et vérifie 3 équations différentielles dans Ω assorties de 3 conditions aux limites sur $\partial \Omega$:

$$\begin{split} \vec{div}(\underline{\sigma} - bp\underline{1}) + \vec{f} &= \vec{0} & \text{dans } \Omega \\ (\underline{\sigma} - bp\underline{1})\vec{n} &= \vec{G} & \text{sur } \partial\Omega \end{split}$$

D.2 Déformations et lois de comportement

D.2.1 Déplacements

A l'instant initial t = 0 la structure occupe une partie Ω_0 de l'espace \mathbb{R}^3 dite configuration de référence. Toute particule de la structure initialement à la position \vec{x}_0 vient à l'instant tau point \vec{x} fonction de \vec{x}_0 et de t. La différence $\vec{u} = \vec{x} - \vec{x}_0$ des deux positions est appelée vecteur de déplacement. Il est donc, par convention, nul à l'instant t = 0 (\vec{u} est mesuré par rapport à la configuration de référence).

D.2.2 Vitesses de déplacement

Le vecteur $\vec{u} = d\vec{u}/dt$ est la vitesse de déplacement qui est la dérivée partielle de \vec{u} par rapport à t lorsque \vec{u} est considéré comme fonction de \vec{x}_0 et de t (représentation Lagrangienne). De même pour la température T on a : $dT/dt = \partial_t T(\vec{x}_0, t)$.

Si l'on adopte une représentation Eulérienne (T fonction de \vec{x} et de t), la vitesse dT/dtdevient $\partial_t T(\vec{x}, t) + g\vec{rad}(T) \cdot \vec{u}$. Dans cette relation le vecteur gradient de T est calculé par dérivation de T par rapport à la position actuelle \vec{x} .

D.2.3 Déformations

Considérons une petite transformation à partir de l'état actuel (c'est-à-dire une petite durée dt). Le champ de déplacement relatif à cette petite évolution de la structure est $d\vec{u}$ et le champ des déformations associées est $d\underline{\varepsilon} = grad_s(d\vec{u})$ qui est la partie symétrique du tenseur gradient de $d\vec{u}$ en tant que fonction de la position actuelle \vec{x} . Donc, $d\underline{\varepsilon}$ est un tenseur symétrique dont les composantes dans toute base cartésienne orthonormée fixe (indépendante de \vec{x}) sont :

$$d\varepsilon_{ij} = (1/2)(\partial du_i/\partial x_j + \partial du_j/\partial x_i)$$

La signification pratique de ces composantes est simple. Si au cours de cette petite transformation on s'intéresse à l'évolution d'un petit volume centré autour d'une particule \vec{x} , on s'aperçoit qu'il subit un mouvement composé d'une translation (toutes ses particules se déplacent de $d\vec{u}$), d'une rotation (associée à la partie antisymétrique du gradient de $d\vec{u}$) et d'une déformation (liée à $d\underline{\varepsilon}$).

La déformation est telle que la dimension l_1 du petit volume dans la direction Ox_1 subit une variation relative $dl_1/l_1 = d\varepsilon_{11}$ (idem pour les 2 autres termes diagonaux appelés dilatations) et l'angle $\langle Ox_1, Ox_2 \rangle$ initialement droit subit une variation qui est $-2d\varepsilon_{12}$ en radians (idem pour les 2 autres termes extra diagonaux appelés distorsions).

D.2.4 Transformations infinitésimales

Dans le cadre de la théorie des transformations infinitésimales on admet que le passage de la configuration de référence Ω_0 à toute configuration actuelle Ω est caractérisé par un champ vectoriel de déplacement \vec{u} tel qu'en tout point \vec{x} de Ω la norme de $\vec{u}(\vec{x})$ est très petite vis-à-vis d'une dimension caractéristique de Ω et la norme de $grad(\vec{u})(\vec{x})$ est très

petite vis-à-vis de 1 (Donc à la fois les déformations et les rotations sont petites).

Ainsi, il est possible de confondre \vec{x}_0 et \vec{x} dans les dérivations par rapport aux coordonnées. En particulier, d'une part les équations du mouvement sont exprimées en utilisant la géométrie initiale Ω_0 (qui a le mérite d'être connue) et d'autre part dans les relations entre déformations et déplacements on profite du remplacement de \vec{x} par \vec{x}_0 pour permuter la dérivation par rapport à l'espace et celle par rapport au temps aboutissant aux formules classiques :

$$\varepsilon_{ij} = (1/2)(\partial u_i/\partial x_j^0 + \partial u_j/\partial x_i^0)$$

Par exemple, la relation $d\varepsilon_{11} = dl_1/l_1$ est écrite $d\varepsilon_{11} = dl_1/l_1^0$ puis est intégrée par rapport au temps : $\varepsilon_{11} = (l_1 - l_1^0)/l_1^0$.

D.2.5 Transformations finies

Reprenons l'exemple de la dilatation ε_{11} . La relation $d\varepsilon_{11} = dl_1/l_1$ s'intègre en $\varepsilon_{11} = \ln(l_1/l_1^0)$. On définit ainsi la déformation logarithmique de Henky. Si l_1 est voisin de l_1^0 (petites déformations) ε_{11} devient voisin de $(l_1 - l_1^0)/l_1^0$ où l'on retrouve la variation relative de longueur de la théorie simplifiée.

Par ailleurs, si la loi de comportement du matériau doit relier la vitesse de déformation $\dot{\underline{\varepsilon}} = grad_s(\dot{\overline{u}})$ à la contrainte effective, d'une part celle-ci doit intervenir par une vitesse objective (référentiel lié à la matière, exemple : dérivée de Jaumann) et d'autre part les tenseurs matériels (paramètres d'élasticité par exemple) doivent "suivre" la matière dans sa rotation.

Quant aux équations du mouvement elles doivent rester exprimées par des dérivées par rapport à la géométrie actuelle $\vec{x} = \vec{x}_0 + \vec{u}$ inconnue en faisant attention au fait que $\vec{div}(\underline{\dot{\sigma}} - (\underline{\dot{bp}})\underline{1}) + \vec{f}$ n'est pas un vecteur nul bien que le vecteur $\vec{div}(\underline{\sigma} - bp\underline{1}) + \vec{f}$ le soit car il n'est pas licite de permuter \vec{x} et t dans la dérivation vu que \vec{x} est fonction de t (mouvement).

D.3 Lois de comportement

L'analyse effectuée ci-dessus utilise deux concepts qui pour le moment sont indépendants :

- un concept mécanique : les contraintes et leur lien aux forces extérieures et les forces d'inrtie par les équations du mouvement,
- un concept cinématique : les déformations et leur lien aux déplacements, c'est-à-dire à la transformation géométrique de la structure.

Par ailleurs, cette analyse dans laquelle on n'a besoin que de la géométrie de la structure sans intervention de la nature des matériaux qui la constituent, aboutit à un système différentiel avec conditions aux limites dont les inconnues scalaires sont 6 contraintes, 3 déplacements et 6 déformations et dont les équations scalaires sont 3 équations de mouvement et 6 relations entre déformations et déplacements. Il nous manque donc 6 équations qui sont en fait les relations entre contraintes et déformations.

Il s'agit des lois de comportement des matériaux (rhéologie) qui ont la propriété de ne pas dépendre de la géométrie dans le sens où si l'on découpe un petit volume de forme arbitraire centré en un point \vec{x} de Ω alors le lien entre la contrainte et la déformation dans ce petit volume ne dépend que de la nature du matériau dont il est fait. Les valeurs des contraintes et des déformations n'ont pas d'importance ici, ce qui compte c'est le lien entre les deux. Lien qui peut donc être déterminé au laboratoire sur des éprouvettes ayant des formes simples et soumises à un état de déformation homogène connu. Pour chaque état de déformation on mesure l'état de contrainte et l'on établit la loi de comportement reliant $\underline{\sigma}$ à

```
\underline{\varepsilon} et caractérisant le matériau étudié.
```

D.3.1 Matériaux réversibles (Elasticité)

La loi de comportement de tels matériaux généralise la loi d'état d'un fluide. Elle exprime qu'à tout instant t, la contrainte σ est fonction de la déformation ε et de la température T.

$$\underline{\sigma} = f(\underline{\varepsilon}, T)$$

Lorsque f est linéaire on peut l'écrire sous la forme :

$$\underbrace{ \begin{array}{l} \underline{\sigma} \\ \underline{\sigma} \end{array} = \begin{array}{l} \underline{\sigma}_{0} + \underbrace{ H}_{\underline{\varepsilon}} (\underline{\varepsilon} - \underline{\varepsilon}^{th}) \\ \underline{\varepsilon}^{th} \\ \underline{\varepsilon}^{th} \end{array} = \begin{array}{l} (T - T_{0}) \underline{\alpha} \end{array}$$

 $\underline{\sigma}_0$: contraintes effectives initiales (état de référence)

 $\underline{\sigma}$: contraintes effectives actuelles (instant t)

 $\underline{\varepsilon}$: déformations mesurées à partir de l'état de référence

 T_0, T : températures initiale et actuelle

 $\underline{\varepsilon}^{th}$: dilatations thermiques (nulles à l'état de référence)

 α : coefficients des dilatations thermiques linéiques (tenseur symétrique).

H: coefficients d'élasticité, tenseur (symétrique à 4 indices) d'élasticité ou tenseur de =

Hooke. Il est défini positif et donc inversible (son inverse est H^{-1}). La loi d'élasticité linéaire devient :

devient :

$$\underbrace{\underbrace{\varepsilon}}_{\underline{z}} = \underbrace{H^{-1}}_{\underline{z}} (\underbrace{\sigma}_{\underline{z}} - \underbrace{\sigma}_{\underline{z}0}) + \underbrace{\varepsilon}^{th}$$

Ainsi un matériau élastique linéaire se caractérise par les propriétés suivantes :

- la déformation se décompose en partie élastique et partie thermique (loi de partition),
- le couple ($\underline{\sigma}, T$) est la variable de l'état thermodynamique du matériau de sorte que $\underline{\varepsilon}(t)$ n'est fonction que de $\underline{\sigma}(t)$ et T(t) sans effet ni de mémoire, ni d'hystérésis ... (absence de viscosité).
- tout couple $(\underline{\sigma}, T)$ est un état admissible en particulier le matériau peut supporter n'importe quelle contrainte sans dommage ni rupture (absence de critère de plasticité).

D.3.2 Matériaux à paramètres internes

Il s'agit d'une vaste famille de matériaux englobant en particulier les matériaux élastiques linéaires et non linéaires et la plupart des matériaux irréversibles connus que l'irréversibilité soit par viscosité ou par plasticité ou par les deux (matériaux élastovicoplastiques avec plasticité instantanée).

On peut présenter sommairement de tels matériaux par les propriétés suivantes :

 la loi de partition conduit à décomposer la déformation en une partie élastique, une partie thermique et une partie non élastique :

$$\underset{=}{\varepsilon} = \underset{=}{\overset{H^{-1}}{\underset{=}{H^{-1}}}} (\underset{=}{\sigma} - \underset{=}{\sigma}_0) + \underset{=}{\varepsilon}^{th} + \underset{=}{\varepsilon}^{ne}$$

Par ailleurs la déformation $\underline{\varepsilon}^{ne}$ est décomposée en une partie $\underline{\varepsilon}^{v}$ due à l'irréversibilité par viscosité et une partie $\underline{\varepsilon}^{p}$ due à l'irréversibilité par plasticité :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^{ne} = \underline{\underline{\varepsilon}}^v + \underline{\underline{\varepsilon}}^p$$

Dans un matériau viscoélastique (linéaire ou non) ou élastoviscoplastique seule la partie visqueuse existe ($\underline{\varepsilon}^p = \underline{0}$), absence de limites pour les états admissibles. Les matériaux élastoplastiques sont tels que $\underline{\varepsilon}^v = \underline{0}$ (absence de viscosité). Les matériaux mixtes ont à la fois une composante visqueuse et une composante plastique (déformation plastique instantanée). Dans tous les cas, les déformations $\underline{\varepsilon}^v$ et $\underline{\varepsilon}^p$ ne sont pas observables directement (variables internes).

- l'état thermodynamique est défini par $(\underline{\sigma}, T, \underline{\varepsilon}^v, \xi^v, \underline{\varepsilon}^p, \xi^p)$ où les variables ξ^v et ξ^p sont des paramètres internes complémentaires appelées variables d'écrouissage. Les vitesses des paramètres internes visqueux $\underline{\varepsilon}^v$ et ξ^v sont des fonctions connues de $(\underline{\sigma}, T, \underline{\varepsilon}^v, \xi^v)$ (lois d'évolution).
- la variable $(\underline{\sigma}, T, \underline{\varepsilon}^p, \xi^p)$ ne peut correspondre à un état admissible que si elle vérifie $F(\underline{\sigma}, T, \underline{\varepsilon}^p, \xi^p) \leq 0$

La fonction scalaire F est le critère de plasticité et l'ensemble des états qui vérifient l'inégalité s'appelle domaine d'élasticité (sa frontière est la surface de limite élastique). Lorsque l'état est à l'intérieur du domaine d'élasticité (inégalité stricte) ou lorsque l'état est à la surface limite et qu'une évolution telle que $d\varepsilon^p = 0$ et $d\xi^p = 0$ conduit vers un état admissible alors les variables internes plastiques ε^p et ξ^p ont des vitesses nulles.

Si
$$F < 0$$
 ou $[F = 0$ et $\partial_{\sigma} F.d\sigma + \partial_T F dT \leq 0]$ alors $d\underline{\varepsilon}^p = 0$ et $d\xi^p = 0$

En revanche si F = 0 et $\partial_{\underline{\sigma}} F.d\underline{\sigma} + \partial_T FdT > 0$ les vitesses de $\underline{\varepsilon}^p$ et ξ^p ont des directions fonctions connues de $(\underline{\sigma}, T, \underline{\varepsilon}^p, \xi^p)$ (lois d'écoulement).

On voit ainsi que le cadre théorique des matériaux à paramètres internes est tellement large qu'il laisse la possibilité au spécialiste d'imaginer une infinité de modèles rhéologiques qui se distinguent entre eux non seulement par le nombre des variables d'écrouissage ξ^v et ξ^p et la nature mathématique (scalaire ou tensorielle) de chacun de ces paramètres mais aussi par la forme des lois d'évolution (viscosité) et d'écoulement (plasticité).

La seule précaution à prendre est que ces lois doivent respecter le principe d'objectivité (les lois doivent être intrinsèques, c'est-à-dire indépendantes du référentiel spatio-temporel) et le second principe de la thermodynamique qui se traduit par le fait qu'à tout moment la puissance $\underline{\sigma} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}^{ne}$ (produit scalaire des tenseurs de contrainte et de vitesse de déformation non élastique) doit rester positive ou nulle. Nous verrons dans les exemples ci-après que cela se traduit par des restrictions sur les valeurs des caractéristiques mécaniques du matériau comme par exemple le fait qu'un matériau de Coulomb (critère et potentiel de Coulomb) doit avoir un angle de dilatance (caractérisant le potentiel) inférieur ou égal à son angle de frottement (intervenant dans le critère).

D.3.3 L'isotropie

Lorsqu'un matériau à paramètres internes est isotrope ses lois de comportement sont forcément telles que :

- toute grandeur scalaire qui n'est fonction que des variables internes scalaires et du tenseur des contraintes effectives ne dépend de celui-ci que par ses 3 invariants (par exemple ses valeurs propres).
- toute grandeur tensorielle qui est dans les mêmes conditions que ci-dessus a nécessairement une base propre commune avec le tenseur des contraintes effectives.
- le tenseur des dilatations thermiques est isotrope donc de la forme du produit d'une fonction scalaire (coefficient de dilatation thermique linéique) et du tenseur unité,
- la loi d'élasticité de Hooke est telle que, pour tout tenseur $\beta_{\underline{\beta}}$ dont la trace est $tr(\beta)$, on a :

$$\begin{array}{rcl} H\beta &=& 2\mu\beta + \lambda tr(\beta) \\ = &=& \\ H^{-1}\beta \\ = &=& [(1+\nu)/E]\beta - (\nu/E)tr(\beta) \\ = &=& \end{array}$$

E : module d'Young

 ν : coefficient de Poisson

 $\mu = E/(1+\nu)/2$: module de cisaillement

 $\lambda = \nu E/(1+\nu)/(1-2\nu)$: module de Lamé.

Afin d'illustrer la théorie des milieux à paramètres internes 9 exemples ont été choisis dont les 8 premiers sont les modèles rhéologiques de la présente version de VIPLEF3D et le dernier est l'exemple choisi dans le guide d'introduction de nouveaux modèles rhéologiques qui fait partie de la notice de programmation.

D.3.4 Le matériau de J. Lemaitre

Il s'agit d'un matériau isotrope visqueux dont l'unique variable d'écrouissage est ξ^v (déformation viscoplastique équivalente) définie par l'égalité :

$$\dot{\xi^v} = || \dot{\underline{\varepsilon}}^v ||$$

Par ailleurs, ce matériau étant à la fois isotrope et incompressible $(tr \underline{\varepsilon}^v = 0)$, la vitesse du tenseur déformation viscoplastique est forcément parallèle au tenseur déviateur des contraintes $\underline{\sigma}'$:

$$\underline{\sigma}' = \underline{\sigma} - (tr\underline{\sigma}/3) \underline{1}$$
$$\underline{\dot{\varepsilon}}^v = (\dot{\xi^v}/||\underline{\sigma}'||) \underline{\sigma}'$$

Il ne nous reste plus donc qu'à définir la vitesse de la variable d'écrouissage ξ^v en fonction de l'état $(\underline{\sigma}, T, \underline{\varepsilon}^v, \xi^v)$.

Dans sa formulation originale (thèse de J. Lemaitre) on pose $J = \sqrt{3/2} ||\underline{\sigma}'||$ (second invariant ou contrainte équivalente de Mises) et $\zeta = \sqrt{2/3}\xi^v$; alors le modèle est défini par

3 caractéristiques mécaniques qui sont deux exposants n et m et un paramètre k (fonction de la température T) et on a :

$$J = k \dot{\zeta}^{1/n} \zeta^{1/m}$$

Par conséquent, au cours d'un essai de fluage (contrainte et température constantes dans le temps), la loi d'évolution s'intègre aisément en loi puissance du temps (exposant α) et de la contrainte équivalente (exposant β) :

$$\zeta = 10^{-6} (J/K)^{\beta} t^{\alpha}$$

$$\alpha = m/(n+m)$$

$$\beta = nm/(n+m)$$

$$K = k 10^{-6/\beta} \alpha^{1/n}$$

La quantité $10^6 \zeta$ est la déformation axiale différée exprimée en micromètre par mètre au cours d'un essai monoaxial de fluage sous la contrainte axiale J.

L'influence de la température T est prise en compte par une loi exponentielle dans laquelle on fait intervenir une valeur K_r de K à une température particulière T_r ainsi qu'un nouveau paramètre A = Q/R relié à l'énergie d'activation Q et à la constante des gaz parfaits :

$$\zeta = 10^{-6} \exp(A/T_r - A/T) (J/K_r)^{\beta} t^{\alpha}$$

Dans le logiciel VIPLEF3D on a complété légèrement ce modèle en faisant dépendre le fluage non pas de la contrainte équivalente J mais de son écart par rapport à une certaine limite élastique 2C où C est la cohésion du matériau (nulle dans le cas du modèle original).

Le matériau de J. Lemaitre programmé dans VIPLEF3D est donc défini par les 6 paramètres rhéologiques : $K_r > 0$, $T_r > 0$, $\beta \ge 0$, $\alpha > 0$, $C \ge 0$ et $A \ge 0$.

D.3.5 Le comportement post-rupture plastique

Une éprouvette cylindrique constituée de ce matériau est soumise à une pression latérale P (confinement) et à une pression axiale Q (essai triaxial classique). L'état de référence est tel que Q = P et le confinement P est maintenu constant durant l'essai pendant que la déformation axiale ε (diminution relative de la longueur) augmente.

La courbe effort-déformation (Q fonction de ε) que l'on obtient est une ligne brisée constituée de 3 parties :

- phase élastique : la droite est de pente E (module d'Young). La déformation latérale ε_l (augmentation relative du diamètre) est une fonction linéaire de ε de pente ν (coefficient de Poisson). Cette phase se termine lorsque $Q = R_c + K P$ où R_c est la résistance maximale (pic) à la compression simple et $K = tg^2 (\Pi/4 + \Phi/2)$ où Φ est l'angle de frottement.
- phase radoucissante : durant cette phase la pression axiale Q chute linéairement de $R_c + K P$ à $R_r + K P$ où R_r est la résistance résiduelle en compression simple. Cette phase s'arrête lorsque ε atteint $(Q - P)/E + \xi_m$ où ξ_m est l'écrouissage maximal (caractéristique du matériau). Le matériau est dit parfait quand on a $R_c = R_r$ et $\xi_m = 0$. Le matériau est dit fragile lorsque les résistances R_c et R_r sont différentes alors que ξ_m est nul (dans ce cas il est conseillé de lui attribuer une valeur faible mais non nulle pour des raisons numériques). La pente $p = (R_c - R_r)/\xi_m$ (nulle pour un matériau parfait) est un des paramètres du matériau. En introduisant p < 0 on simule un durcissement (écrouissage positif).

- phase résiduelle : la pression axiale reste indéfiniment constante $Q = R_r + K P$ (plasticité parfaite). La déformation latérale ε_l est reliée linéairement à la déformation axiale ε avec une pente $\beta/2$ (pseudo-coefficient de Poisson plastique) où $\beta = tg^2 (\Pi/4 + \delta/2)$ est le coefficient dit de gonflement (δ angle de dilatance).

Ayant vu la signification physique de tous les paramètres il reste à préciser que le matériau est isotrope, qu'il obéit au critère de Coulomb tronqué en traction (résistance R_t) et au potentiel de Drucker et qu'il n'a qu'une variable d'écrouissage scalaire ξ telle que $\dot{\xi} = ||\dot{\underline{\varepsilon}}^p||/\sqrt{\beta^2/2 + 1}$. Les 6 paramètres rhéologiques qui sont K, β , R_r , R_c , ξ_m et R_t doivent vérifier les inégalités :

$$\begin{split} K &\geq 1 , \ \gamma = (K-1)/\sqrt{K^2 + K + 1} \ , \ \beta_m = 2(1+\gamma)/(2-\gamma) \ , \\ \beta &\geq 1 \ , \ \beta \leq \ \beta_m \ , \ R_r \geq \ 0 \ , \ R_c \geq \ 0 \ , \ \xi_m \geq \ 0 \ \text{et} \ \ R_t \geq \ 0. \end{split}$$

Le critère de Coulomb tronqué est : $F(\underline{\sigma}, \xi) = max(K\sigma_1 - \sigma_3 - R(\xi), \sigma_1 - R_t)$ où $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3$ sont les contraintes principales et $R(\xi) = R_r + p(\xi_m - \xi)$ pour $\xi \leq \xi_m$ et $R(\xi) = R_r$ pour $\xi \geq \xi_m$.

Le potentiel de Drucker est : $P(\underline{\sigma}) = [(\beta + 2)/\sqrt{6}] ||\underline{\sigma}'|| + [(\beta - 1)/3] tr(\underline{\sigma})$ sachant que $\underline{\dot{\varepsilon}}^p$ est parallèle au gradient $\partial_{\sigma} P$.

$$\partial_{\underline{\sigma}}P = \left[(\beta+2)/\sqrt{6}/||\underline{\sigma}'||\right] \underline{\sigma}' + \left[(\beta-1)/3\right] \underline{1}$$

D.3.6 Le comportement post-rupture viscoplastique

La description de ce matériau élastoviscoplastique isotrope à paramètres internes peut se résumer par deux propriétés :

- son comportement quasi-statique (à vitesse de déformation théoriquement nulle ou en réponse asymptotique) est celui du matériau élastoplastique décrit ci-dessus et qui est défini par les 6 paramètres K, β , R_r , R_c , ξ_m et R_t ,
- son comportement transitoire obéit à des lois d'évolution simples (lois linéaires). La vitesse du tenseur de déformation non élastique est parallèle au gradient $\partial_{\underline{\sigma}} P$ du potentiel P et son intensité est proportionnelle au critère de Coulomb tronqué F (critère de plasticité) si $F \geq 0$ et est nulle si non.

Le coefficient de proportionnalité est tel qu'au cours de tout essai de fluage monodimensionnel sous la pression axiale Q, la déformation axiale a comme vitesse : $\dot{\varepsilon} = [Q - R(\xi)]/\eta$ si $Q \ge R(\xi)$. Le septième paramètre caractérisant ce matériau est donc son module de viscosité η .

$$\begin{split} K &\geq 1 , \ \gamma = (K-1)/\sqrt{K^2 + K + 1} , \ \beta_m = 2(1+\gamma)/(2-\gamma) , \\ \beta &\geq 1 , \ \beta \leq \beta_m , \ R_r \geq 0 , \ R_c \geq 0 , \ \xi_m \geq 0 , \ R_t \geq 0 \ \text{et} \ \eta > 0. \end{split}$$

D.3.7 Le matériau de Prager

Le modèle rhéologique de Prager définit un matériau isotrope, élastoplastique avec écrouissage obéissant au critère F de Mises en étant standard (donc potentiel P de Mises).

$$S(\xi) = S_0 + E' min(\xi, \xi_m)$$

$$F(\underline{\sigma}, \xi) = \sqrt{3/2} ||\underline{\sigma}'|| - S(\xi)$$

$$P(\underline{\sigma}) = \sqrt{3/2} ||\underline{\sigma}'||$$

La limite élastique S (double de la cohésion) varie en fonction de la déformation plastique équivalente ξ (l'unique variable d'écrouissage) selon la loi $S = S_0 + E'min(\xi, \xi_m)$.

 S_0 est la limite élastique initiale (avant déformations plastiques), E' est le module d'écrouissage (négatif, nul ou positif) et ξ_m est la déformation plastique équivalente maximale à partir de laquelle le matériau devient parfait (limite élastique constante et égale à $S_0 + E'\xi_m$).

D.3.8 Le matériau de J. KICHEMIN

Des essais réalisés au Laboratoire de Mécanique des Solides (Ecole Polytechnique) sur des échantillons de polyéthylène soumis à une traction "simple" ont montré que la relation entre l'historique de la contrainte de traction σ et celui de la déformation associée ε est correctement représenté par un modèle rhéologique simple proposé par J. KICHEMIN (thèse, LMS, Ecole Polytechnique, 1992) et généralisé ici en tant que loi de comportement (Rapport interne CGES R94/9, Octobre 1994, M. TIJANI).

Le modèle rhéologique (monodimensionnel) est constitué de deux branches en parallèle (même déformation ε et additivité des contraintes $\sigma = \sigma^v + \sigma^p$).

La première branche correspond à un matériau viscoélastique linéaire (module d'élasticité K_v et module de viscosité η). Elle consiste donc en un montage en série d'un ressort (K_v) et d'un amortisseur (η) .

La seconde branche représente un modéle élastoplastique avec écrouissage cinématique. Un ressort (K_p) est en série avec un montage parallèle d'un ressort (α) et d'un patin dont le seuil de plasticité est (σ_c) . Il va de soi qu'un tel modèle rhéologique est compatible avec une infinité de lois de comportement tridimensionnelles.

Dans VIPLEF3D la généralisation de ce modèle correspond à un matériau mixte pour lequel la viscosité (loi d'évolution de $\underline{\varepsilon}^{v}$) est régie par les équations :

$$K = K_v + K_p$$

$$\underline{\sigma}' = \underline{\sigma} - (tr\underline{\sigma}/3) \underline{1}$$

$$\underline{\sigma}^v = (3/2)(K_v/K)\underline{\sigma}' + K_v\underline{\varepsilon}^p - K_p\underline{\varepsilon}^v$$

$$\underline{\dot{\varepsilon}}^v = (1/\eta)\underline{\sigma}^v$$

Quant à la partie plastique, elle est régie par un critère et potentiel de Mises avec un écrouissage cinématique linéaire :

$$\begin{split} \underline{\sigma}_{\underline{z}}^{p} &= (3/2)(K_{p}/K)\underline{\sigma}' + K_{p}\underline{\varepsilon}^{v} - K_{v}\underline{\varepsilon}^{p} \\ \underline{s}_{\underline{z}} &= \underline{\sigma}_{\underline{z}}^{p} - (K/K_{p})\alpha\underline{\varepsilon}_{\underline{z}}^{p} \\ F &= \sqrt{3/2} ||\underline{s}|| - \sigma_{c} \leq 0 \end{split}$$

Les deux mécanismes d'irreversibilité (viscosité et plasticité) sont couplés par l'intermédiaire de la variable $K_v \underline{\varepsilon}^p - K_p \underline{\varepsilon}^v$.

D.3.9 Le matériau JOINT

Le matériau élastoplastique JOINT est tel que :

- en cas de décollement les contraintes sont nulles.
- le contact normal est régi par une loi hyperbolique : lors d'un essai de compression normale (pression $p = -\sigma_n$ croissant depuis 0), l'épaisseur du joint subit une diminution (fermeture $u = -\varepsilon_n$ croissante et initialement nulle). La courbe effort-déformation (u en abscisses et p en ordonnées) est une branche d'hyperbole passant par l'origine avec une pente appelée **rigidité normale vierge** (sous contrainte nulle). L'asymptote de l'hyperbole (pression infinie) est atteinte pour une fermeture appelée **épaisseur maximale vierge**.
- le glissement obéit à une loi de frottement sans dilatance caractérisée par un coefficient de frottement (tangente de l'angle de frottement) et une cohésion.

D.3.10 Le matériau de MUNSON et DAWSON

Il s'agit d'un matériau isotrope, élastoviscoplastique à écrouissage scalaire et obéissant au critére et potentiel de Mises. En plus de 3 paramètres $(\bar{t}, \bar{T} \text{ et } \bar{P})$ utiles pour le choix des unités physiques du temps, de la température et des pressions, le matériau est caractérisé par 16 paramètres rhéologiques : T_1 , n_1 , ε_1 , T_2 , n_2 , ε_2 , q', σ_c , ε_3 , ε_4 , m, T_3 , ε_5 , β' , Δ' et δ .

Les équations qui régissent le matériau de Munson et Dawson sont :

$$\begin{split} \underline{\sigma}' &= \underline{\sigma} - (tr\underline{\sigma}/3) \underline{1} \\ J &= \sqrt{3/2} ||\underline{\sigma}'|| \\ \underline{\dot{\varepsilon}}^v &= (3/2/J) \dot{\xi}^v \underline{\sigma}' \\ \underline{\xi}^v &= \zeta + \varepsilon^s \\ \varepsilon^s &= \varepsilon_1^s + \varepsilon_2^s + \varepsilon_3^s + \varepsilon_4^s \\ \dot{\varepsilon}_1^s &= (\varepsilon_1/\bar{t}) \ exp(T_1(1/\bar{T} - 1/T)) \ (J/\bar{P})^{n_1} \\ \dot{\varepsilon}_2^s &= (\varepsilon_2/\bar{t}) \ exp(T_2(1/\bar{T} - 1/T)) \ (J/\bar{P})^{n_2} \\ < x > &= (x + |x|)/2 \\ \dot{\varepsilon}_3^s &= (\varepsilon_3/\bar{t}) \ exp(T_1(1/\bar{T} - 1/T)) \ sh(q' < J - \sigma_c > /\bar{P}) \\ \dot{\varepsilon}_4^s &= (\varepsilon_4/\bar{t}) \ exp(T_2(1/\bar{T} - 1/T)) \ sh(q' < J - \sigma_c > /\bar{P}) \\ \varepsilon^* &= \varepsilon_5 \ exp((T - \bar{T})/T_3) \ (J/\bar{P})^m \\ \Delta &= 0 \ \text{si} \ J = 0 \\ \Delta &= < \Delta' - \beta' Ln(J/\bar{P}) > \ \text{si} \ J > 0 \\ \dot{\zeta} &= (F - 1)\dot{\varepsilon}^s \\ F &= exp[\Delta(1 - \zeta/\varepsilon^*)^2] \ \text{si} \ \zeta \le \varepsilon^* \\ F &= exp[-\delta(1 - \zeta/\varepsilon^*)^2] \ \text{si} \ \zeta \ge \varepsilon^* \end{split}$$

La réponse du matériau de MUNSON et DAWSON à un essai de fluage peut présenter l'une des trois formes suivantes :

- Fluage naissant : $\zeta \leq \varepsilon^*$, la courbe de fluage a une concavité négative.
- Fluage stationnaire ou établi : $\zeta = \varepsilon^*$, la vitesse de la déformation différée $\dot{\varepsilon}^p$ est constante.
- Fluage accéléré : $\zeta \geq \varepsilon^*$, la courbe de fluage a une concavité positive.

Voici un exemple de valeurs des 19 paramètres :

 $\bar{t} = 365$ jours $\bar{T} = 300$ K $\bar{P} = 10$ MPa.

$$\begin{split} T_1 &= 12500 \quad n_1 = 5.5 \quad \varepsilon_1 = 20.556 \ 10^{-6} \\ T_2 &= 5000 \quad n_2 = 5 \quad \varepsilon_2 = 6011.368 \ 10^{-6} \\ q' &= 4.302 \quad \sigma_c = 20.57 \\ epsilon_3 &= 154.005 \ 10^{-6} \quad \varepsilon_4 = 55281.660 \ 10^{-6} \\ m &= 3 \quad T_3 = 108.719 \quad \varepsilon_5 = 5196.858 \ 10^{-6} \\ \beta' &= 3.361 \quad \Delta' = 6.567 \quad \delta = 0.58 \end{split}$$

D.3.11 Le matériau CAMCLAY

Il s'agit d'un matériau isotrope, élastoplastique standard à écrouissage scalaire et dont le critère (identique au potentiel) correspond à une ellipse de grand axe $P_c exp(-\alpha\xi)$ (Pression critique actuelle) et d'excentricité M sachant que P_c est la pression critique à l'état de référence et que ξ (variable d'écrouissage) est la déformation volumique plastique subie par le matériau à partir de cet état. Les paramètres rhéologiques de ce matériau sont M, P_c et α et son critère F est tel que :

$$\begin{split} \underline{\sigma}' &= \underline{\sigma} - (tr\underline{\sigma}/3) \underline{1} \\ J &= \sqrt{3/2} ||\underline{\sigma}'|| \\ P &= -(tr\underline{\sigma}/3) \\ \xi &= tr\underline{\varepsilon}^p \\ G &= (P_c/2) exp(-\alpha\xi) \\ F &= (P - G)^2 + (J/M)^2 - G \end{split}$$

D.3.12 Le matériau en sinus hyperbolique de J. Lemaitre

Il s'agit du maériau de J. Lemaitre défini ci-dessus dans les lois duquel on remplace $(\langle J-2C \rangle/K)^{\beta}$ par $(S/K)^{\beta}$ où $S = \sinh(\langle J-2C \rangle/S_0)$.

Ce modèle a donc un paramètre de plus qui est $S_0 > 0$.

Le paramètre S_0 a la même unité physique qu'une contrainte mais il n'est pas ici seulement pour des raisons d'unités. En prenant S_0 relativement grand (de sorte que le rapport $< J - 2C > /S_0$ reste inférieur à 1/10) on retrouve la loi de Jean Lemaitre avec un K égal au produit de S_0 et du K fourni pour le modèle hyperbolique.

D.3.13 Le matériau mixte



La partie plastique est définie par le critère de Mises.

$$F(\underline{\sigma}) = \sqrt{3/2} ||\underline{\sigma}'|| - S \leq 0$$

Ainsi, l'ensemble de tous les états thermodynamiques admissibles est défini par une restriction sur les contraintes seules (plasticité parfaite). De plus cette plasticité obéit au principe de normalité de Hill (matériau standard dont les déformations plastiques $\underline{\varepsilon}_{\underline{z}}^{p}$ dérivent d'un potentiel identique au critère F). La partie visqueuse qui utilise, elle aussi, le critère et le potentiel de Mises obéit à la loi d'évolution :

$$\underline{\underline{s}} = \underline{\underline{\sigma}}' - (2/3)E'\underline{\underline{\varepsilon}}^v$$

$$s_{eq} = \sqrt{3/2}||\underline{\underline{s}}||$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^v = (3/2/\eta/s_{eq}) < s_{eq} - S' > \underline{\underline{s}}$$

La notation $\langle x \rangle = (x + |x|)/2$ définit un nombre réel nul si $x \leq 0$ et valant x si ce nombre est positif.

Ce modèle rhéologique a été choisi pour illustrer le guide d'introduction d'une nouvelle loi de comportement (notice de programmation) montrant surtout qu'il est possible dans le logiciel VIPLEF3D de tenir compte des comportements mixtes (élastoviscoplasticité avec plasticité instantanée).

D.4 Problème d'élasticité avec contraintes initiales

D.4.1 Retour à la loi de partition

La loi de partition de tout matériau à paramètres internes, qu'il soit élastique ou non, plastique ou non , visqueux ou non, isotrope ou non s'écrit :

$$\underline{\varepsilon} = \underline{H}^{-1}(\underline{\sigma} - \underline{\sigma}_0) + \underline{\varepsilon}^{th} + \underline{\varepsilon}^{no}$$

Lorsqu'une structure est constituée de tels matériaux, cette loi de partition est valable à tout instant t et en tout point \vec{x} de la configuration actuelle Ω en précisant cependant que :

- $\sigma(\vec{x}, t)$ est le tenseur des contraintes effectives à l'état actuel (instant t) au point \vec{x} .
- $\underline{\sigma}_0(\vec{x})$ est le tenseur des contraintes effectives initiales au point \vec{x} . Il s'agit d'une donnée caractérisant l'état de référence sachant que $\underline{\sigma}_0(\vec{x}) = \underline{\sigma}(\vec{x}_0, 0)$.
- $\underline{\varepsilon}(\vec{x},t)$ est le tenseur de la déformation logarithmique de Henky mesurée à partir de l'état de référence ($\underline{\varepsilon}(\vec{x}_0,t) = \underline{0}$) et reliée au vecteur de déplacement $\vec{u}(\vec{x},t) = \vec{x} \vec{x}_0$ par l'égalité : $\underline{\dot{\varepsilon}} = grad_s(\dot{\vec{u}})$.

Plus précisément, on décompose le tenseur gradient dans l'état actuel (par rapport à \vec{x}) du champ vectoriel des vitesses de déplacement $\dot{\vec{u}} = d\vec{u}/dt$ en une partie symétrique notée $\dot{\underline{\varepsilon}}$ (vitesse de déformation) et une partie antisymétrique $\underline{\omega}$ (vitesse de rotation) dont on a besoin pour la dérivée de Jaumann de $\underline{\sigma}$. La loi de partition est alors exprimée en termes de vitesses :

$$\dot{\underline{\varepsilon}} = \underbrace{H}_{\underline{\varepsilon}}^{-1} (\dot{\underline{\sigma}} - \underbrace{\omega}_{\underline{\varepsilon}} \sigma + \underbrace{\sigma}_{\underline{\varepsilon}} \omega) + \dot{\underline{\varepsilon}}^{th} + \dot{\underline{\varepsilon}}^{ne}.$$

- $\underline{\varepsilon}^{th}(\vec{x},t)$ est la partie de $\underline{\varepsilon}$ due à la dilatation thermique. Elle est reliée à la température $T(\vec{x},t)$ par une loi linéaire ou non linéaire mais dans tous les cas le champ $\underline{\varepsilon}^{th}$ est supposé connu à tout instant.
- $\underline{\varepsilon}^{ne}(\vec{x},t)$ est la partie non élastique des déformations sur lesquelles on dispose de lois d'évolution et d'écoulement caractérisant le matériau constitutif de la structure au point \vec{x} et à l'instant actuel t car dans le logiciel VIPLEF3D ce matériau peut subir des modifications : disparaitre (abattage des roches, creusement de trous ...) ou être remplacé (remblayage ...).
- $H(\vec{x},t)$ est le tenseur de Hooke d'ordre quatre d'élasticité du matériau au point \vec{x} et

à l'instant t.

D.4.2 Retour à la loi d'équilibre

L'équilibre d'une structure soumise à des forces extérieures et d'inertie est régi par les deux conditions;

$$\vec{div}(\underline{\sigma} - bp\underline{1}) + \vec{f} = \vec{0} \quad \text{dans } \Omega$$
$$(\underline{\sigma} - bp\underline{1})\vec{n} = \vec{G} \quad \text{sur } \partial\Omega$$

Les forces volumiques sont de la forme : $\vec{f} = \rho \vec{g} - \rho \vec{u}$ où ρ est la masse volumique, \vec{g} est une densité massique de forces connues et \vec{u} (dérivée seconde du déplacement par rapport au temps) est le vecteur accélération. En intégrant par rapport au temps par la méthode de Newmark, l'accélération est déduite de l'équation :

$$\vec{u} = \vec{u}_0 + h\dot{\vec{u}}_0 + (1/2)h^2[(1-\beta)\ddot{\vec{u}}_0 + \beta\ddot{\vec{u}}]$$

On pose alors :

$$\begin{split} a &= 2/\beta/h^2 \\ \vec{w} &= \vec{u}_0 + h \dot{\vec{u}}_0 + (1/2)h^2(1-\beta) \ddot{\vec{u}}_0 \\ \vec{f}_0 &= \rho(\vec{g} + a \vec{w}) \\ \vec{f} &= -a\rho \vec{u} + \vec{f}_0 \end{split}$$

Ainsi la force volumique \vec{f} à la fin de chaque pas d'intégration h est la somme d'un vecteur connu \vec{f}_0 (car il utilise la force à distance fournie ainsi que l'état au début du pas) et d'une force de rappel proportionnelle au déplacement inconnu (ce terme donnera lieu à la matrice de masse au moment de la discrétisation par la Méthode des Eléments Finis).

Par ailleurs le produit bp de l'éventuel coefficient de Biot du matériau par l'éventuelle pression interstitielle p est un champ scalaire dont l'historique est supposé connu au même titre que les forces extérieures (totales) volumiques \vec{f}_0 dans Ω et surfaciques \vec{G} sur la frontière $\partial\Omega$ de la configuration actuelle.

D.4.3 Combinaison des deux lois

La loi de partition peut s'écrire sous la forme inverse :

$$\underbrace{ \underline{\sigma} }_{\underline{z}} = \underbrace{ \underline{\sigma} }_{\underline{z}0} + \underbrace{ \underline{H} }_{\underline{z}} \left(\underbrace{ \underline{\varepsilon} }_{\underline{z}} - \underbrace{ \underline{\varepsilon} }^{th} - \underbrace{ \underline{\varepsilon} }^{ne} \right)$$

Le tenseur de contrainte totale $\underline{\sigma} - bp\underline{1}$ devient :

$$\underline{\sigma} - bp\underline{1} = \underline{\sigma}^{I} + \underline{H} \underbrace{\varepsilon}_{\underline{a}}$$

$$\underline{\sigma}^{I} = \underline{\sigma}_{0} - bp\underline{1} - \underline{H} (\underline{\varepsilon}^{th} + \underline{\varepsilon}^{ne})$$

En remplaçant dans les équations du mouvement, il vient :

$$\vec{div}(\underline{\sigma}^{I} + \underbrace{H}_{\underline{\varepsilon}}\underline{\varepsilon}) + \vec{f} = \vec{0} \quad \text{dans } \Omega$$
$$(\underline{\sigma}^{I} + \underbrace{H}_{\underline{\varepsilon}}\underline{\varepsilon})\vec{n} = \vec{G} \quad \text{sur } \partial\Omega$$

On a ainsi affaire à un problème d'élasticité linéaire avec une pseudocontrainte initiale $\underline{\sigma}^{I}$ qui regroupe trois termes connus (la contrainte effective initiale $\underline{\sigma}_{0}$, le terme $-bp_{1}^{1}$ dû à la pression interstitielle et le terme $-\underbrace{H}_{\underline{\varepsilon}}^{th}$ associé aux dilatations thermiques) et un terme inconnu $-\underbrace{H}_{\underline{\varepsilon}}^{ne}$.

Chaque fois que l'historique du champ des déformations non élastiques $\underline{\varepsilon}^{ne}$ est connu, on peut alors (par résolution de ce problème d'élasticité) déterminer les historiques des champs de déplacement \vec{u} , de déformation $\underline{\varepsilon}$ et de contrainte effective $\underline{\sigma}$.

Il est vrai que pour un tel problème on ne dispose de solution analytique que dans de très rares cas surtout en transformations finies. Mais cela n'empêche pas d'écrire formellement que chacune des trois grandeurs \vec{u} , $\underline{\varepsilon}$ et $\underline{\sigma}$ est une fonction connue de $\underline{\varepsilon}^{ne}$

$$\vec{u} = E_u(\underline{\underline{\varepsilon}}^{ne})$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = E_{\varepsilon}(\underline{\underline{\varepsilon}}^{ne})$$

$$\underline{\underline{\sigma}} = E_{\sigma}(\underline{\underline{\varepsilon}}^{ne})$$

Dans ces trois égalités \vec{u} , $\underline{\varepsilon}$, $\underline{\sigma}$ et $\underline{\varepsilon}^{ne}$ sont des historiques (fonctions du temps) de champs (fonctions de l'espace) et non les valeurs particulières en un instant t donné et pour une particule \vec{x}_0 fixée. Les trois fonctions (on dit aussi fonctionnelles) E_u , E_{ε} et E_{σ} sont donc à comprendre comme suit :

Pour connaitre \vec{u} , $\underline{\varepsilon}$ et $\underline{\sigma}$ à tout instant t et en tout point \vec{x} , on résout le problème d'élasticité ci-dessus (problème éventuellement dynamique) en utilisant toutes les données du problème (en particulier l'historique des forces extérieures) ainsi que l'historique du champ $\underline{\varepsilon}^{ne}$.

Pour un tel problème on dispose d'une méthode numérique qui a fait ses preuves lorsque la transformation est infinitésimale (Méthode des Eléments Finis). Mais dans le cas d'une transformation finie le problème devient non linéaire (malgré la linéarité de la loi d'élasticité) et un algorithme adéquat s'impose (problème des transformations finies).

Une fois installé le processus de résolution d'un problème d'élasticité linéaire avec contrainte initiale pour toute transformation on pourra aborder les non linéarités matérielles dues à la viscosité (problème de Cauchy) et à la plasticité (problème de point fixe).

E FEM analysis of coupled THM processes

TIJANI, S-M., VOUILLE, G., *FEM analysis of coupled THM processes in fractured media with explicit representation of joints*, 'Coupled Thermo-Hydro-Mechanical Processes of Fractured Media', STEPHANSSON, O., JING, L., TSANG, C-F., p 165-180, DECOVALEX project, ELSEVIER (1996).

Abstract

The well-known governing equations for thermo-hydro-mechanical processes in continua and joints are presented with emphasis on the difference between fundamental laws (balance equations) and empirical relationships (constitutive laws). The assumptions commonly used to simplify the balance equations are described underlining the neglected terms.

The classical variational formulation of THM processes requires some additional terms to take into account the rock joints. The hydraulic and mechanical added terms are detailed. The use of Finite Element Method to solve THM problems with explicit representation of joints is examined.

Coupled THM processes are usually analyzed using "fully coupled" numerical techniques which often need restrictive assumptions on the governing equations. To avoid such a restriction an iterative algorithm is proposed. This algorithm does not depend neither on the theoretical equations to be solved nor on the numerical method chosen.

E.1 Introduction

The increasing importance of modeling in the analysis of coupled Thermo-Hydro-Mechanical processes in geomechanics has induced a lot of work and publications dealing with various methods. They differ not only on the numerical techniques used, but also on the theoretical formulations of the physical problem. When the industrial applications are taken into account, the main criterion to choose a numerical procedure must be the computational rigor in solving the mathematical formulation with as less restriction as possible. More precisely, one must not be obliged to simplify the theoretical formulation only for reasons of efficiency of the numerical methods. As far as the mathematical formulation is concerned, it is well-known that the governing equations can be put into two families :

A) Balance Laws : there is a general consensus on these laws in their original forms, but they are often simplified with some application-specific hypothesizes.

- mass balance : this concerns the balance of fluid mass flow throughout the skeleton of the porous continuum and inside the rock joints. In geomechanics the classical simplification is to assume that the fluid mass density has small variations in space so that the continuity equation is equivalent to the fluid volume balance law.
- momentum balance : generally the inertia forces are neglected (static approach) and, in the equations governing the fluid motion, one assumes that the mechanical actions of the skeleton are reduced to body forces depending upon the intrinsic permeability of the porous medium (or the rock joint aperture) and upon the fluid viscosity (Darcy's law).
- energy balance : the common way to reduce the first law of thermodynamics is to neglect all kinds of energy except the thermal one. In this case the thermal problem can be solved independently but we must keep in mind that this simplification is not valid when there is either high fluid velocity or finite deformation of the porous medium or non negligible energy dissipation.

B) Constitutive Laws : all these state laws are restricted only by the Clausius-Duheim inequality (second law of thermodynamics). The weakness of such a restriction is the reason why, sometimes, several laws are proposed to describe the same physical phenomenon. The only valid way to choose the appropriate law is to compare its predictions to actual results in situations where all other physical laws and properties are known.

In any case (with or without simplifications), establishing governing equations must be the task of geomechanics experts who might be allowed to impose any desired assumptions on all the governing equations as well as on the values of the attached parameters. The numerical methods are only tools used to help these experts. This idea will be the major guide for this short presentation of finite element method analysis of coupled thermo-hydromechanical processes in fractured media with explicit representation of joints.

E.2 Governing equations of THM processes for continua

E.2.1 Problem unknowns

The unknowns are time dependent fields defined on a domain Ω (current configuration) occupied at time t by the skeleton of the saturated porous medium. The principal unknowns are the temperature T (the same for solid and fluid phases), the pore pressure P and the deformation vector \vec{u} . The related secondary unknowns (Figure 1) are the heat flux vector $\vec{\Psi}$, the fluid volume flux vector \vec{q} and the total Cauchy's stress tensor $\tilde{\sigma}$. Other internal time dependent fields may have to be determined when required by the constitutive law of the skeleton : non-elastic strain tensor $\tilde{\varepsilon}^p$, hardening variables ξ ... In the initial configuration (t = 0) the fields T, P, $\tilde{\sigma}$ and the internal variables are necessarily assumed to be known.



 $\vec{\Psi}.\vec{n}dS$: thermal energy rate which leaves Ω $\vec{q}.\vec{n}dS$: fluid volume rate which leaves Ω $\tilde{\sigma}\vec{n}dS$: total force vector acting on Ω

Figure 1. : Secondary unknown fields

E.2.2 Balance laws

A) Mass balance

Let V be a small volume of the skeleton. At each time t, the fluid and solid masses in V are respectively $\phi \rho_f V$ (because the porous medium is saturated) and $(1 - \phi)\rho_s V$ where ρ_f and ρ_s are the mass densities of fluid and solid and ϕ is the connected porosity. Since the porous medium deformation is analyzed in a convected co-ordinate system attached to the deformed skeleton (current configuration) the solid mass is constant and the fluid mass rate is $-div(\rho_f \vec{q})V$ where differential operator $div = \vec{\nabla}$ uses the position vector \vec{x} at time t. On the other hand, the volume rate \dot{V} is related to the volumetric strain rate of the skeleton $\dot{\varepsilon} = div(\dot{u})$ since $\dot{V}/V = \dot{\varepsilon}$. The fluid and solid volumetric strain rates are $\dot{\varepsilon}_f = -\dot{\rho}_f/\rho_f$ and $\dot{\varepsilon}_s = -\dot{\rho}_s/\rho_s$, respectively. Then the fluid and solid mass continuity laws can be written :

$$div(\rho_f \vec{q})/\rho_f + \phi \dot{\varepsilon} - \phi \dot{\varepsilon}_f + \dot{\phi} = 0 \tag{1}$$

$$(1-\phi)\dot{\varepsilon} - (1-\phi)\dot{\varepsilon}_s - \dot{\phi} = 0$$
⁽²⁾

Eliminating the porosity rate by adding the two equations, we obtain :

$$div(\rho_f \vec{q})/\rho_f + \dot{\varepsilon} - \phi \dot{\varepsilon}_f - (1 - \phi) \dot{\varepsilon}_s = 0$$
(3)

Since $div(\rho_f \vec{q})/\rho_f = div(\vec{q}) + \vec{q} \cdot \vec{grad}(\rho_f)/\rho_f$, if we assume that either the fluid volume flux \vec{q} or the gradient $\vec{grad}(\rho_f)$ of the fluid mass density is negligible, the fluid mass balance law may be simplified into :

$$div(\vec{q}) + \dot{\varepsilon} - \phi \dot{\varepsilon}_f - (1 - \phi) \dot{\varepsilon}_s = 0 \tag{4}$$

B) Momentum balance

The equilibrium of any part of the saturated porous medium is satisfied if and only if the total Cauchy's stress tensor $\tilde{\sigma}$ is symmetric and :

$$div\tilde{\sigma} + \rho \vec{g} = \text{inertia forces}$$
 (5)

$$\rho = \phi \rho_f + (1 - \phi) \rho_s \tag{6}$$

where ρ is the satured porous medium density and \vec{g} is the gravity forces mass density [1].

The Cauchy's stress tensor in the fluid is $-P\tilde{1} + \tilde{\zeta}$ where P is the pore pressure, $\tilde{1}$ is the unit tensor and $\tilde{\zeta}$ is the "dynamic" stress tensor which is due to the relative motion of the viscous fluid [2]. The equilibrium of any part of the fluid phase is then governed by the following equation (8) where the volumetric force $div\tilde{\zeta}$ is the action of the skeleton due to the fluid relative motion. This volumetric force is often assumed to be a function of \vec{q} using the dynamic fluid viscosity η_f and the intrinsic permeability tensor $\tilde{\kappa}$ (equation 9).

$$d\vec{i}v\tilde{\zeta} - g\vec{r}ad(P) + \rho_f \vec{g} = \text{inertia forces}$$
 (7)

$$d\vec{i}v\tilde{\zeta} = -\eta_f \tilde{\kappa}^{-1} \vec{q} \tag{8}$$

In a static approach (when inertia forces are neglected) the assumption concerning the viscous forces implies the simplified momentum balance law :

$$\vec{q} = -(1/\eta_f)\tilde{\kappa}(grad(P) - \rho_f \vec{g}) \tag{9}$$

When $\vec{grad}(\rho_f)$ is neglected we obtain the classical Darcy's law $\vec{q} = -\tilde{k}\vec{grad}(H)$ where $H = (P/\rho_f/g - \vec{g}.\vec{x}/g)$ is the hydraulic head and $\tilde{k} = (\rho_f g/\eta_f)\tilde{\kappa}$ is the permeability tensor which depends on the properties of both the skeleton and the fluid.

C) Energy balance

Let $C = \phi \rho_f c_f + (1 - \phi) \rho_s c_s$ where c_f and c_s are the fluid and solid specific heat capacities. Then the energy balance law can be written [2]:

$$div(\vec{\Psi}) + C\dot{T} = \dots \tag{10}$$

The right hand side of equation (10) represents several terms generally neglected such as :

- dissipative energies due to the viscosity of the fluid and the irreversible energy dissipation in the skeleton.
- the energies associated with thermal expansion (coupled thermo-mechanical phenomena)
- the transported energy due to the fluid flow.

E.2.3 Constitutive laws

A) Fluid state law

The thermodynamic state of the fluid is described by the couple (P, T) so that ρ_f , η_f and c_f are functions of P and T [2]. For instance, if we introduce the compressibility modulus β_f of the fluid and its linear thermal expansion coefficient α_f (both are functions of P and T), we obtain :

$$\dot{\varepsilon}_f = -\beta_f \dot{P} + 3\alpha_f \dot{T} \tag{11}$$

B) Solid state law

It is more difficult to describe the deformation of the solid. Following Terzaghi and Biot's works some authors ([3],[4]) proposed sophisticated thermodynamic interpretations, others used simple micro-models to explain the macroscopic constitutive laws. Nevertheless, in any case, it is only a matter of assumptions and the unique way to establish the validity of the suggested governing equations is to verify that they account for the actual observations and measurements.

In all these assumptions, the main difficulty is due to the fact that if we consider an elementary volume V of the satured porous medium during a drained $(\dot{P} = 0)$ and isothermal $(\dot{T} = 0)$ deformation, we have no theoretical possibility to know how to relate the variation of V to the variations of its two parts : the pore volume $V_{\phi} = \phi V$ and the solid volume $V_s = (1 - \phi)V$. The Terzaghi's theory assumes that the solid (grains) is rigid. So $dV_s = 0$ and $dV_{\phi} = dV$. In Biot's approach the last equation is generalized in such a way as the ratio $b = dV_{\phi}/dV$ can range from 0 to 1. The latter value of this Biot's coefficient corresponds to the particular case of Terzaghi's theory. Since $dV_s = (1 - b)dV$, $\dot{\varepsilon}_s = \dot{V}_s/V_s$ and $\dot{\varepsilon} = \dot{V}/V$, we obtain $\dot{\varepsilon}_s = [(1 - b)/(1 - \phi)]\dot{\varepsilon}$. But this last equation, valid only in isotropic drained and isothermal conditions, has to be generalized. Let $\dot{\varepsilon}$ be the symmetric part of the gradient of the velocity vector \vec{u} which is called the strain rate tensor. Its trace is $\dot{\varepsilon} = \tilde{1}.\dot{\tilde{\varepsilon}}$ because $tr(\dot{\tilde{\varepsilon}}) = div(\dot{u})$ and $\tilde{1}$ is the unit Kronecker's tensor. To avoid the restriction corresponding to the isotropy the coefficient b is replaced by a symmetric tensor $\tilde{B} : \dot{\varepsilon}_s = [(\tilde{1} - \tilde{B})/(1 - \phi)]\dot{\varepsilon}$.

deformation the common way is to assume that this equation concerns only the mechanical parts of the solid and the skeleton deformations which are respectively $\dot{\varepsilon}_s - 3\alpha_s \dot{T} + \beta_s \dot{P}$ and $\dot{\tilde{\varepsilon}} - \dot{T}\tilde{\alpha}$ where α_s is the linear thermal expansion coefficient of the solid, β_s is its compressibility modulus and $\tilde{\alpha}$ is the symmetric tensor of the linear thermal expansion coefficients of the skeleton. The generalized relationship is then :

$$(1-\phi)\dot{\varepsilon_s} - \dot{\varepsilon} = [3(1-\phi)\alpha_s - (\tilde{1}-\tilde{B}).\tilde{\alpha}]\dot{T} - (1-\phi)\beta_s\dot{P} - \tilde{B}.\dot{\tilde{\varepsilon}}$$
(12)

Substituting equations (11) and (12) into equation (4) we obtain the expression :

$$div(\vec{q}) = 3\alpha_m \dot{T} - \dot{P}/M - \tilde{B}.\dot{\tilde{\varepsilon}}$$
⁽¹³⁾

where $\alpha_m = \phi \alpha_f + (1 - \phi) \alpha_s - (1/3) (\tilde{1} - \tilde{B}) \tilde{\alpha}$ is the linear differential expansion coefficient and $M = [\phi \beta_f + (1 - \phi) \beta_s]^{-1}$ is the Biot's modulus.

C) Skeleton constitutive law

From equation (13), the mechanical energy rate per unit skeleton volume which is $\tilde{\sigma}.\dot{\tilde{\varepsilon}} - Pdiv(\vec{q})$ can be written $\tilde{\sigma}_{eff}.\dot{\tilde{\varepsilon}} - P(3\alpha_m\dot{T} - \dot{P}/M)$ where $\tilde{\sigma}_{eff} = \tilde{\sigma} + P\tilde{B}$ is the effective symmetric Cauchy's stress tensor ([5],[6],[7]). The behavior of the skeleton is then governed by constitutive laws using only T and $\tilde{\sigma}_{eff}$. For instance, the strain rate tensor can be the sum of three parts :

- an elastic part related to the Jauman's rate of the effective stress using Hooke's elasticity tensor $\tilde{\tilde{H}}$ which may depend on the temperature T.
- a non-elastic part $\dot{\tilde{\varepsilon}}^p$ governed by plastic and viscoplastic laws using the temperature T, the effective stress tensor $\tilde{\sigma}_{eff}$ and all internal variables $\tilde{\varepsilon}^p$ and ξ .
- a thermal part $T\tilde{\alpha}$ where thermal expansion coefficients tensor $\tilde{\alpha}$ may depend on the temperature T.

E.3 Governing equations of THM processes for joints

E.3.1 The geometry of a joint

A) Discontinuities

In three-dimensional problems the joint is a surface Σ where the deformation vector \vec{u} has two values (discontinuity) one for each of the two parts of the skeleton Ω separated by the surface. Let \vec{n} be the unit vector normal to the surface Σ at a point \vec{x} . The variables attached to such a point will be superscripted by a + when the material point \vec{x} belongs to the region Ω^+ pointed to by the vector \vec{n} . Otherwise, the superscript – will be used. For instance the displacement discontinuity vector $\sharp \vec{u} \ddagger = \vec{u}^+ - \vec{u}^-$ represents the relative movement of Ω^+ referred to the part Ω^- . The normal component $u_n = \sharp \vec{u} \ddagger . \vec{n}$ is the variation of the mechanical aperture of the joint which is e_m^0 at time 0 and $e_m = e_m^0 + u_n$ at time t. The hydraulic aperture is often assumed to have the same variation but with a different initial value : $e_h = e_h^0 + u_n$. The last equation can be generalized using a coefficient f which ranges from 0 to 1 : $e_h = e_h^0 + fu_n$. The initial apertures e_m^0 and e_h^0 may of course vary in space (on Σ) but they are known (given data). Across the surface Σ , the temperature T, the pore pressure P, the scalar thermal flux $\vec{\Psi}.\vec{n}$ and the total stress vector $\vec{\sigma}\vec{n}$ are continuous (We shall see further what are the reasons for the continuity of $\vec{\Psi}.\vec{n}$ and $\vec{\sigma}\vec{n}$). The normal

component of the last vector is $\sigma_n = \tilde{\sigma} \vec{n} \cdot \vec{n}$ which is the total normal stress of the joint. The total tangential stress is the vector $\vec{\sigma}_t = \tilde{\sigma} \vec{n} - \sigma_n \vec{n}$ the norm of which is the shear stress.

B) Tangential gradients

Let f be a function of \vec{x} in Ω and let $\vec{grad}_{\Sigma}(f)$ denotes the tangential part of the vector $\vec{grad}(f)$. The new differential operator $\vec{grad}_{\Sigma}(.) = \vec{grad}(.) - [\vec{n}.\vec{grad}(.)]\vec{n}$ has the same mathematical properties as $\vec{grad}(.)$. Let \vec{Q} be a vector function of \vec{x} on Σ which is everywhere tangent to Σ (i.e. $\vec{Q}.\vec{n} = 0$ at all points on Σ). Let us construct a volume Ω_{Σ} surrounding the surface Σ with a small uniform thickness 2a:

$$\Omega_{\Sigma} = \{ \vec{X} = \vec{x} + \zeta \ a\vec{n} \ ; \ \vec{x} \in \Sigma \ ; \ \zeta \in [-1, +1] \ ; \ \vec{n} \text{ normal to } \Sigma \text{ at point } \vec{x} \}$$
(14)

We can then extend the Σ -field \vec{Q} to all the volume $\Omega_{\Sigma} : \vec{Q}^*(\vec{X}) = \vec{Q}(x)$. The scalar field $div(\vec{Q}^*)$ is well defined at every point \vec{X} in Ω_{Σ} and we can put as a definition : $div_{\Sigma}(\vec{Q}) = div(\vec{Q}^*)$ for all points on Σ . It can easily be proved that the new operator has similar properties as the classical one. For instance : $div_{\Sigma}(f\vec{Q}) = fdiv_{\Sigma}(\vec{Q}) + grad_{\Sigma}(f).\vec{Q}$

E.3.2 Joint unknowns

The unknowns attached to a joint are time dependent fields defined on Σ in the current configuration of the skeleton [8]. All joint governing laws will be established as equations valid at each point of the surface Σ . Since the temperature T, the pore pressure P, the scalar thermal flux $\vec{\Psi}.\vec{n}$ and the total stress vector $\tilde{\sigma}\vec{n}$ are continuous, the only unknowns related to a joint are the discontinuity $\#\vec{u}\#$ of the skeleton deformation vector \vec{u} and the fluid volume flow vector \vec{Q} inside the joint, the exact definition of which is that the average absolute fluid velocity is $\vec{Q}/e_h + (1/2)(\dot{\vec{u}}^+ + \dot{\vec{u}}^-)$. That is to say that the average (in the thickness of the joint) of the relative fluid velocity is \vec{Q}/e_h , referred to the mean position of the skeleton which has two parts moving independently.

E.3.3 Balance laws

A) Mass balance

Since there is no solid phase inside the joint, the only continuity equation is related to fluid mass balance law where we must take into account the fluid flow in the surrounding porous continuum. The derived equation is similar to equation (3) and it can be simplified in the same way :

$$div_{\Sigma}(\rho_f \vec{Q})/\rho_f + \dot{e}_h - e_h \dot{\varepsilon}_f + \sharp \vec{q} \sharp \vec{n} = 0$$
(15)

After simplification neglecting $g \vec{rad}_{\Sigma}(\rho_f) \cdot \vec{Q}/\rho_f$ we obtain :

$$div_{\Sigma}(\vec{Q}) + \dot{e}_h - e_h \dot{\varepsilon}_f + \sharp \vec{q} \sharp \vec{n} = 0$$

$$\tag{16}$$

B) Momentum balance

When all the fluid body forces inside a joint are neglected (gravity as well as inertia forces), the only global momentum balance law we obtain is the continuity of the total

stress vector $\tilde{\sigma}\vec{n}$. But we must complete this law assuming a governing equation similar to the Darcy's law. The usual proposed equation is : $\vec{Q} = -\tilde{k}_J gr\vec{a}d_{\Sigma}(H)$ where the joint permeability tensor \tilde{k}_J depends upon the fluid properties as well as upon the hydraulic joint aperture. Usually the joint permeability tensor is assumed to be isotropic ($\tilde{k}_J = k_J \tilde{1}$) and k_J obeys the well-known cubic law [9] : $k_J = (\rho_f g/12/\eta_f) e_h^3$.

C) Energy balance

If all kinds of energy inside the joint are neglected the energy balance law is reduced to the continuity of $\vec{\Psi}.\vec{n}$.

E.3.4 Constitutive laws

Since the fluid state law is the same as for the porous continuum (equation 11) and since there is no solid phase inside the joint, we only need to define the joint constitutive law governing its mechanical behavior. Moreover the only question we have to answer concerns the joint effective stress vector which is generally assumed to be $\vec{\sigma}_{eff} = \tilde{\sigma}\vec{n} + b_J P\vec{n}$ where b_J is the joint Biot's coefficient. The general joint constitutive laws are based on a sharing of the displacement discontinuity $\sharp \vec{u} \ddagger$ into two parts ([10], [11], [12], [13], [14], [15]). The first part depends linearly (elasticity) on the effective stress variation (normal and tangential stiffnesses are used). The second part is defined in such a way as to account for the actual normal law (hyperbolic equation for the closure and no tension material for the opening) and for the irreversible sliding behavior with possible dilatancy phenomenon.

E.4 Time integration

E.4.1 Finite deformation

There are two kinds of difficulties due to the finite deformation of the geometry of a porous medium. The first kind is related to the large displacement which induces the fact that the current unknown position \vec{x} cannot be replaced in balance equations (equation 5 for instance) by the given initial position. The second kind of difficulties concerns the constitutive laws where the stress rate must be taken in Jauman's sense and where all the material tensors (Hooke's tensor \tilde{H} , Biot's tensor $\tilde{B} \dots$) must be updated upon the rotation of the co-ordinate system attached to the deformed skeleton ([1], [16]).

The finite deformations can be approached numerically using a step by step method called "Updated Lagrangian Method". In such a technique, the actual deformation is divided into infinitesimal deformations at the start of which all the problem variables are known. When a small step is done, the geometry is updated $(\vec{x} = \vec{x} + \delta \vec{u})$, the obtained stress $\tilde{\sigma}_{eff}$ is corrected using the last rotation tensor in order to become the initial stress $\tilde{\sigma}_{eff}^I$ for the next step and all material tensors are updated in the rotated co-ordinate system. During each step, the classical constitutive law can be used : $\tilde{\sigma}_{eff} = \tilde{\sigma}_{eff}^I + \tilde{H}(\delta \varepsilon - \delta \varepsilon^P - \delta T \tilde{\alpha})$ where $\delta \varepsilon$, the Green's strain tensor, is the symmetric part of the gradient of the small deformation $\delta \vec{u}$ knowing that all space differentiations use the current known position \vec{x} at the beginning of the step.

When this simple algorithm is used together with the Finite Element Method, only the node co-ordinates are modified (the connectivity matrix is unchanged). But at some level of deformation the mesh needs, some times, to be updated (adaptive griding) not only to

avoid distorted elements but also to take into account the large change on the geometry of the joint elements.

E.4.2 Skeleton constitutive law

For each small deformation, the rheological laws for the skeleton and the joints are integrated by a step by step method in the case of viscoplasticity and by an iterative process for elastoplastic materials [17]. In both cases, within each step (or iteration), a simple linear elastic problem has to be solved (Initial Stress Method).

E.4.3 Transient phenomena

The thermal energy balance law can be integrated in time by an implicit Euler method. Let T^{I} be a known temperature at time t (start of a step) and let T be the unknown temperature at time t + h where h is the time step. The equation (10) becomes :

$$div(\vec{\Psi}) + (C/h)T = (C/h)T^{I}$$
(17)

The transient problem is then transformed into a steady-state problem. This technique is applied also to the hydraulic problem : in equation (13) \dot{P} is replaced by $(P - P^I)/h$.

E.5 Space integration

E.5.1 Separated variational formulations

After all the time integrations we obtain three classical problems (linear elasticity, steadystate heat conduction and steady-state fluid diffusion) where the principal unknowns are fields (V = T or H or δu) defined on a known domain Ω and have to satisfy some differential equations (local formulation). These equations can be integrated using any numerical method such as Finite Difference Method, or Finite Volume Method, or Boundary Element Method

The use of the Finite Element Method to solve such a problem is easier when the local formulation is transformed into a variational one. The unknown field V must then satisfy some boundary conditions (prescribed values of V on $\partial\Omega$) and an equality $\varpi(V, V^*) = 0$ for any virtual field V^* . The theorem of virtual works in continuum mechanics is the most common example of this kind of formulation. The sign of the function ϖ is chosen in such a way as, in the linearized formulation, $\varpi(V, V^*)$ is the sum of a linear function of V^* and a bilinear function of V and V^* which is symmetric and positive. This convention is needed below (added terms).

Since this procedure is well known in the case of continua, we shall restrict this section to the terms which must be added to the functions ϖ in order to take into account the joints [18]. The theoretical background on which the determination of all added terms is based uses the fact that each function ϖ is the sum of integrals on all continuous parts (Ω^+ and Ω^-) of the whole domain Ω . Using the mathematical properties of the operator div, some of these integrals are transformed into integrals on the boundaries $\partial \Omega^+$ and $\partial \Omega^-$ which have a common part Σ (joint surface).

A) Hydraulic problem

There is no added term in the thermal function $\varpi(T, T^*)$ where the virtual temperature field T^* is continuous in the whole domain Ω .

The virtual hydraulic head field H^* is continuous too, but the hydraulic function $\varpi(H, H^*)$ must be modified using equation (16). The term to add is then :

$$\int_{\Sigma} -\vec{Q}.gr\vec{a}d_{\Sigma}(H^{*})dS + \int_{\Sigma} (\dot{e}_{h} - e_{h}\dot{e}_{f})H^{*}dS + \int_{\partial\Sigma} \vec{Q}.\vec{m}H^{*}dl$$

The unit vector \vec{m} is tangent to the surface Σ and normal to its boundary $\partial \Sigma$ which is a line. The term $\vec{Q}.\vec{m}dl$ is the fluid volume rate which leaves the joint Σ from its boundary $\partial \Sigma$ per unit length. This term is of course known. It is a part of the given data (boundary conditions). Let us now use Darcy's law of the joint and equation (11) after time integration. The added term becomes :

$$\int_{\Sigma} [\tilde{k}_J g r \vec{a} d_{\Sigma}(H) \cdot g r \vec{a} d_{\Sigma}(H^*) + (e_h \beta_f \rho_f g/h) H H^*] dS + \int_{\Sigma} [\dot{e}_h - 3e_h \alpha_f \dot{T} - (e_h \beta_f \rho_f g/h) H^I] H^* dS + \int_{\partial \Sigma} \vec{Q} \cdot \vec{m} H^* dl$$

At the start of each time step the hydraulic head H^{I} is known. So, when the mechanical (variable e_{h} : hydraulic aperture) and the thermal (variable T: temperature) problems are solved, the factor of H^{*} in the second integral is then known.

B) Mechanical problem

Since the displacement vector is discontinuous throughout the joint surface Σ , the virtual field $\delta \vec{u}^*$ has a discontinuity $\sharp \vec{u}^* \sharp$ which operates on the added term to the mechanical function ϖ . This added term is the work of stresses acting on the joint :

$$\int_{\Sigma} \tilde{\sigma} \vec{n}. \sharp \vec{u^*} \sharp dS$$

E.5.2 Coupled variational formulation

The exact coupled variational formulation consists of adding together the three functions ϖ to obtain a function Π associated to the coupled thermo-hydro-mechanical process ([3], [16], [19], [20], [21]). The result is that the unknown complex field $W = (T, H, \delta u)$ must satisfy some boundary conditions and the equality $\Pi(W, W^*) = 0$ for any virtual field $W^* = (T^*, H^*, \delta \vec{u^*})$. When a numerical technique is based on the coupled variational formulation, the central part of the algorithm consists in a linear algebraic system as usual. But this system is not symmetric due to the fact, for instance, that the temperature T is present in the hydraulic function ϖ while the hydraulic head H does not operate in the thermal function ϖ . Some authors oblige the system to be symmetric by using a weak form of the coupled variational formulation; this is done exactly in the same way as for solving elastoplastic problem by the Tangent Stiffness Matrix Method in the case of non-associated material (i.e. for which the yield and the potential functions differ) [22]. To correct the effect of this forced symmetrization an iterative process is then used. The use of the coupled variational formulation has another undesirable effect : the increase of the size of the linear system due to the growth of the number of the degrees of freedom (DOF). We shall describe in the last section another iterative method that we have developed on the occasion of the DECOVALEX project and which avoids all these difficulties.
E.5.3 Finite element method and joints

In some numerical codes the joints are modeled by conventional volumetric elements with given thicknesses. The material associated to such a kind of element has, of course, particular constitutive laws to represent the actual behavior of the physical joint. But, the most common approach is to use a surface joint element [18] in which each node, for a mechanical problem, has 6 DOF (deformation vectors : \vec{u}^- and \vec{u}^+). In some codes such a 6 DOF node is replaced by a couple of 3 DOF nodes (n^-, n^+) where n^- is connected to the associated node in Ω^- and n^+ is connected to the associated node in Ω^+ .

In all cases, the realization of the mesh is the most difficult operation when using Finite Element Method to model fractured continua. It is well known that the three-dimensional automatic meshing needs sophisticated computer routines, even when there is no joint surface, the presence of which increases considerably this sophistication. We give a brief description of the principles of some usual helpful tools used in griding codes :

- The ideal solution would be an automatic meshing code for continua which is able to represent the geometry of all given surfaces (not only the boundary $\partial\Omega$ but also the internal surfaces Σ corresponding to the joints).
- When this ideal meshing code does not exist, the total mesh generating operation may be done in two steps. First all surfaces (boundary and joints) are meshed. The second step needs a tool able to mesh continuous parts of the whole domain Ω with prescribed surface mesh of its external boundary. The last problem is often impossible to solve and needs an iterative process between the two steps.
- If the user has no ideal tool he can use a poor technique which works in a step by step process. First, a mesh is realized for the whole continuum Ω. Then, a surface joint Σ is introduced to cut some of the volumetric elements of the mesh. Each of these elements is locally refined to take into account the surface Σ without destroying the consistency of the surrounding three-dimensional mesh. The new mesh is modified in the same way by introducing a new surface joint Σ if any. This simple technique requires some precaution because a surface can cut an element into two parts, one of which has too small a volume. In such a case some nodes need to be moved but their new positions must be in accordance with prescribed geometrical data.

E.6 Iterative method for THM processes

E.6.1 Reformulation of the problem

Let \mathbf{T} be a complex unknown including all time dependent thermal unknown fields. To be more explicit let us say that \mathbf{T} is the time dependent temperature field which can be replaced, when Finite Element Method is used, by the discrete set of all nodal temperatures at given times chosen close together. In the same way the hydraulic \mathbf{H} and mechanical \mathbf{M} unknowns are defined. Suppose now that \mathbf{H} and \mathbf{M} are known, solving the thermal problem (energy balance, even without any simplification and regardless the chosen method) is to determine \mathbf{T} as a function of \mathbf{H} and \mathbf{M} using given data. Let Ψ_T be such a function which is fully known for each given actual problem even when it cannot be defined explicitly. The solution of a thermal problem (derived either from its local formulation or from its own variational formulation regardless of the coupled phenomena) can then be defined by the following equality :

$$\underline{\mathbf{T}} = \Psi_T(\underline{\mathbf{H}}, \underline{\mathbf{M}}) \tag{18}$$

Of course, when the simplified energy balance law is used, the thermal function Ψ_T does not depend on the hydraulic variable \mathbf{H} and it depends on the mechanical variable \mathbf{M} only in the case of finite deformation. But all these particular cases are fully included in the general equation (18). Similar general equalities can be defined concerning the hydraulic (function Ψ_H) and mechanical (function Ψ_M) problems, respectively :

$$\mathbf{\underline{H}} = \Psi_H(\mathbf{\underline{M}}, \mathbf{\underline{T}}) \tag{19}$$

$$\underline{\mathbf{M}} = \Psi_M(\underline{\mathbf{T}}, \underline{\mathbf{H}}) \tag{20}$$

The functions Ψ_T , Ψ_H and Ψ_M can be constructed using any analytical approach (closed form) or numerical method. The proposed iterative algorithm described in the following section has only two restrictions :

- Since the methods used for solving each of the three problems (T, H and M) can differ, the representations of the three complex unknowns must be homogeneous.

- The chosen method for each problem (equations 18, 19 and 20) has to be able to produce the left hand side of the equation for any given "values" of the arguments of the associated function.

Thanks to the weakness of these restrictions the functions Ψ_T , Ψ_H and Ψ_M do not need to be explicitly constructed.

E.6.2 Proposed iterative algorithm

A) Algorithm

- 1. Initialization : starting "values" of $\underline{\mathbf{H}}$ and $\underline{\mathbf{M}}$ are chosen. Generally, the hydraulic head is chosen constant in time and equal to the given initial field and the skeleton is assumed to remain undeformed (no variation of the initial given geometry). These starting "values" are put in current "values" stack.
- 2. Thermal problem : solve the thermal problem using all given data and the current known "values" of $\underline{\mathbf{H}}$ and $\underline{\mathbf{M}}$. Determine the difference between the calculated "values" of $\underline{\mathbf{T}}$ and the previous current "values". This difference D_T is a scalar using any chosen norm. The calculated "values" of $\underline{\mathbf{T}}$ are put in current "values" stack.
- 3. **Hydraulic problem :** solve the hydraulic problem using all given data and the current known "values" of $\underline{\mathbf{M}}$ and $\underline{\mathbf{T}}$. Determine the difference between the calculated "values" of $\underline{\mathbf{H}}$ and the previous current "values". This difference D_H is a scalar using any chosen norm. The calculated "values" of $\underline{\mathbf{H}}$ are put in current "values" stack.
- 4. Mechanical problem : solve the mechanical problem using all given data and the current known "values" of \mathbf{T} and \mathbf{H} . Determine the difference between the calculated "values" of \mathbf{H} and the previous current "values". This difference D_M is a scalar using any chosen norm. The calculated "values" of \mathbf{M} are put in current "values" stack.
- 5. Convergence : as long as the iteration number is less then a given maximum value and as long as D_T , or D_H or D_M is yet higher than some given levels of accuracy, continue the iterative process restarting from the thermal problem (step 2 above).

B) Advantages of the method

All the advantages of the method are due to its simplicity.

- Easy to install : the method can use three separate codes (T, H and M) and an external process to perform the loop (T -> H -> M -> T ...). For instance the codes T, H and M may be binary FEM executable and the external process is a simple UNIX script shell or a command file under DOS as Operating System ...

- General purpose : the algorithm does not need any simplification neither in the formulation of each of the three problems nor in the governing equations for coupled THM processes.

- Validity : if the THM problem is consistent (i.e. it has a solution) and if the iterative process converges then the obtained solution is a good solution of the THM problem. The mathematical proof of this assertion is based only on the "continuity" of the three functions Ψ_T , Ψ_H and Ψ_M in the sense of a chosen norm in the space of the complex variable ($\mathbf{T}, \mathbf{H}, \mathbf{M}$).

- Convergence : the technique belongs to a wide family of classical iterative methods used to solve the well known problem [find a, a=f(a), f is a given function]. The iterative process which consists in constructing a series (a_n) using the recurrent relationship : $a_n = f(a_{n-1})$ is widely used to solve algebraic systems. It can be proved easily that if the function f has a LIPSCHITZ's constant less than 1, then the problem is consistent and the iterative process is convergent.

C) Weakness of the method

For the time being this simple algorithm has been validated only experimentally (heuristic approach). A few cases more or less sophisticated, for which the exact solutions were known ([23],[24]), have been treated with this numerical technique which appears to be efficient and quite fast (even in the case of non-linear materials the external iterative loop needed a maximum of 10 iterations to converge towards the exact solution with a high level of precision).

We believe that one of the main reasons of the efficiency of the proposed numerical technique lies in the fact that at each step of the process and for each time considered, we can easily derive a good approximation of the rates of all the variables which operate in the governing equations.

However, a lot of research work has yet to be done in order to construct a rigorous theoretical background to proof the absolute convergence of the proposed iterative method. The study of the mathematical properties of the THM problems may show that the LIPSCHITZ's condition is always satisfied.

Perhaps also such a work will allow either to establish some necessary conditions to the convergence of the technique or to propose some modifications of the process to ensure this convergence.

E.7 Acknowledgments

The authors are grateful to the Institut de Protection et de Sureté Nucléaire of the Commissariat à l'Energie Atomique who has supported their participation to the DECOVALEX Project and has enabled them to carry out the research work which was needed to develop and validate the iterative method of analysis of coupled THM processes.

E.8 References

- 1. C. Truesdell, Introduction à la Mécanique Rationnelle des Milieux Continus, Masson et Cie, Paris (1974).
- 2. F. Fer, Thermodynamique Macroscopique, Gordon and Breach, Paris (1971).
- 3. O. Coussy, Mécanique des Milieux Poreux, Editions Technip, Paris (1991).
- P. Charlez (ed.), Mechanics of Porous Media, A.A. Balkema, Rotterdam, Brookfield (1995).
- L.W. Morland, Simple Constitutive Theory for Fluid-saturated Porous Solid, J. Geophys. Res., 77 (1972) 890.
- S.K. Gard and A. Nur, Effective Stress Law for Fluid-saturated Porous Rocks, J. Geophys. Res., 78(26) (1973).
- R.M. Bowen, Compressible Porous Media Models by use of Theory of Mixtures, Int. J. Eng. Sci., 20(6) (1982) 697.
- 8. N. Barton, S. Bandis and K. Bakhtar, Strength, Deformation and Conductivity Coupling of Rock Joints, Int. J. Rock Mech. & Min. Sci., 22(3) (1985) 121.
- P. Witherspoon, J. Wang, K. Iwai and J. Gale, Validity of Cubic Law for Fluid in a Deformable Rock Fracture, Wat. Resour. Res., 16(6) (1980) 1016.
- S. Bandis, A. Lumsden and N. Barton, Fundamentals of Rock Joint Deformation, Int. J. Rock Mech. & Min. Sci., 20 (1983) 249.
- 11. H. Benjelloun, Etude Expérimentale et Modélisation du Comportement Hydromécanique des Joints Rocheux, Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier, Grenoble (1991).
- 12. A. Bougnoux, Modélisation Thermo-Hydro-Mécanique des Massifs Fracturés a Moyenne ou Grande Echelle, Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris (1995).
- 13. R. Goodman, Methods of Geological Engineering in Discontinuous Rocks Ch. 5 : Mechanical Properties of Discontinuities, West Pub. Company, San Francisco (1976).
- 14. W. Leichnitz, Mechanical Properties of Rock Joints, Int. J. Rock Mech. & Min. Sci., 22(3) (1985) 313.
- M. Plesha, Constitutive Models for Rock Discontinuities with Dilatancy and Surface Degradation, Int. J. Num. & An. Meth. in Geomech., 11 (1987) 345.
- S.H. Advani, T.S. Lee, J.K. Lee and C.S. Kim, Hygrothermomechanical Evaluation of Porous Media Under Finite Deformation, Int. J. Num. Meth. Eng., 36(1) (1993) 147.
- 17. S-M. Tijani, Résolution numérique des problèmes d'élastoviscoplasticité Application aux cavités de stockage de gaz en couches salines profondes, Thèse de Docteur-Ingénieur. P. & M. Curie. Paris VI (1978).

- G. Beer, an Isoparametric Joint/Interface Element for Finite Element Analysis, Int. J. Num. Meth. Eng., 21(4) (1985) 585.
- P.M. Cleary, Fundamentals Solutions for a Fluid-saturated Porous Solid, Int. J. Solids Structures, 13 (1977) 785.
- O.C. Zienkiewicz and T. Shiomi, Dynamic Behaviour of Saturated Porous Media The Generalized BIOT Formulation and its Numerical Solution, Int. J. Num. & An. Meth. in Geomech., 8 (1984) 71.
- R.S. Sandhur and S.J. Hong, Dynamics of Fluid-saturated Soils Variational Formulation, Int. J. Num. & An. Meth. in Geomech., 11 (1987) 241.
- H.R. Thomas and S.D. King, A Non-linear, Two-dimensional, Potential-based Analysis of Coupled Heat and Mass Transfer in Porous Medium, Int. J. Num. Meth. Eng., 37(21) (1994) 3707.
- 23. B. Amadei and T. Illangasekare, Analytical Solutions for Steady and Transient Flow in Non-homogeneous Rock Joints, Int. J. Rock Mech. & Min. Sci.,29(6) (1992) 561.
- 24. J. Booker and C. Savvidou, Consolidation Around a Point Heat Source, Int. J. Num. & An. Meth. in Geomech., 9 (1985) 173.

F Continuum modelling of dynamic behaviour

ROUABHI, A., TIJANI, M., MOSER, P., GOETZ, D., Continuum modelling of dynamic behaviour and fragmentation of quasi-brittle materials, application to rock fragmentation by blasting, Int. J. for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, Vol 29, Iss 7, p 729-749, (2005).

SUMMARY

Fragmentation plays an important role in a wide variety of industrial process such as blasting, demolition, crushing, cutting, etc., in which one desires to cause fragmentation in the most efficient and controlled manner. Nevertheless, a consistent theoretical description of this process is not yet available. In this paper, we present a computational methodology to simulate both the behaviour and the fragmentation of quasi-brittle materials, such as rocks and concrete, under dynamic loadings. We consider that the fragmentation process is a natural extension of the fracture process. In order to describe the dynamic fracture process, a suitable phenomenological constitutive model is developed and implemented in a finite element code. Concerning the dynamic fragmentation, a general formulation of predicting the fragment size distribution is provided. This formulation is based on a post-processing analysis of the history of the material's thermodynamic state. The complete approach is then applied to the modelling of the fragmentation of chamber blasting tests of limestone cylindrical samples.

KEYWORDS : quasi-brittle materials; dynamic behaviour; dynamic fragmentation; internal variables method; anisotropic damage; viscoplasticity; blasting

F.1 Introduction

A fragment is produced by the intersection of a number of cracks, each crack forming surfaces on two adjacent fragments. Therefore, the fragmentation can be viewed as the natural extension of the fracture process. The most successful approach dealing with fracture is the fracture mechanics which has been extremely successful in cases where the behaviour of a single, large crack in brittle material is of prime interest. However, the response of a system of cracks under stress-wave loading is less well understood. For such cases, considerable efforts have been directed toward developing continuum (see, e.g., Grady and Keep [1], Preece et al. [2]), discontinuum (see, e.g., Potyondy and Cundall [3], Donzé et al. [4]) and continuum-discontinuum (Munjiza et al. [5]) descriptions of fracture, fragmentation, and wave propagation to evaluate complex fracturing events. Others workers have preferred to apply a micro-statistical fracture mechanics approach (Curran *et al.* [6]) to the problem of dynamic failure and fragmentation of solids. Until now, as far as the authors know, the most appropriate approach has not been identified. Currently, there are a variety of numerical models dealing with fracture and fragmentation which are far from achieving the ultimate goal to get reliable and accurate prediction of the fragment size distribution from the set of geometry parameters, material properties (dynamic and static), initial conditions and boundary conditions. It is outside the scope of this paper to describe all the models available in the literature.

It seems reasonable to say that dynamic fragmentation is the result of a coupled problem involving the initiation and the propagation of cracks in a previously intact material and the formation of isolated fragments. Thus, aspects of both continuum and discontinuum with transition from continuum to discontinuum, are present. Unfortunately, from a continuum mechanics point of view, it is not possible to take into account the explicit formation of discrete fragments. On the other hand, dynamic fracture mechanics is also unable to treat, at the same time, a great number of cracks. In order to overcome these limitations, in our approach, we assume that we can separate the fracture from the formation of discrete fragments (Rouabhi [7]). To describe the dynamic failure, a continuum phenomenological model, consistent with thermodynamics, is developed. When the fracture process is complete, the history of the thermodynamic state is post-processed and used in a fragmentation model to produce fragment size distribution.

This approach will be used to predict the particle size distributions of laboratory blasting tests. These tests concern the fragmentation of cylindrical limestone samples which are blasted with a constant diameter PETN charge. The blasted material was collected and in some cases a rebuilding attempt was done.



FIG. 1 – Rebuilt cylindrical and cubical samples

Figure 1 shows typical results of such rebuilding obtained from the blasting of a cylindrical and a cubical sample. Both figures show a radial fractured region and a material missing zone which indicates that, near the blasthole, the fracture process is so intense that any rebuilding attempt was failed. It is widely accepted that this zone is the result of compressive shear loadings. In this study, the response of the structure was our main interest. At present, the proposed model cannot handle the interaction between solid and fluid (detonation gases) problems. Then, the blast loading is taken into account by using a defined pressure-time history on the borehole wall.

To reproduce the macroscopic behaviour of quasi-brittle materials including load-induced anisotropy due to cracking as shown in Figure 1, the internal variables method based on continuum thermodynamics is used (Rouabhi [7]). A scalar internal variable is introduced to model, at the macroscopic level, the strain softening under compressive loadings. Under tensile loadings, a second-order symmetric tensor is used to describe the essential features of the induced anisotropic damage. Under complex loadings, these two models are coupled and the crack closing-reopening effect is also treated.

Concerning the dynamic fragmentation, a general formulation of predicting the fragment size distribution is provided (Rouabhi [7]). In this formulation, a mean fragment size is linked to a mechanical quantity, which is assumed to be the origin of the fragmentation process, by an intrinsic function, referred to us as the *fragmentation law*, which can be identified by using suitable laboratory fragmentation tests. The mechanical quantity is given by the

resolution of the Initial Boundary-Value Problem where the developed constitutive model is considered.

The remainder of this paper is organized in the following way. In section H.2 we give the basic formulation of the dynamic fragmentation problem. In section H.3 we present the form of the fragmentation law. Section H.4 presents a short description of the developed constitutive model. Section H.5 deals with the Explosive-Material interaction and presents the method adopted to identify the boundary condition in terms of a pressure-time history. Finally, the complete approach is applied to the modelling of the fragmentation of chamber blasting tests of three types of cylindrical limestone samples.

F.2 Basic formulation of the dynamic fragmentation problem

Let us consider a body Ω which, under abrupt or impulsive loading, will be broken into several fragments. We assume that all points in the body are accessible to fracture, which means that the fragmentation will be regarded as continuous. Under this assumption, the cumulative mass of fragments having a size less than or equal to s is assumed to be given by

$$M(s) = \int_{\Omega} \Phi\left(s, \ s_m(\vec{x}), \ \alpha(\vec{x})\right) dm \tag{1}$$

where

 $-s_m$: mean or average fragment size at a given position $\vec{x} \in \Omega$;

- $-\alpha$: shape factor at a given position $\overrightarrow{x} \in \Omega$;
- $-\Phi$: specific cumulative mass;
- -dm : elementary mass.

The specific cumulative mass varies as a function of position within the fragmented body because of spacial variations of the stresses causing fragmentation. In this study, Φ is assumed to be the well known two parameter Weibull distribution function :

$$\Phi(s, s_m, \alpha) = 1 - \exp\left[-\ln(2)\left(\frac{s}{s_m}\right)^{\alpha}\right]$$
(2)

here s_m is the mean fragment size corresponding to $\Phi(s_m, s_m, \alpha) = 1/2$. In what follows, only the mean fragment size will vary within the body : the shape factor is assumed to be constant.

The relative cumulative passing in % of mass having a size less than or equal to s is

$$PA(s) = 100 \times \frac{M(s)}{\int_{\Omega} dm}$$
(3)

Now, our key feature to deal with the dynamic fragmentation under complex loadings is to assume that we can characterize the fragmentation event by the prediction of the mean fragment size s_m which can be related, at the *local level*, to a mechanical quantity G (strain rate, strain energy, ...). This relationship can be written formally as

$$s_m(\overrightarrow{x}) = \psi(G(\overrightarrow{x})) \quad \text{in } \Omega$$

$$\tag{4}$$

 ψ is an *intrinsic* (only material dependent) scalar positive function which can be identified by considering special fragmentation tests. Concerning the mechanical quantity, it should be calculated by the resolution of the Initial Boundary-Value Problem. Furthermore, we introduce

a critical mechanical quantity G_d to distinguish between dynamic and static fragmentation. In fact, at very low rates of loading, most materials resist to fracture until a critical stress is reached. This is the static failure regime, in which fragmentation is dominated by the growth of a single weakest flaw. The dynamic regime is entered when growth of this flaw cannot relieve the applied loading, stresses rise in the adjacent material, and new flaws begin to nucleate and grow. This transition between static and dynamic regime is evidently not easy to be detected. However, in our model, the critical mechanical quantity can be related to the transition strain rate determined for many materials by using techniques at high strain rates such as the Split Hopkinson Pressure Bar Technique. With this consideration, Equation (1) becomes

 $M(s) = \int_{\Omega^{\star}} \phi\left(s, \ s_m(\overrightarrow{x}), \ \alpha\right) \rho(\overrightarrow{x}) d\Omega^{\star}$ (5)

where Ω^{\star} is defined as

$$\Omega^{\star} = \{ \overrightarrow{x} \in \Omega / G(\overrightarrow{x}) \ge G_d \}$$
(6)

Equation (5) may also be rewritten as

$$M(s) = \int_{\Omega} \mathscr{H}(G(\overrightarrow{x}) - G_d) \phi(s, \ s_m(\overrightarrow{x}), \ \alpha) \rho(\overrightarrow{x}) d\Omega$$
(7)

where \mathscr{H} is the Heaviside function and ρ is the material density.

F.3 Fragmentation law

In the present approach we assume that the mechanical quantity G is the strain energy density (strain energy per unit volume). In what follows we shall be concerned with the form of the fragmentation law. Let us consider a body Ω of volume V which is subjected to an homogeneous loading. Let $[0, T] \subset \mathbb{R}_+$ be the time interval of interest. We assume that Ω will be fragmented into equal particles of size s_m . The state of deformation of the body can be described by the energy dissipated during the deformation process which can be expressed as

$$G(\overrightarrow{x}) = \int_0^T \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \, d\tau, \quad \forall \overrightarrow{x} \in \Omega$$
(8)

Here, a dot denotes the rate with respect to time. $\underline{\sigma}$ and $\underline{\dot{\varepsilon}}$ are respectively the stress and the strain rate tensors. Therefore, the total strain energy in the domain Ω is

$$W = \int_{\Omega} G(\vec{x}) dV \tag{9}$$

Since the deformation state within the body is homogeneous, Equation 9 becomes

$$W = G V \tag{10}$$

In accordance with the theory originally advanced by Griffth (1920), we suppose that the total energy is used to create new surfaces, thus

$$W = G V = A \gamma \tag{11}$$

where A and γ are respectively the total new created surface and the surface energy density which is a material parameter. On the other hand, we have

$$\frac{V}{A} = \frac{v}{a} \tag{12}$$

where v and a are respectively the volume and the surface of one fragment. For spherical fragments we have $6V = As_m$. Since the particle's shape is more complex than the spherical one, we suppose the following expression

$$\frac{V}{A} = c \, s_m^{\frac{1}{n}}, \quad n > 0, \quad c > 0 \tag{13}$$

Finally, combining Equation (11) and (13), the fragmentation law which relate the mean fragment size to the strain energy density G can be expressed as

$$s_m(\overrightarrow{x}) = \kappa \ G(\overrightarrow{x})^{-n} \tag{14}$$

where κ and n are material parameters which can be identified by using appropriate fragmentation tests.

F.4 Constitutive modelling

Notation: throughout this section, the number of underlines beneath a symbol indicates the tensorial order of that variable. Superscript ^t indicates the transpose operation, while "Tr" is the trace operator. Symbol ': ' denote the inner product with double contraction, e.g. $\underline{\sigma} : \underline{\varepsilon} = \sigma_{ij}\varepsilon_{ji}$, $(\underline{\underline{H}} : \varepsilon)_{ij} = \underline{H}_{ijkl}\varepsilon_{lk}$ where the index denote cartesian components and repeated subscript imply summation unless otherwise indicated. Symbol '. ' denote the outer product with single contraction, e.g. $(\underline{\sigma} : \underline{\varepsilon})_{ij} = \sigma_{ik}\varepsilon_{kj}$. The dyadic or tensor product is indicated with ' \otimes ', e.g. $(\underline{\sigma} \otimes \underline{\varepsilon})_{ijkl} = \sigma_{ij}\varepsilon_{kl}$, whereas ' $\underline{\otimes}$ ' denotes the symmetrized dyadic product defined as $\underline{A} \ \underline{\otimes} \ \underline{B} : \underline{C} = \underline{A} \cdot \underline{C}^s \cdot \underline{B}$, for any arbitrary second-order tensors \underline{A} , $\underline{B}, \underline{C}$, where $\underline{C}^s = (\underline{C} + \underline{C}^t)/2$ is the symmetric part of \underline{C} . \underline{I} is the second-order identity tensors.

It is not a trivial task to derive proper material law for quasi-brittle materials in the 3dimensional stress state and which can be used in the hole range of loadings (from quasistatic to dynamic). Materials such as concrete and rocks undergo elastic, plastic and viscous behaviour, they are anisotropic, brittle in tension as well as in shear and ductile under high pressure. In recent years there has been a tremendous effort aimed at developing accurate models that predict the response of such materials under various loading conditions. Most of them are of the phenomenological type. The aim of a phenomenological model is to reproduce mathematically the macroscopic stress-strain relations for different loading conditions, neglecting the microscopic mechanism of the behaviour. The plasticity/ viscoplasticity and the damage approaches falls into this category.

In order to estimate stress wave induced fracturing, a coupled elasto-viscoplastic and rate dependent damage model has been developed. Within the regime of load application, an isotropic elasticity tensor is used to govern the elastic material behaviour. A pressure dependent elasto-viscoplastic model is used for compressive regime. A second order tensor measure of damage is used to represent the anisotropic degradation of the elasticity tensor under tensile regime. Only the isothermal case will be considered.

F.4.1 Rate-dependent plasticity theory applied to modelling quasi-brittle materials behaviour under Compressive loading

The material behaviour is assumed to be isotropic during the entire deformation history. We assume that the softening behaviour of quasi-brittle materials is a purely material property. Isotropic softening will be considered and it will be controlled by the change of the uniaxial compressive strength. Furthermore, we assume the additive decomposition of the total strain tensor $\underline{\underline{\varepsilon}}$ into elastic and viscoplastic parts, respectively denoted by $\underline{\underline{\varepsilon}}^e$ and $\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}$:

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}^e + \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp} \tag{15}$$

For linearized elasticity, the stress tensor $\underline{\sigma}$ can be written as

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\underline{H}}} : \left(\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}\right) \tag{16}$$

where $\underline{\underline{H}}$ is the elasticity tensor which, in the case of isotropic behaviour, is given by

$$\underline{\underline{H}} = \lambda \underline{\underline{I}} \otimes \underline{\underline{I}} + 2\mu \underline{\underline{I}} \overline{\underline{\otimes}} \underline{\underline{I}}$$
(17)

where λ and μ are the Lamé elastic parameters. In classical plasticity/viscoplasticity, $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vp}$ always denotes a vector parallel to the normal of a smooth scalar potential function $Q = Q(\underline{\sigma})$

$$\underline{\dot{\varepsilon}}^{vp} = \dot{\gamma}\underline{\underline{m}}\left(\underline{\underline{\sigma}}\right) = \dot{\gamma}\frac{\partial Q}{\partial\underline{\underline{\sigma}}}\left(\underline{\underline{\sigma}}\right) \tag{18}$$

The parameter $\dot{\gamma} \ge 0$ is the plastic multiplier. For the establishment of this evolution law, the only restriction that must be fulfilled is the dissipation inequality given by the Clausius-Duhem inequality which, in this case, can be reduced to

$$\underline{\sigma}: \underline{m} \ge 0 \tag{19}$$

In this study, the Drucker-Prager potential function is selected

$$Q(\underline{\underline{\sigma}}) = \frac{\beta + 2}{\sqrt{6}} \|\underline{\underline{s}}\| + \frac{\beta - 1}{3} \operatorname{Tr}(\underline{\underline{\sigma}})$$
(20)

where $\underline{\underline{s}}$ is the deviatoric stress tensor and $\beta \geq 1$ is a material parameter. For the plastic multiplier, it will be assumed to be expressed as

$$\dot{\gamma}(\underline{\underline{\sigma}}, \xi) = v_c \left[1 - \exp\left(-\left\langle \frac{\mathbf{F}(\underline{\underline{\sigma}}, \xi)}{R_c(\xi)} \right\rangle^{n_c} \right) \right]$$
(21)

where $\langle x \rangle = \max(x, 0), \xi$ is a scalar variable characterizing the isotropic softening viscoplasticity and $\mathbf{F}(\underline{\sigma}, \xi)$ is the Mohr-Coulomb yield function given by the following expression

$$\mathbf{F}(\underline{\sigma}, \xi) = K\sigma_1 - \sigma_3 - R(\xi) \quad \text{for } \sigma_1 \ge \sigma_2 \ge \sigma_3 \tag{22}$$

 $K \geq 1$, v_c and n_c are material parameters. σ_1 , σ_2 and σ_3 are the principal stresses. v_c represents the maximum viscoplastic rate. This parameter is introduced to agree with the concept of the ultimate fracture velocity (Freund [9], Nikolaevskiy [10]). R_c is the uniaxial compressive strength which is assumed to be a decreasing function of ξ .

It is noteworthy that the Claussius-Duhem dissipation inequality (19) is satisfied if the following condition is fulfilled :

$$\beta \ge 2 \times \frac{1+\bar{K}}{2-\bar{K}} \quad \text{with} \quad \bar{K} = \frac{K-1}{\sqrt{K^2+K+1}} \tag{23}$$

For the isotropic softening, it will be controlled by the change of the uniaxial compressive strength, thereby translating the failure surface along the hydrostatic axis (away from the tensile region) to finally arrive at a residual state. The reduction of the compressive strength is assumed to be given by the following relationship

$$R(\xi) = R_c \left[\alpha + (1 - \alpha) \exp\left(-\omega_c \xi^2\right) \right], \quad \alpha \in [0, 1], \quad \omega_c \ge 0$$
(24)

where R_c , α and ω_c are material parameters. Finally, $\dot{\xi}$ is defined as follows

$$\dot{\xi} = \frac{||\underline{\dot{\varepsilon}}^{vp}||}{\sqrt{1 + \beta^2/2}} \tag{25}$$

F.4.2 Damage theory applied to modelling quasi-brittle materials behaviour under tensile loading

When we deal with tensile loading, the formation of cracks induces a directional bias to the material structure as can be seen in Figure 1. In fact, tensile loading in one direction leaves the tensile capacity intact in the transverse direction, the evolution of the corresponding yield surface in the stress space by an isotropic softening rule is questionable. To overcome this difficulty, several approaches have been investigated. Among them, one can find the use of the damage theory with a higher order damage tensor. The second-order symmetric damage tensors are the most commonly employed because they are mathematically simpler and yet can describe most essential features of anisotropic damage. Though this second-order damage tensor cannot describe more complicated damage state than orthotropy, it has been often employed in the development of anisotropic damage theories (Cordebois and Sidoroff [11], Murakami and Kamiya [12], Halm and Dragon [13], Carol et al [14], to cite only a few). In what follows, we will use the following damage tensor

$$\underline{\underline{\Theta}} = \sum_{i=1}^{3} \Theta_i \, \overrightarrow{n}_i \otimes \, \overrightarrow{n}_i \tag{26}$$

where Θ_i and \overrightarrow{n}_i are respectively the principal values and the unit vectors of principal directions of the tensor $\underline{\Theta}$.

The relation between effective stress $\underline{\tilde{\sigma}}$ and effective strain $\underline{\tilde{\varepsilon}}$ describes the constitutive behaviour of the undamaged material, which for the sake of simplicity, is assumed to be linear elastic and isotropic

$$\underline{\underline{\tilde{\sigma}}} = \underline{\underline{H}}_{\underline{0}} : \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}} = 2\mu \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}} + \lambda \mathrm{Tr}(\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}})$$
(27)

where $\underline{\underline{H}}_{0}$ is the Hook isotropic elasticity tensor of the undamaged material. The relation between nominal stress $\underline{\underline{\sigma}}$ and nominal strain $\underline{\underline{\varepsilon}}$ describes the constitutive behaviour of the damaged material

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\underline{H}}} \left(\underline{\underline{\Theta}}\right) : \underline{\underline{\varepsilon}}$$
(28)

where $\underline{\underline{H}}$ is the Hook elasticity tensor for the damaged material. The nominal stress tensor $\underline{\underline{\sigma}}$ was related to the effective stress tensor $\underline{\underline{\sigma}}$ by considering the linear transformation given by Cordebois and Sidoroff [11]

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\Theta}}^{-\frac{1}{2}} \cdot \underline{\underline{\tilde{\sigma}}} \cdot \underline{\underline{\Theta}}^{-\frac{1}{2}}$$
(29)

In order to find the relation between nominal strain tensor and effective strain tensor, the energy equivalence concept was used and the following equation was obtained

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\Theta}}^{\frac{1}{2}} \cdot \underline{\underline{\widetilde{\varepsilon}}} \cdot \underline{\underline{\Theta}}^{\frac{1}{2}} \tag{30}$$

Combining Equations (29) and (30) with Equation (27), Equation (28) becomes

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\mu \underline{\underline{\Theta}}^{-1} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}} \cdot \underline{\underline{\Theta}}^{-1} + \lambda(\underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\Theta}}^{-1}) \underline{\underline{\Theta}}^{-1}$$
(31)

Note that, Equation (31) together with Equation (28) lead to the following expression of the stiffness tensor :

$$\underline{\underline{H}}\left(\underline{\underline{\Theta}}\right) = \lambda \underline{\underline{\Theta}}^{-1} \otimes \underline{\underline{\Theta}}^{-1} + 2\mu \underline{\underline{\Theta}}^{-1} \ \overline{\underline{\otimes}} \ \underline{\underline{\Theta}}^{-1}$$
(32)

 $\underline{\Theta}$ is considered as an internal state variable which characterises the anisotropic phenomenon of microcrack distribution in the material. In order to establish a thermodynamically consistent evolution law of this internal variable, the only thermodynamic restriction to be fulfilled is the Claussius-Duhem dissipation inequality which, in this case, can be written as

$$\underline{\underline{w}}: \underline{\underline{\Theta}} \ge 0 \tag{33}$$

where $\underline{\underline{w}}$ is the thermodynamic conjugate force associated to the state variable $\underline{\underline{\Theta}}$ and which can be expressed as

$$\underline{\mathbf{w}} = \frac{1+\nu}{E} \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{\Theta}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} - \frac{\nu}{E} \left(\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\Theta}}\right) \underline{\underline{\sigma}}$$
(34)

This force has no clear physical meaning, which makes it difficult to propose and interpret damage rules (Chaboche [15]). This reason motivates Carol *et al.* [14] to suggest a new internal state variable $\underline{\underline{L}}$. This variable is a function of the history up to time t of the damage tensor $\underline{\Theta}$ and is given by the following differential equation

$$\underline{\underline{\dot{L}}} = 2 \ \underline{\underline{\Theta}}^{-\frac{1}{2}} \ . \ \underline{\underline{\Theta}}^{-\frac{1}{2}}, \quad \text{with} \quad \underline{\underline{\underline{L}}}(t=0) = \underline{\underline{0}}$$
(35)

Thus, the new thermodynamic conjugate force corresponding to $\underline{\underline{L}}$ can be simply expressed as

$$\underline{\underline{a}} = \frac{1}{2} \underline{\underline{\Theta}}^{\frac{1}{2}} \cdot \underline{\underline{w}} \cdot \underline{\underline{\Theta}}^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \underline{\underline{\tilde{\sigma}}} \cdot \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}$$
(36)

Note that, this conjugate force has the same principl axes as $\underline{\tilde{\sigma}}$ and $\underline{\tilde{\varepsilon}}$ and its first invariant is equal to the elastic stored energy

$$a_i = \frac{1}{2}\tilde{\sigma}_i \ \tilde{\varepsilon}_i \ (\text{no summation}), \ \ \text{Tr}(\underline{\underline{a}}) = \frac{1}{2}\underline{\underline{\tilde{\sigma}}} : \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}} = \frac{1}{2}\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}}$$
(37)

With these considerations, inequality (33) becomes

$$\underline{\underline{w}}: \underline{\underline{\dot{\Theta}}} = \underline{\underline{a}}: \underline{\underline{\dot{L}}} \ge 0 \tag{38}$$

As given by Equation (36), $\underline{\underline{a}}$ does not distinguish between tension and compression, which is a fundamental aspect of quasi-brittle material's behaviour. In order to handle this restriction, Carol *et al.* [14] propose to redefine the conjugate force as follows

$$\underline{\underline{a}} = \frac{1}{2} \langle \; \underline{\underline{\tilde{\sigma}}} \; \rangle . \langle \; \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}} \; \rangle \tag{39}$$

It is clear from Equation 39 that the principal values a_k of $\underline{\underline{a}}$ are positive. Finally, with these considerations, we introduce the following damage evolution law

$$\underline{\dot{\mathbf{L}}} = \sum_{k=1}^{3} \dot{\gamma}_d(a_k) \, \tilde{\overrightarrow{n}}_k \otimes \, \tilde{\overrightarrow{n}}_k \tag{40}$$

where $\tilde{\vec{n}}_k$ are the principal directions of \underline{a} . For the plastic multiplier, we will use a similar definition of that used in the viscoplastic compression model

$$\dot{\gamma}_d(a_k) = v_d \left[1 - \exp\left(-\left\langle \frac{a_k}{R_d} - 1 \right\rangle^{n_d} \right) \right]$$
(41)

where v_d , R_d and n_d are material parameters. v_d represents the maximum damage rate associated with the material microcracking.

Using evolution law given by Equation (40), and noting that $x\dot{\gamma}_d(x) \ge 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^+$, we can prove easily that inequality (38) is satisfied :

$$\underline{\underline{a}} : \underline{\underline{\dot{L}}} = \sum_{k=1}^{3} a_k \widetilde{\overrightarrow{n}}_k \otimes \widetilde{\overrightarrow{n}}_k : \sum_{k=1}^{3} \dot{\lambda}_d(a_k) \widetilde{\overrightarrow{n}}_k \otimes \widetilde{\overrightarrow{n}}_k = \sum_{k=1}^{3} a_k \dot{\lambda}_d(a_k) \ge 0$$
(42)

F.4.3 Coupled response of the elasto-viscoplastic and the rate dependent damage models

In this section, we try to link the independent models developed earlier. As the first step, we assume the additive decomposition of the total nominal strain tensor

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}^e + \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp} \tag{43}$$

On the other hand, the relation between effective stress $\underline{\tilde{\sigma}}$ and effective elastic strain $\underline{\tilde{\varepsilon}}^e$, which describes the constitutive behaviour of the undamaged material, is assumed to be expressed as

$$\underline{\underline{\tilde{\sigma}}} = \underline{\underline{H}}_{\underline{0}} : \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}^{e} = 2\mu \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}^{e} + \lambda \mathrm{Tr}(\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}^{e}) \underline{\underline{I}}$$

$$\tag{44}$$

The relation between nominal stress $\underline{\sigma}$ and nominal elastic strain $\underline{\varepsilon}^e$ describes the constitutive behaviour of the damaged material

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\underline{H}}} \left(\underline{\underline{\Theta}}\right) : \underline{\underline{\varepsilon}}^{e} \tag{45}$$

The effective stress tensor is related to the nominal stress tensor by Equation (29). The energy equivalence approach allows us to find the relationship between the effective elastic strain tensor and the nominal elastic strain tensor

$$\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}^{e} = \underline{\underline{\Theta}}^{-\frac{1}{2}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}^{e} \cdot \underline{\underline{\Theta}}^{-\frac{1}{2}} \tag{46}$$

Finally, the Claussius-Duhem dissipation inequality becomes, in this case

$$\underline{\underline{\sigma}}:\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vp} + \underline{\underline{a}}:\underline{\underline{\dot{L}}} \ge 0 \tag{47}$$

where \underline{a} can take the following new from

$$\underline{\underline{a}} = \frac{1}{2} \langle \; \underline{\underline{\tilde{\sigma}}} \; \rangle . \langle \; \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}^e \; \rangle \tag{48}$$

It is noteworthy that the last inequality is the sum of the viscoplastic dissipation and the damage dissipation. Thus, if we consider the evolution laws of $\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}$ and $\underline{\underline{L}}$ given respectively by Equation (18) and Equation (40), inequality (47) will be respected.

F.4.4 Stiffness recovery

The previous model presumes that damage is always active, i.e., damage continues to grow whether the microcracks are open or closed. However, it is obvious that damage is promoted mainly in the tensile stress regime, whereas compressive stresses tend to close the microcracks. This scenario motivates the introduction of a unilateral condition, i.e., the active/passive condition, due to the microcrack-closure-reopening effect.

A common approach in literature for discerning the different response in tension and compression is to extract the tensile stresses or strains by introducing projection operators (Ortiz [16]). In this study, we select a second-order projection operator defined as

$$\underline{\underline{P}} = \sum_{k=1}^{3} \mathscr{H}(\varepsilon_{k}^{e}) \overrightarrow{n}_{k} \otimes \overrightarrow{n}_{k}$$

$$\tag{49}$$

 ε_k^e are the principal values of the nominal elastic strain tensor and \overrightarrow{n}_k are its principal directions.

Using this projection operator, we define an active damage tensor as follows

$$\underline{\underline{\Theta}}^{ac} = \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{P}} \left[\underline{\underline{\Theta}} - \underline{\underline{I}} \right] \underline{\underline{P}}$$
(50)

After this definition, three basic properties of $\underline{\Theta}^{ac}$ can be mentioned

- 1. For undamaged state : $\underline{\underline{\Theta}}^{ac} = \underline{\underline{\Theta}} = \underline{\underline{I}}$ 2. For triaxial compression $(\underline{\underline{P}} = \underline{\underline{0}})$: $\underline{\underline{\Theta}}^{ac} = \underline{\underline{I}}$ 3. For triaxial tension $(\underline{\underline{P}} = \underline{\underline{I}})$: $\underline{\underline{\Theta}}^{ac} = \underline{\underline{\underline{O}}}$

F.4.5 Uniaxial computational results

The present model has been implemented in a transient dynamic finite element code VI-PLEF3D (Tijani [17]). In this numerical tool, the time derivative, arising in the local form of the momentum equations, is replaced by the well-known Newmark algorithm. Large strain computation was taken into account by decomposing the body motion into small steps and by updating not only the body's geometry but also the stress state. Given the complexity of the constitutive relations and their aim which is to model quasi-brittle materials in fast dynamics, we have chosen to implement an explicit scheme because time integration needs to be extremely fast in 3D transient dynamics where time increments are very small and where the number of degree of freedom is very high.

In order to demonstrate the capability of the model to reproduce the major characters of the macroscopic behaviour of quasi-brittle materials, uniaxial computational tests is considered. In this section values of material parameters have been selected for illustrative purposes only. Figure 2 illustrates the applied strain-time curve. The result of this loading is reported in Figure 3. As shown, damage controls the response under tension, while plasticity is active under compression. Under tension regime the material unloads at the degraded secant stiffness. Under compressive regime the elastic stiffness is recovered simulating the closing of microcracks. Once the compressive stress exceeds the yield stress, the material exhibits softening plastic response. Upon reversing the strain path, the stress follows the elastic response with the undamaged secant stiffness. When the loading cycle is back to tension, the degraded secant stiffness is recovered, simulating the re-opening of the microcracks. Note that all tests were carried out with a constant slow strain rate.





FIG. 2 – Applied strain for uniaxial tests

FIG. 3 – Model response for uniaxial tests

Figure 4 shows the response of the model under various strain rates. As it can be seen, the response is dependent upon the strain rate. In Figure 5 the Dynamic Increase Factor



FIG. 4 – Model response under several strain rates

FIG. 5 – Dynamic increase factor

(DIF), i.e., the ratio of the dynamic to static strength, is reported, in a semi-log plot, as function of strain rate. These results are in agreement with experiments commonly found in the literature [18-30].

F.5 Explosive-material interaction : boundary conditions

At present, the proposed model cannot handle the interaction between solid and fluid (detonation gases) problems. Then, the blast loading is taken into account by using a defined pressure-time history on the borehole wall. The key feature to handle the characteristics of the loading pulse was to assume that the mechanical energy transmitted by the explosive to the surrounding media cannot, in no case, exceed the chemical energy released by the detonation. This chemical energy can be estimated by considering the Chapman-Jouguet state. If we assume that the detonation gases can be described by the polytropic equation of state with a polytropic gas constant γ , then the specific chemical energy released by the detonation can be approximated by (Meyers [31])

$$e_0 = \frac{D^2}{2(\gamma^2 - 1)} \tag{51}$$

where D is the detonation velocity.

On the other hand, the mechanical energy used in the fragmentation process can be found

by using the first law of thermodynamics. Thus, if we neglect the thermal power supply, on can evaluate the mechanical energy used in the fragmentation process as follows

$$\mathbf{E}_m(t) = \int_0^t \left[\dot{\mathbf{E}}(\Omega) + \dot{\mathbf{K}}(\Omega) \right] d\tau = \int_0^t \mathbf{P}(\Omega) d\tau$$
(52)

where E and K are the internal and the kinetic energy, respectively, of the body Ω at the time t. Whereas P represent the mechanical power supply.

Furthermore, for detonation with high velocity, we can assume that the applied pressure acts uniformly along the borehole-axis. As a consequence, for n cylindrical charges with radius R_i and hight H_i (i = 1, 2, ..., n), Equation (52) becomes

$$\mathbf{E}_m(t) = \sum_{i=1}^n 2\pi \mathbf{R}_i \mathbf{H}_i \int_0^t p_i(\tau) \dot{u}_i(\tau) \left(1 + \frac{u_i(\tau)}{R_i}\right) d\tau$$
(53)

where u_i is the radial displacement of the borehole wall i and p_i is the pressure pulse applied on this wall.

In this study, the applied pressure pulse is assumed to be expressed as

$$p(t) = P_m \frac{e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}}{e^{-\lambda_1 T_m} - e^{-\lambda_2 T_m}}$$
(54)

where T_m is the rise time of the blast pulse which can be expressed as

$$T_m = \frac{\ln\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)}{\lambda_1 - \lambda_2} \tag{55}$$

 P_m denotes the peak value of p(t). By varying values of λ_1 and λ_2 , different shapes of blast loadings can be reproduced. Figure 6 illustrates a typical blast pulse obtained with $T_m = 0.005 \ ms$ and $\lambda_1 = 2/T_m$.

Figure 7 shows the evolution of the mechanical energy (52). This graph represents a typical



FIG. 6 – Pressure-time history form fonction

FIG. 7 – Evolution of the mechanical energy

result obtained from the simulation of a cylindrical rock sample with a diameter of 100 mm. As it can be seen, the energy tends asymptotically towards the chemical energy released by the detonation.

	E	ν	K	α	β	ω_c	R_c	v_c	n_c	R_d	v_d	n_d	ρ
	[GPa]						[MPa]	[m/s]		$[J/m^3]$	[m/s]		$[Kg/m^3]$
Lim.I	64	0.26	3	0.1	2	5000	120	1.50	1	451.25	900	1	2560
Lim.II	57	0.21	3	0.1	2	5000	65	1.45	1	95.53	1850	1	2680
Lim.III	35	0.20	3	0.1	2	5000	60	1.42	1	96.57	1450	1	2600

TAB. 1 – Material parameters

TAB. 2 – The peak value of the pressure-time history

	Lim.I	Lim.II	Lim.III
$P_m \ [MPa]$	2825	2800	2675

F.6 Numerical simulation of chamber blasting tests

The chamber blasting tests concern the fragmentation of three types of cylindrical limestone samples which were blasted with a constant 5 mm diameter PETN charge. The chamber in which the samples were blasted, allowed to collect close to 100% of the blasted material for analysis. The blasted material was screened and the fragmentation distributions were determined.

Parameters of the developed constitutive model were fitted to the specific type of material from a series of classical experiments. Table 1 gives these calibrated parameters for the three considered limestone types. Numerical results were done for samples with diameters varying from 100 mm to 300 mm. Numerical solutions were obtained by using uniform discretisations with 6 nodded quadrilateral elements. 300 and 100 elements were used for samples with diameter, respectively, 300 mm and 100 mm. The time step used for computations, which were done with large strain formulation, was $\Delta t = 10^{-6} ms$.

Concerning the boundary conditions, the peak stress P_m and the rising time were obtained as follows : we fix T_m and λ_1 equal respectively to 0.005 ms and to $2/T_m$ and we calibrate P_m . λ_1 is estimated by considering that the blast pulse will be strongly attenuated after 0.1 ms. The calibration consists of varying P_m until the mechanical energy transmitted to the rock tends asymptotically towards the chemical energy released by the detonation (Figure 7). Numerical calculations were done on samples with 100 mm in diameter. Table 2 gives the calibrated values for the considered limestones. Once the boundary condition and the rheological parameters are identified for a given material, one can make, for the same material, different simulations with different geometries. Obtained numerical results indicate that the only damage tensor component which was influenced by stress waves is the tangential one. Otherwise, slabbing regions are absent which is in good agreement with experimental observations.

To illustrate the fracture process, the isotropic softening variable ξ and the tangential component of the damage tensor Θ_{θ} are plotted against the radius, at different times, for a sample with 200 mm in diameter of the limestone type II. The isotropic softening variable plots shown in Figure 8, clearly demonstrate the propagation of a shear failure zone from the inner surface of the sample. From Figure 9, it is easy to pointed out that failure mechanisms due to tangential stress are activated not only from the inner surface but also from the



FIG. 8 – The isotropic softening variable as a function of radius



FIG. 9 – The tangential damage component as a function of radius

outside surface of the sample. In these regions rock is broken into sectors by radial cracks. These results are qualitatively in agreement with experimental observations made on rebuilt samples.

In our approach, the fragmentation is viewed as an extension of the fracture process. So, when the numerical calculations are complete, the history of the thermodynamic state is post-processed in order to calculate the mechanical quantity G introduced by Equation (4) and which is, in this case, the strain energy density given by Equation (8). Figure 10 shows,



FIG. 10 – Typical result for the strain energy density as a function of radius

in a log-log plot, typical results obtained from the numerical simulation of the fracture process for samples of limestone type III with different diameters. This graph represents the strain energy density as a function of radius.

Now, let us consider the fragmentation law. Once the mechanical quantity is calculated in each point of the fragmented body, we can find by curve fitting the intrinsic function ψ

	κ	G_c	n_1	n_2	α
	[mm]	$[MPa/m^3]$			
Lim.I	1.215	3.407	0.898	1.570	3
Lim.II	1.120	7.413	0.798	2.522	3
Lim.III	0.543	6.240	1.040	1.956	3

TAB. 3 – Parameters of the fragmentation laws

(Equation (4)). If we consider the fragmentation law advanced previously (Equation (14)), this mean that the fitting procedure will give us the numerical values of the material parameters κ and n. By using only these two parameters, we have pointed out that we can not handle the large range of the strain energy density. In order to overcome this limitation, we have introduced a critical strain energy density G_c and two regimes with different power factors

$$s_m(\overrightarrow{x}) = \psi(G(\overrightarrow{x})) = \begin{cases} \kappa \left(\frac{G(\overrightarrow{x})}{G_c}\right)^{-n_1} & \text{for } G(\overrightarrow{x}) \in [G_d, \ G_c[\\ \kappa \left(\frac{G(\overrightarrow{x})}{G_c}\right)^{-n_2} & \text{for } G(\overrightarrow{x}) \in [G_c, \ +\infty[\end{cases}$$
(56)

Calculated parameters for the considered rocks are given in table 3. We add to these parameters the shape factor α which was assumed to be constant and equal to 3. At this stage, it should be noted that these parameters are intrinsic to the considered materials. They do not change with the geometry and the loading conditions. Figure 11 shows the fragmentation



FIG. 11 – The fragmentation law for different limestone types

law for the different limestone types.

Finally, knowing the intrinsic function ψ , we calculate the mean fragment size and therefore the fragment size distribution of each sample by considering Equation (7). For the considered samples, we assume that the fragmentation process is always dynamic, so we do not need numerical values for the parameter G_d . Figures 12, 13 and 14 show numerical predictions which are compared to experimental data. These graphs represent the cumulative passing given by Equation (3) versus the fragment size. As it can be seen, calculations are in good agreement with experimental results. The quality of the predicted results show that the proposed model is a very promising approach to simulate the dynamic fragmentation of quasi-brittle materials. However, in order to be sure about its predictive power, in the future, further complex situations must be analysed.



FIG. 12 – Comparison of experimental distributions with calculated distributions



FIG. 13 – Comparison of experimental distributions with calculated distributions



FIG. 14 – Comparison of experimental distributions with calculated distributions

F.7 Conclusions and prospects

A formulation for describing and predicting the behaviour and the fragmentation of quasibrittle materials under high dynamic loadings has been constructed utilizing the following main assumptions :

- Material's heterogeneity on large scale are ignored. On small scale, we assume that a laboratory-sized specimen is mechanically homogeneous and continuous.
- The time dependent fracture process can be described by using a phenomenological model which reproduces mathematically the macroscopic stress-strain relations for different loading conditions, neglecting the microscopic mechanisms of the behaviour.
- Based on the history of the material's thermodynamic state, we postulate that we can go up to the fragment size by a post-processing analysis.

Therefore, using these considerations a suitable constitutive model for quasi-brittle materials has been developed. The model is capable of describing the rate-dependent non-linear behaviour and the load-induced anisotropy. This constitutive model is then implemented in a finite element program (VIPLEF3D).

On the other hand, based on experimental laboratory blasting tests, a dynamic fragmentation model is introduced to account for the fragment size distribution.

The developed approach is then applied to the modelling of the laboratory rock fragmentation by blasting. The model capabilities are then evaluated through the comparison between experimental and numerical results.

However, this work still asks more questions than it answers. Concerning the dynamic fragmentation problem, the phenomenal model used to predict the fragment size distribution seems to be an attractive approach, especially when the material to be fragmented is well characterized before energy input. However, the local relationship between the mean fragment size and the mechanical quantity appears to be not valid for low dynamic loadings where the fragmentation can be defined as a structural failure. In this regard, further studies must be undertaken to better clarify the transition between static and dynamic fragmentation. Additional high-quality experimental data is also needed to derive a general fragmentation model.

For the rock fragmentation problem, in our numerical modelling the blast loading is introduced by using a pressure-time history on the borehole. This pressure-time history is only a crude approximation and further studies must be undertaken for better taking into account the coupling problem involving detonation process and the breaking, the fracturing and the fragmentation of the rock. The crush action of shock wave around the borehole must also be the result of the coupled problem.

Moreover, in real blasting problems, it is evident that the rock mass properties will dominate the fragmentation process. Indeed, the properties of both the intact rock and the discontinuities play an important role in determining the most suitable fragmentation distribution with a minimum cost. Based on the approach developed in this paper, the blasting fragmentation distribution of the intact rock can be obtained. On the other hand, the initial block distribution can also be determined by using probability and statistics methods. Thus, future work can focus on the way to combine these different data in order to develop a complete methodology which can be used in real industrial applications.

Références

- Grady DE, Kipp ME. Continuum modelling of explosive fracture in oil shale. Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech. Abstr 1980;17:147-157.
- [2] Preece D, Thore BJ, Baer MR, Swegle JW. Computer simulation of rock blasting : a summary of work from 1987 through 1993. SAND29-1027, Unlimited Release 1994.
- [3] Potyondy DO, Cundall PA. Modeling of shock-and gas-driven fractures induced by a blast using bonded assemblies of spherical particles. In *Rock Fragmentation by blasting*. A.A. Balkema/Rotterdam, Brookfield, 1996.
- [4] Donzé FV, Bouchez J, Magnier SA. Modeling fractures in rock blasting. Int. J. Rock Mech. Min. Sci. 1997; 34(8) :1153-1163.
- [5] Munjiza A, Owen RJ, Bicanic N. A combined finite-discrete element method in transient dynamics of fracturing solids. *Eng. computations* 1995; **12** :145-174.
- [6] Curran DR, Seaman L, Shockey DA. Dynamic failure of solids. *Physics Reports* 1987; 147(5 & 6) :253-388.

- [7] Rouabhi A. Dynamic behaviour and fragmentation of quasi-brittle materials : application to rock fragmentation by blasting. *Thèse de doctorat*. Ecole des Mines de Paris, France, 2004.
- [8] Lemaitre J, Chaboche JL. Mécanique des matériaux solides. Dunod, France, 1985.
- [9] Freund LB. Dynamic fracture mechanics. Cambridge University Press, 1990.
- [10] Nikolaevskiy VN. *Geomechanics and fluidodynamics*. Kluwer Academic Publishers, 1996.
- [11] Cordebois JP, Sidoroff F. Endommagement anisotrope en élasticité et plasticité. J. Méc. théorique et appliquée 1982; numéro spécial : 45-60.
- [12] Murakami S, Kamiya K. Constitutive and damage evolution equations of elastic-brittle materials based on irreversible thermodynamics. *Int. J. Mech. Sci.* 1997; **39**(4):473-486.
- [13] Halam D, Dragon A. An anisotropic model of damage and frictional sliding for brittle materials. Eur. J. Mech., A/solids 1998; 17(3):439-460.
- [14] Carol I, Rizzi E, Willam K. On the formulation of anisotropic elastic degradation. I. Theory on a pseudo-logarithmic damage tensor rate. Int. J. solids and structures 2001; 38 :491-518.
- [15] Chaboche JL. Damage-induced anisotropy : on the difficulties associated with the activepassive unilateral conditions. Int. J. Damage Mech. 1992; 1 :148-171.
- [16] Ortiz M. A constitutive theory for the inelastic behavior of concrete. Mechanics of Materials 1985; 4:67-93.
- [17] Tijani M. VIPLEF3D User's Manual, Version 001204. Ecole des Mines de Paris, France, 2000.
- [18] Perkins RD, Green SJ, Friedman M. Uniaxial stress behavior of porphyritic tonalite at strain rates to 10³/seconds. Int. J. Rock Mech. Min. Sci. 1970; 7:527-535.
- [19] Peng SS. Time-dependent aspects of rock behaviour as measured by a servocontrolled hydraulic testing machine. Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech. Abstr. 1973; 10:235-246.
- [20] Chong KP, Hoyt PM, Smith JW, Paulsen BY. Effects of strain rate on oil shale fracturing. Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech. Abstr. 1980;17:35-43.
- [21] Gran JK, Florence AL, Colton JD. Dynamic triaxial tests of high-strength concrete. J. Engrg Mechanics 1989; 115(5);891-904.
- [22] Yalun Y. On the effect of dynamic fracture of rocks on the blasting. In Fragblast'90, Brisbane 1990.
- [23] Reinhardt HW, Rossi P, Van Mier JGM. Joint investigation of concrete at high rates of loading. *Materials and Structures* 1990; 23 :213-216.
- [24] Olsson WA. The compressive strength of tuff as a function of strain rate from 10^{-10} to 10^3 sec^{-1} . Int. J. Rock Mech. Min.Sci. & Geomech. Abstr 1991; **28**(1); 115-118.
- [25] Gary G., Bailly P. Behaviour of quasi-brittle material at high strain rate. Experiments and modelling. *Eur. J. Mech.*, A/solids 1998; 17(3); 403-420.
- [26] Malvar LJ, Crawford E. Dynamic increase factors for concrete. Twenty-Eighth DDESB seminar, Orlando, FL, 1998.
- [27] Tedesco JW, Ross CA. Strain-rate-dependent constitutive equations for concrete. Transactions of the ASME 1998; 120 :398-405.

- [28] Zhao J. Applicability of Mohr-Coulomb and Hoek-Brown strength criteria to the dynamic strength of brittle rock. Int. J. Rock Mech. and Mining Sci. 2000; 37 :1115-1121.
- [29] Frew DJ, Forrestal MJ, Chen W. A split hopkinson pressure bar technique to determine compressive stress-strain data for rock materials. *Experimental mechanics* 2001; 41(1):40-46.
- [30] Grote DL, Park SW, Zhou M. Dynamic behavior of concrete at high strain rates and pressures : I. experimental characterization. *Int. J. Imp. Engrg* 2001; **25** :869-886.
- [31] Meyers MA. Dynamic behavior of materials. John Wiley & sons, Inc, 1994.
- [32] Peerlings RHJ, Geers MGD, De Borst R, Brekelmans WAM. A critical comparison of nonlocal and gradient-enhanced softening continua. *Int. J. solids and structures* 2001; 38 :7723-7746.
- [33] Engelen RAB, Geers MGD, Baaijens PT. Nonlocal implicit gradient-enhanced elastoplasticity for the modelling of softening behaviour. *Int. J. Plasticity* 2003; **19**:403-433.

G Behaviour of transversely isotropic materials

ROUABHI, A., TIJANI, M., REJEB, A., *Triaxial behaviour of transversely isotropic materials : application to sedimentary rocks.* Int. J. for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, Vol 31, Iss 13, p 1517-1535, (2007).

SUMMARY

Failure and long-term behaviour of oriented solids are studied. Transversely isotropic materials are considered and a mathematical formulation that respect the material symmetry is developed and applied to model the triaxial behaviour of sedimentary rocks. Two failure criteria and a viscoplastic constitutive model that describe respectively triaxial failure and triaxial creep tests are presented and discussed. The application of the developed models to describe the mechanical behaviour of Tournemire shale shows that theoretical predictions are in good agreement with the experimental data. In the present paper, the developed approach is applied to sedimentary rock materials, nevertheless, it can be generalized to any material that exhibits transverse isotropy.

KEYWORDS : Rocks ; transverse isotropy ; triaxial ; failure surface ; viscoplasticity

G.1 Introduction

Based on experimental data, different approaches have been proposed to describe the deformation and the failure behaviour of anisotropic rocks. It is not the purpose of this paper to establish an exhaustive summary of the works devoted to anisotropic solids. The present work is devoted to study the behaviour of transversely isotopic solids under triaxial loadings (failure and creep tests). We mention only some review papers addressing the sate of art on the study of anisotropic materials.

Even though suitable framework allowing to establish constitutive equations for anisotropic solids that respect the material symmetry is furnished by the theory of representation for tensor functions (see, for example, References [1, 2, 3, 4]), the formulation of adequate laws, that describe the mechanical behaviour of these solids, with a reasonable number of material constants which can be easily identified, remains a complex task. The purpose of the present paper is to propose an approach that captures the principal features of the triaxial behaviour of transversely isotropic solids such as sedimentary rocks, and which preserves not only the mathematical rigour but also the simplicity of material parameters' identification.

Any constitutive equation must be independent of the frame of reference or observer. This means, mathematically, that constitutive equations must be invariant under an orthogonal transformation within the considered group of material symmetries [5]. In order to satisfy this principle of material frame-indifference, many authors have adopted a simplified theory employing a linear transformation which uses a fourth order tensor that specify the mechanical anisotropy, see, for instance Hill (1950), Boehler and Sawczuk(1977), Cazacu et al. (1998). This method has been used essentially to describe the short-term behaviour in terms of failure surfaces.

To simulate the non-linear constitutive behaviour of composite materials, Car et al. (2001) proposed an approach based on establishing a one-to-one relationship between the behaviour of the real anisotropic material and that of an isotropic fictitious one. The problem is then resolved in the isotropic fictitious space and the results are transported to the real field. The advantage of their approach is that one can use established models for isotropic

materials. In the present work, this concept of isotropic equivalent formulation is used to develop constitutive models for transversely isotropic sedimentary rocks' inelastic behaviour.

In order to describe the short-term strength, two failure criteria are proposed. The first criterion is based on the Drucker-Prager criterion that was formulated to account for the hydrostatic pressure sensitivity. The redefined Drucker-Prager criterion for transversely isotropic solids requires four material constants. As for the second criterion, it incorporates the effect of all three principal stresses, including that of intermediate one. It is based on the Mohr-Coulomb criterion but with a modified Lode dependence function. The redefined Mohr-Coulomb criterion for the transversely isotropic solids requires, in this case, five material constants. Material constants for both criteria are identified, for the considered example in this work, from triaxial compression, as well as triaxial extension failure experiments. On the other hand, a viscoplastic constitutive model is developed and applied to describe the long-term behaviour of Tournemire shale. This model, based on Lemaître's law [16], needs

It is of interest to note that these developments were already applied to a practical engineering problem which deals with the understanding of the excavation disturbed zone around the underground excavations of Tournemire site (France) [17].

five material constants which are calibrated, for Tournemire shale, from triaxial creep tests.

This paper is organized as follows. Section H.1 gives some important definitions of tensor functions that are used in our developments. In section H.2, the formulation of the stress space transformation is outlined, followed by the restrictions which are assumed on the material parameters specifying the mechanical anisotropy. Section H.3 describes the proposed failure criteria. Then, in the following section, the viscoplastic constitutive model is provided. Section H.5 is devoted to apply the whole developments to the Tournemire shale and to identify, from laboratory tests, its material constants.

G.2 Mathematical preliminaries

Notation : throughout this paper, the number of underlines beneath a symbol indicates the tensorial order of that variable. Superscript 't' indicates the transpose operation, while 'tr' is the trace operator. Symbol ':' denotes the inner product with double contraction, e.g. $\underline{a} : \underline{b} = a_{ij}b_{ji}$, where the index denotes cartesian components and repeated subscript imply summation unless otherwise indicated. $\underline{a} \ \underline{b}$ denotes the outer product with single contraction, i.e. $(\underline{a} \ \underline{b})_{ij} = a_{ik}b_{kj}$. ' \otimes ' indicates the dyadic or the tensor product, e.g. $(\underline{a} \otimes \underline{b})_{ijkl} = a_{ij}b_{kl}$, whereas ' $\overline{\otimes}$ ' denotes the symmetrized dyadic product defined as $(\underline{a} \ \underline{\otimes} \ \underline{b})_{ijkl} = (a_{ik}b_{jl} + a_{il}b_{jk})/2$. $\underline{1}$ and $\underline{1}$ are respectively the second-order and the fourth-order identity tensors.

Let consider a transversely isotropic solid with a privileged direction defined by the unit vector \vec{e} . In planes perpendicular to \vec{e} , the solid is isotropic. The material structure can be defined by the symmetric tensor [7]

$$\underline{\mathbf{e}} = \overrightarrow{\mathbf{e}} \otimes \overrightarrow{\mathbf{e}} \tag{1}$$

Let \mathscr{T} be the space of the second-order tensors. We define the following symmetry groups :

$$\mathscr{O} = \left\{ \underline{\underline{\omega}} \in H \, \underline{\underline{\omega}} \, \underline{\underline{\omega}}^t = \underline{\underline{1}} \right\} \tag{2}$$

$$\mathscr{G} = \left\{ \underline{\underline{\omega}} \in \mathscr{O} : \underline{\underline{\omega}} \underline{\underline{e}} \underline{\underline{\omega}}^t = \underline{\underline{e}} \right\}$$
(3)

 \mathscr{O} is the orthogonal second-order tensors subspace of \mathscr{T} . \mathscr{G} is referred to as the material symmetry group.

Now, consider the scalar and the tensor valued functions, denoted by φ and \underline{c} of tensor variables, denoted by \underline{a} and \underline{b} . Then, from the representation theorems [5], one has the following definitions, where \mathscr{S} is the subspace of second-order symmetric tensors :

Definition 1 : A scalar-valued function $\varphi(\underline{a})$ of a tensor variable $\underline{a} \in \mathscr{S}$ is isotropic relative to \mathscr{O} , i.e. invariant under any orthogonal transformation within the considered group, if and only if it can be expressed as a function of the principal invariants of \underline{a} :

$$\varphi(\underline{\underline{a}}) = \varphi(\operatorname{tr}(\underline{\underline{a}}), \operatorname{tr}(\underline{\underline{a}}^2), \operatorname{tr}(\underline{\underline{a}}^3))$$
(4)

where \underline{a}^n denotes the outer product $\underline{a} \ \underline{a} \dots \underline{a}$ (n times)

Definition 2: A polynomial tensor function $\underline{c}(\underline{a}, \underline{b})$ of two variables $(\underline{a}, \underline{b}) \in \mathscr{S}^2$, i.e., the component of \underline{c} are polynomials in the components of the \underline{a} and \underline{b} , is isotropic relative to \mathscr{O} if and only if it has a representation of the form

$$\underline{\underline{c}}\left(\underline{\underline{a}}, \ \underline{\underline{b}}\right) = \varphi_{0}\underline{\underline{1}} + \varphi_{1}\underline{\underline{a}} + \varphi_{2}\underline{\underline{a}}^{2} + \varphi_{3}\underline{\underline{b}} + \varphi_{4}\underline{\underline{b}}^{2} + \varphi_{5}\left(\underline{\underline{a}} \ \underline{\underline{b}} + \underline{\underline{b}} \ \underline{\underline{a}}\right) + \varphi_{6}\left(\underline{\underline{a}}^{2}\underline{\underline{b}} + \underline{\underline{b}} \ \underline{\underline{a}}^{2}\right) + \varphi_{7}\left(\underline{\underline{a}} \ \underline{\underline{b}}^{2} + \underline{\underline{b}}^{2}\underline{\underline{a}}\right) + \varphi_{8}\left(\underline{\underline{a}}^{2}\underline{\underline{b}}^{2} + \underline{\underline{b}}^{2}\underline{\underline{a}}^{2}\right)$$
(5)

where $\varphi_1, ..., \varphi_8$ are polynomials in the ten basic invariants

$$\begin{array}{c} \operatorname{tr}\left(\underline{\underline{a}}\right), \ \operatorname{tr}\left(\underline{\underline{a}}^{2}\right), \ \operatorname{tr}\left(\underline{\underline{a}}^{3}\right), \ \operatorname{tr}\left(\underline{\underline{b}}\right), \ \operatorname{tr}\left(\underline{\underline{b}}^{2}\right), \\ \operatorname{tr}\left(\underline{\underline{b}}^{3}\right), \ \operatorname{tr}\left(\underline{\underline{a}}\ \underline{\underline{b}}\right), \ \operatorname{tr}\left(\underline{\underline{a}}\ \underline{\underline{b}}^{2}\right), \ \operatorname{tr}\left(\underline{\underline{a}}\ \underline{\underline{b}}^{2}\right), \ \operatorname{tr}\left(\underline{\underline{a}}\ \underline{\underline{b}}^{2}\right), \\ \end{array} \right\}$$
(6)

G.3 Stress space transformation

G.3.1 The fictitious stress tensor

Consider a scalar valued function (strain energy, failure criterion, ...) $\varphi(\underline{\sigma})$ of the symmetric Cauchy stress tensor $\underline{\sigma}$. In order to respect the material frame-indifference, φ must necessarily be invariant under an orthogonal transformation within the considered group of material symmetries. Therefore, for transverse isotropy, φ must satisfy the following relation :

$$\forall \underline{\underline{\sigma}} \in \mathscr{S} \ \forall \underline{\underline{\omega}} \in \mathscr{G} : \quad \varphi \left(\underline{\underline{\omega}} \ \underline{\underline{\sigma}} \ \underline{\underline{\omega}}^t \right) = \varphi \left(\underline{\underline{\sigma}} \right)$$
(7)

which means that φ must be an invariant relative to \mathscr{G} . On the other hand, it can be shown that by adding the structural tensor \underline{e} to the original arguments of φ , one can construct a function which is invariant relative to \mathscr{O} [2]. Thus, for transversely isotropic material, any scalar function can be expressed as

$$\varphi\left(\underline{\sigma}\right) = \bar{\varphi}\left(\underline{\bar{\sigma}}\right) \tag{8}$$

with

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\ell}} \left(\underline{\underline{\sigma}}, \ \underline{\underline{e}} \right) \tag{9}$$

where $\bar{\varphi}$ and $\underline{\ell}$ are invariant relative to \mathscr{O} . Considering this generalisation, one can take all the advantages of the well-established theory of the representation of isotropic functions. $\underline{\bar{\sigma}}$ can be interpreted as the stress tensor within a fictitious isotropic solid. The real stress $\underline{\sigma}$ and the fictitious stress are related by the transformation function $\underline{\ell}$. To go further and allow analytical developments, in what follows, we shall assume that $\underline{\ell}$ is linear with respect to its first argument. In views of the representation (5), this assumption leads to express $\underline{\bar{\sigma}}$ as follows

$$\underline{\bar{\sigma}} = \underline{\ell} \left(\underline{\sigma}, \ \underline{\underline{e}} \right) = \varphi_0 \underline{\underline{1}} + \varphi_1 \underline{\sigma} + \varphi_2 \underline{\underline{e}} + \varphi_3 \left(\underline{\sigma} \ \underline{\underline{e}} + \underline{\underline{e}} \ \underline{\sigma} \right)$$
(10)

 $\underline{\underline{\sigma}}$ is linear with respect to $\underline{\underline{\sigma}}$, only if the coefficients φ_i satisfy the following restrictions :

$$\varphi_0 = c_1 \operatorname{tr}\left(\underline{\underline{\sigma}}\right) + c_2 \operatorname{tr}\left(\underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{e}}\right), \quad \varphi_1 = c_3, \quad \varphi_2 = c_4 \operatorname{tr}\left(\underline{\underline{\sigma}}\right) + c_5 \operatorname{tr}\left(\underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{e}}\right), \quad \varphi_3 = c_6$$
(11)

where $(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6) \in \mathbb{R}^6$ are constants. $\overline{\sigma}$ can also be written as

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underbrace{\underline{\mathscr{L}}^c}_{\underline{\underline{m}}} : \underline{\underline{\sigma}}$$
(12)

where $\underline{\mathscr{L}^c}$ is a constant fourth-order tensor which can be written as

$$\underline{\mathscr{L}}^{c} = c_{1} \underline{1} \otimes \underline{1} + c_{2} \underline{1} \otimes \underline{e} + c_{3} \underline{1} + c_{4} \underline{e} \otimes \underline{1} + c_{5} \underline{e} \otimes \underline{e} + c_{6} \left(\underline{e} \overline{\otimes} \underline{1} + \underline{1} \overline{\otimes} \underline{e} \right)$$
(13)

 $\underbrace{\underline{\mathscr{L}}^c}_{\text{the major symmetry, i.e., }} \mathcal{L}^c_{ijkl} = \mathscr{L}^c_{ijkl} = \mathscr{L}^c_{ijkl} = \mathscr{L}^c_{ijkl}. \text{ In order to satisfy}$ the major symmetry, i.e., $\mathscr{L}^c_{ijkl} = \mathscr{L}^c_{klij}$, one must impose the condition $c_2 = c_4$.

Now, with these considerations in mind, we introduce the following relation :

$$\underline{\underline{\sigma}} = a_3 \left[\underbrace{\underline{\mathscr{L}}}_{\underline{\underline{m}}} : \underline{\underline{\sigma}} \right], \quad \text{with } a_3 = c_3 \neq 0 \tag{14}$$

in which, the fourth-order tensor $\underline{\mathscr{L}}^c$ is replaced by the tensor $\underline{\mathscr{L}} = (1/c_3) \underline{\mathscr{L}}^c$ that can be expressed as

$$\underbrace{\mathscr{L}}_{\equiv} = \underbrace{1}_{\equiv} + a_1 \underbrace{1}_{\equiv} \otimes \underbrace{1}_{\equiv} + a_2 \left(\underbrace{1}_{\equiv} \otimes \underbrace{e}_{\equiv} + \underbrace{e}_{\equiv} \otimes \underbrace{1}_{\equiv} \right) + a_4 \underbrace{e}_{\equiv} \otimes \underbrace{e}_{\equiv} + a_5 \left(\underbrace{e}_{\equiv} \overline{\otimes} \underbrace{1}_{\equiv} + \underbrace{1}_{\equiv} \overline{\otimes} \underbrace{e}_{\equiv} \right)$$
(15)

where $(a_1, a_2, a_3, a_4, a_5) \in \mathbb{R}^5$ are the material constants that will specify the mechanical anisotropy. We observe that for $a_1 = a_2 = a_4 = a_5 = 0$ and $a_3 = 1$ we have $\overline{\sigma} = \sigma$.

Of particular importance, in the developments thereafter, are the following invariants

$$\mathbf{N} = -\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\mathbf{e}}} = -\underline{\underline{\sigma}} \cdot \overrightarrow{\underline{\mathbf{e}}}$$
(16)

$$T = ||\underline{\underline{\sigma}} \overrightarrow{e} + N\overrightarrow{e}|| = \left(\operatorname{tr}\left(\underline{\underline{e}} \ \underline{\underline{\sigma}}^2\right) - N^2 \right)^{1/2}$$
(17)

$$\mathbf{p} = -\left(1/3\right)\operatorname{tr}\left(\underline{\sigma}\right) \tag{18}$$

$$q = \left((3/2) \underline{\underline{s}} : \underline{\underline{s}} \right)^{1/2} \tag{19}$$

 \underline{s} is the stress deviator tensor and is given by

$$\underline{\underline{s}} = \underline{\underline{\sigma}} - (1/3) \operatorname{tr}(\underline{\underline{\sigma}}) \underline{\underline{1}}$$
(20)

N and T are respectively the intensity of the normal and the shear stress acting across the cut plane normal to the unit vector \overrightarrow{e} . p is the mean or the hydrostatic stress (positive in compression). q is the Von Mises equivalent stress which, in triaxial test, is reduced to the absolute value of the difference between the axial and the lateral pressures.

In terms of these invariants, one can introduce the following invariants of $\overline{\sigma}$

$$\bar{\mathbf{p}} = a_3 \left[(3a_1 + a_2 + 1) \mathbf{p} + (1/3) (3a_2 + a_4 + 2a_5) \mathbf{N} \right]$$
 (21)

$$\bar{q} = |a_3| \left(q^2 + \alpha_1 T^2 + \alpha_2 p^2 + \alpha_3 N^2 + \alpha_4 p N \right)^{(1/2)}$$
(22)

with

$$\begin{array}{c} \alpha_1 = 3a_5 \left(a_5 + 2 \right), \quad \alpha_2 = 9a_2 \left(a_2 - 1 \right) \\ \gamma = a_4 + 2a_5, \quad \alpha_3 = \gamma^2 + 3\gamma, \quad \alpha_4 = 3\gamma \left(2a_2 - 1 \right) + 9a_2 \end{array} \right\}$$
(23)

The third invariant of $\underline{\bar{\sigma}}$ can be written, in terms of the Lode angle $\bar{\theta} \in [0, \pi/3]$, as

$$\cos\left(3\bar{\theta}\right) = \operatorname{sgn}\left(a_3\right)\left(27/2\right)\det\left(\underline{\underline{s}}\right)/\overline{q}^3, \quad \operatorname{sgn}(x) = x/|x| \tag{24}$$

G.3.2 Restrictions on the fictitious stress tensor



FIG. 1 – A specimen of a transversely isotropic material

In an attempt to arrive at relations which could be confronted easily with experimental data, we propose, in this section, to reduce the number of parameters defining $\underline{\bar{\sigma}}$. Since rock specimens are mainly submitted to triaxial stress state, it appears therefore reasonable to start this analysis by considering a triaxial test on a transversely isotropic material (Figure 1). We denote by Θ the angle between the axis \vec{z} of the specimen and the privileged direction \vec{e} of the material.

The specimen is loaded by an axial pressure Q and a lateral pressure P (confinement). In terms of P and Q, the stress tensor $\underline{\sigma}$ can be expressed in the axes of the specimen $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ as

$$\underline{\underline{\sigma}} = -\underline{P}\underline{\underline{1}} - (\underline{Q} - \underline{P})\overrightarrow{z} \otimes \overrightarrow{z}$$
⁽²⁵⁾

In geomechanics the experimental data are obtained in most cases from triaxial compression tests. Sometimes data from triaxial extension tests are also included. Assuming the ordering of the principal stresses to be $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3$, these different tests correspond to the following configurations :

- Triaxial compressions

$$\sigma_1 = \sigma_2 = -\mathbf{P} \ge \sigma_3 = -\mathbf{Q} \tag{26}$$

Triaxial extensions

$$\sigma_1 = -\mathbf{Q} \ge \sigma_2 = \sigma_3 = -\mathbf{P} \tag{27}$$

In the case of triaxial tests, the second invariant \bar{q} of $\underline{\underline{\sigma}}$, in terms of (P, Q, Θ) becomes

$$\bar{q} = |a_3| (A(\Theta) q^2 \pm 2B(\Theta) pq + Cp^2)^{(1/2)} A(\Theta) = 1 + (\alpha_1/4) \sin^2 (2\Theta) + (\alpha_3/9) (1 - 3\cos^2(\Theta))^2 B(\Theta) = (1/6) (2\alpha_3 + \alpha_4) (1 - 3\cos^2(\Theta)), \quad C = \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4$$
 (28)

here, in the \pm sign, the upper sign holding for triaxial extension and the lower sign for triaxial compression. Thus, for a given orientation Θ , \bar{q} is a quadratic function of p and q. At this stage, it is worthwhile to point out that, in the following, we shall consider only failure surface which are open on the compressive hydrostatic axis, i.e., a pure hydrostatic compression loading cannot cause failure. Thus, to account for the unlimited hydrostatic compressive capacity, we shall consider the condition

$$B^2 - AC = 0, \quad \forall \Theta \tag{29}$$

consequently, \bar{q} will be a parabola. Taking into account the expressions of B, A and C, we can easily show that (29) holds if the material parameters satisfy the restriction

$$\gamma = a_4 + 2a_5 = -3a_2 \tag{30}$$

if (30) holds, \bar{q} becomes

$$\bar{\mathbf{q}} = |a_3| \sqrt{\mathbf{A}(\Theta)} \mathbf{q} \mathbf{A}(\Theta) = 1 + (\alpha_1/4) \sin^2(2\Theta) + (\alpha_2/9) (1 - 3\cos^2(\Theta))^2$$
(31)

therefore, for a given orientation Θ , \bar{q} is only a function of q.

In Equation 31, $A(\Theta)$ must be a positive function. In view of its expression, this can be easily assured if one assumes the additional restrictions :

$$\alpha_1 = 3a_5(a_5+2) \ge 0 \text{ and } \alpha_2 = 9a_2(a_2-1) \ge 0$$
 (32)

On the other hand, when (30) holds, the first and the third invariants, in the case of the triaxial stress state, become

$$\bar{\mathbf{p}} = a_3 \left(3a_1 + a_2 + 1 \right) \mathbf{p}$$
 (33)

 $\cos\left(3\bar{\theta}\right) = \pm \operatorname{sgn}\left(a_3\right)\phi\left(\Theta\right) \operatorname{A}\left(\Theta\right)^{\left(-3/2\right)}$

$$\phi(\Theta) = \phi_1(\phi_1^2 - \phi_2), \quad \phi_1(\Theta) = 1 + a_2(1 - 3\cos^2(\Theta))$$

$$\phi_2(\Theta) = (3/2) [3a_2(1 - 3\cos^2(\Theta)) - \alpha_1\cos^2(\Theta)]\sin^2(\Theta)$$

$$(34)$$

Consider now a pure hydrostatic state of stress, $\underline{\sigma} = -P\underline{\underline{1}}$. For this case, $\underline{\overline{\sigma}}$ becomes

$$\underline{\underline{\sigma}} = -a_3 P\left[\underline{\underline{\mathscr{L}}}:\underline{\underline{1}}\right] = -a_3 P\left[(3a_1 + a_2 + 1)\underline{\underline{1}} + (3a_2 + a_4 + 2a_5)\underline{\underline{e}}\right]$$
(35)

which can be reduced to

$$\underline{\bar{\sigma}} = -a_3 \mathrm{P} \left(3a_1 + a_2 + 1 \right) \underline{\underline{1}} = a_3 \left(3a_1 + a_2 + 1 \right) \underline{\underline{\sigma}}$$
(36)

when (30) holds. Thus, under an hydrostatic stress state, the stress tensor associated to the fictitious solid is proportional to the real stress. To simplify further the analysis, we will

assume that, under hydrostatic stress state, we have $\underline{\bar{\sigma}} = \underline{\sigma}$. This condition can be assured by considering

$$a_3 = 1, \quad \text{and} \quad 3a_1 = -a_2 \tag{37}$$

Finally, if conditions (30) and (37) are satisfied, the linear transformation, which relates the fictitious stress $\underline{\sigma}$ to the real stress $\underline{\sigma}$, can be written as

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underbrace{\underline{\mathscr{L}}}_{\underline{\underline{m}}} : \underline{\underline{\sigma}}$$
(38)

with

$$\underline{\mathscr{L}} = \underline{\underline{1}} + a_2 \left(\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{e}} + \underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{1}} - (1/3) \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}} - 3\underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{e}} \right) + a_5 \left(\underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{e}} - 2\underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{e}} \right)$$
(39)

The transformation is then characterized only by two material constants a_2 and a_5 . In this case, the first and the second invariant of $\overline{\sigma}$ are reduced to

$$\bar{\mathbf{p}} = \mathbf{p} \tag{40}$$

$$\bar{\mathbf{q}} = \left[\mathbf{q}^2 + \alpha_1 \mathbf{T}^2 + \alpha_2 \left(\mathbf{p} - \mathbf{N}\right)^2\right]^{(1/2)}$$
 (41)

and that

$$\alpha_1 = 3a_5 (a_5 + 2) \ge 0, \quad \alpha_2 = 9a_2 (a_2 - 1) \ge 0, \quad (a_2, a_5) \in \mathbb{R}^2$$
 (42)

Thus, a_2 and a_5 are used essentially to generalise the Von Mises equivalent stress q to transversely isotropic media : q is replaced by \bar{q} . In addition, for functions which are expressed only by using \bar{p} and \bar{q} , one can use α_1 and α_2 instead of a_2 and a_5 . However, a_2 and a_5 become indispensable when we need to calculate the third invariant of $\underline{\bar{\sigma}}$. In addition, (42) indicates that α_1 and α_2 are quadratic equations, therefore their determination will not guarantee the identification of a_2 and a_5 . That is the reason why we need restrictions on a_2 and a_5 . We shall consider physical intuitive considerations to establish these restrictions :

Restriction on a_2 : let a transversely isotropic rock specimen with a privileged axis $\overrightarrow{e} = \overrightarrow{z}$ ($\Theta = 0^\circ$) be subjected to a triaxial test. In this particular case, we assume that, under compression or extension loads, the real and the fictitious material are submitted to the same load's nature, e.g., if the real material is under compression load, the fictitious material must also be under compression load. It can be easily shown that this assumption leads to the condition $a_2 \leq 1/2$. Since α_2 must be positive, it follows that a_2 must satisfy the condition

$$a_2 \le 0 \tag{43}$$

Restriction on a_5 : similarly, during a simple shear test, in the plane (\vec{y}, \vec{z}) , on a specimen with a privileged axis $\vec{e} = \vec{y}$ ($\Theta = 90^\circ$), we assume that both materials are submitted to the same load's nature. This leads to the following condition

$$a_5 \ge -1 \tag{44}$$

G.4 Proposed transversely isotropic failure criteria

The general form of a failure surface can be expressed by a scalar-valued function $F(\underline{\sigma})$. The equality $F(\underline{\sigma}) = 0$ describes the failure envelope in six-dimensional stress space. As already explained, for transversely isotropic material, F can be expressed as

$$F\left(\underline{\sigma}\right) = \bar{F}\left(\underline{\bar{\sigma}}\right) \tag{45}$$

where F is isotropic relative to \mathcal{O} and $\underline{\bar{\sigma}}$ is the fictitious stress tensor associated to the fictitious isotropic material. The advantage of using $\overline{F}(\underline{\bar{\sigma}})$ instead of $F(\underline{\sigma})$ is that one can makes use of failure surfaces developed for isotropic materials. To respect the material symmetry, \overline{F} must only depend on the principal invariants of $\underline{\bar{\sigma}}$, e.g., in the form the three principal stresses, $\overline{F}(\underline{\bar{\sigma}}) = \overline{F}(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \bar{\sigma}_3)$. Alternatively, \overline{F} can be expressed in terms of the three invariants \overline{p} , \overline{q} and $\overline{\theta}$

$$\bar{\mathbf{F}}\left(\underline{\bar{\sigma}}\right) = \bar{\mathbf{F}}\left(\bar{\mathbf{p}}, \ \bar{\mathbf{q}}, \ \overline{\theta}\right) = 0 \tag{46}$$

As we already know, in geomecahnics, the behaviour of many materials are characterized by their hydrostatic pressure dependence. In the isotropic case, failures of this class of materials are, in the most cases, described by the well-known Drucker-Prager and Mohr-Coulomb surfaces. In the following, we shall redefine these criteria for the transversely isotropic material.

G.4.1 Redefined Drucker-Prager criterion

In the principal fictitious stress space, the Drucker-Prager surface is a cone with a circular deviatoric section centered on the hydrostatic axis

$$\bar{\mathbf{F}}\left(\underline{\bar{\sigma}}\right) = \bar{\mathbf{F}}\left(\bar{\mathbf{p}}, \ \bar{\mathbf{q}}\right) = \bar{\mathbf{q}} - \bar{\alpha}_1 \bar{\mathbf{p}} - \bar{\alpha}_2 = 0, \quad (\bar{\alpha}_1, \ \bar{\alpha}_2) \in \mathbb{R}^2_+ \tag{47}$$

where $\bar{\alpha}_1$ and $\bar{\alpha}_2$ are two material constants.

In order to write the failure surface for the real material, we have simply to replace in the above equation \bar{p} and \bar{q} by their expressions given respectively by Equation (40) and (41), and thus

$$\bar{\mathbf{F}}\left(\underline{\bar{\sigma}}\right) = \mathbf{F}\left(\underline{\sigma}\right) = \mathbf{F}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{N}, \mathbf{T}) = \left[\mathbf{q}^2 + \alpha_1 \mathbf{T}^2 + \alpha_2 \left(\mathbf{p} - \mathbf{N}\right)^2\right]^{(1/2)} - \bar{\alpha}_1 \mathbf{p} - \bar{\alpha}_2 = 0 \quad (48)$$

As a result, we obtain a failure surface with four material parameters $(\alpha_1, \alpha_2, \bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2) \in \mathbb{R}^4_+$.

G.4.2 Redefined Mohr-Coulomb criterion

In the principal fictitious stress space, the Mohr-Coulomb surface is an hexagonal pyramid with an irregular hexagonal deviatoric section centered on the hydrostatic axis. In this case, the failure surface becomes dependent on the Lode angle. It can be expressed as

$$\bar{\mathrm{F}}\left(\underline{\bar{\sigma}}\right) = \bar{\mathrm{q}} - \ell\left(\overline{\theta}\right)\left(\bar{\alpha}_{1}\bar{\mathrm{p}} + \bar{\alpha}_{2}\right) = 0, \quad (\bar{\alpha}_{1}, \ \bar{\alpha}_{2}) \in \mathbb{R}^{2}_{+}$$

$$\tag{49}$$

with

$$\ell\left(\bar{\theta}\right) = \frac{3/2}{\left(\bar{\alpha}_1 + 1\right)\cos\left(\bar{\theta}\right) + \sin\left(\bar{\theta} + \pi/6\right)} \tag{50}$$

It is of interest to recall here that the Mohr-Coulomb model does not depend on the intermediate principal stress. To overcome this limitation, in this study we shall introduce a third parameter $\bar{\alpha}_3$ and replace the Mohr-Coulomb Lode dependence (50) by the simpler expression proposed by Gudehus and Argyris [18]

$$\ell\left(\bar{\theta}\right) = \frac{2\bar{\alpha}_3}{1 + \bar{\alpha}_3 + (1 - \bar{\alpha}_3)\cos\left(3\bar{\theta}\right)}, \quad \bar{\alpha}_3 \in]0, \ 1]$$
(51)

Along the tensile $(\bar{\theta} = 0)$ and the compression $(\bar{\theta} = \pi/3)$ meridians, this function takes the values : $\ell(0) = \bar{\alpha}_3$, $\ell(\pi/3) = 1$. Figure 2 shows $\ell(\bar{\theta})$ for various values of $\bar{\alpha}_3$ between 0.5 and 1. The deviatoric cross-sections are smooth but not convex for $\bar{\alpha}_3$ smaller than 0.777.

In this case, we obtain a failure surface with five parameters $(\alpha_1, \alpha_2, \bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2, \bar{\alpha}_3) \in \mathbb{R}^5_+$.



FIG. 2 – Deviatoric section for different values of $\bar{\alpha}_3$

G.5 Proposed transversely isotropic viscoplastic model

Among anisotropic rocks, the sedimentary rocks, termed shales, represents a particular interest, due to their low porosities and permeabilities, in nuclear waste storage. Creep of these rocks is therefore one of the most important phenomena in long-term safety of geological disposal system of radioactive wastes. Based on the previous developments, the present section addresses the problem of the time dependent behaviour of transversely isotropic rocks within the framework of the viscoplasticity theory.

We assume the additive decomposition of the total strain tensor $\underline{\underline{\varepsilon}}$ into elastic and viscoplastic parts respectively denoted by $\underline{\underline{\varepsilon}}^e$ and $\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}$

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}^e + \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp} \tag{52}$$

For linearized elasticity, the stress tensor $\underline{\sigma}$ can be written as

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\underline{H}}} \left(\underline{\underline{e}}\right) : \underline{\underline{\varepsilon}}^{e} \tag{53}$$

where $\underline{\underline{H}}(\underline{\underline{e}})$ is the elasticity tensor of the transversely isotropic solid which, of course, depends on the material structure defined by the tensor $\underline{\underline{e}}$.

In classical plasticity/viscoplasticity, we need to complete the above equations with the introduction of the evolution law of $\underline{\varepsilon}^{vp}$. To establish this law, we replace, as done before, the anisotropic material by the fictitious isotropic material. The real stress tensor $\underline{\sigma}$ is then assumed to be related to the fictitious tensor $\underline{\bar{\sigma}}$ by the linear transformation $\underline{\mathscr{L}}$ given by (39).

Now, in order to find the relation between the real and the fictitious viscoplastic strain tensors, we shall use an hypothesis of dissipated power equivalence which states that the dissipated viscoplastic power for the real material is the same as that of the fictitious material :

$$\underline{\underline{\sigma}}: \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vp} = \underline{\underline{\sigma}}: \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vp} \tag{54}$$

Here, a dot denotes the rate with respect to time. Combining Equation (38) and the major symmetry property of $\underline{\mathscr{L}}$, (54) can be rewritten as

$$\underline{\underline{\sigma}}: \left(\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vp} - \underline{\underline{\mathscr{L}}}: \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vp}\right) = 0 \tag{55}$$

which is valid for any stress tensor $\underline{\sigma} \in \mathscr{S}$. Hence, we deduce the evolution law of $\underline{\varepsilon}^{vp}$:

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vp} = \underline{\underline{\mathscr{L}}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vp} \tag{56}$$

where $\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}$ denotes the fictitious viscoplastic strain tensor. Therefore, it results that the evolution law of $\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}$ is defined whenever the corresponding law associated to the fictitious isotropic material is chosen.

Experimental observations on creep tests on Tournemire shale samples, indicate that, under deviatoric or isotropic stresses, the amplitude of the differed volumetric deformations are negligible compared to the deviatoric deformations. Based on those observations, in the present paper our attention will focus on Lemaître's evolution law. This law is associated to the Von Mises yield surface through the normality condition. The Von Mises yield surface can be expressed, in terms of the equivalent stress \bar{q} , as

$$\bar{\mathbf{F}}\left(\underline{\bar{\sigma}}\right) = \bar{\mathbf{F}}\left(\bar{\mathbf{q}}\right) = \bar{\mathbf{q}} - \bar{k} \tag{57}$$

where \bar{k} is a material constant. Since the normality condition is assumed, the rate of the viscoplastic strain tensor can then be written as

$$\underline{\underline{\check{\varepsilon}}}^{vp} = \dot{\lambda} \frac{\partial F}{\partial \underline{\bar{\sigma}}} = \dot{\lambda} \frac{\partial \bar{q}}{\partial \underline{\bar{\sigma}}}$$
(58)

where $\dot{\lambda} = \dot{\lambda} (\bar{F})$ is a positive scalar function (plastic multiplier). Several possibilities exist in the definition of $\dot{\lambda}$. As regards Lemaître's law, $\dot{\lambda}$ is given by

$$\dot{\lambda}\left(\bar{\mathbf{F}}\right) = 10^{-6}\dot{\xi}^{\dot{\alpha}} \tag{59}$$

where ξ is a scalar isotropic hardening internal variable whose evolution is defined by the rate equation :

$$\dot{\xi} = (\bar{q}/K)^{\beta/\alpha} \tag{60}$$

in which the parameter \bar{k} is set equal to zero and $(\alpha, \beta, K) \in \mathbb{R}^3_+$ are material constants.

The evolution law associated to the real material is then obtained from Equations (56) and (58). Thus,

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{vp} = \frac{\dot{\lambda}}{\bar{q}} (3/2) \underline{\mathscr{L}} : \underline{\underline{\ddot{s}}}$$
(61)

On the other hand, it can be easily shown that

$$(3/2) \underbrace{\mathscr{L}}_{\equiv} : \underline{\underline{\bar{s}}} = \bar{q} \frac{\partial \bar{q}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}$$

$$(62)$$

It follows that Equation (61) can be reduced to

$$\underline{\dot{\varepsilon}}^{vp} = \dot{\lambda} \frac{\partial \bar{\mathbf{q}}}{\partial \underline{\sigma}} \tag{63}$$

with

$$\bar{q}\frac{\partial\bar{q}}{\partial\underline{\underline{\sigma}}} = (3/2)\underline{\underline{s}} + (\alpha_1/2)\left(\underline{\underline{\sigma}}\underline{\underline{e}} + \underline{\underline{e}}\underline{\underline{\sigma}} + 2N\underline{\underline{e}}\right) + \alpha_2\left(p - N\right)\left(\underline{\underline{e}} - (1/3)\underline{\underline{1}}\right)$$
(64)

It is easy to see that Equation (63) is practically the same as (58) except the fact that the partial derivative is with respect to $\underline{\sigma}$ and not to $\underline{\sigma}$. Therefore, one can conclude that the

generalization of the Lemaître's model for the transversely isotropic case consists only of the replacement of the Von Mises equivalent stress q, in the evolution laws, with the generalized equivalent stress \bar{q} . Furthermore, it is interesting to note that the generalized evolution law (63) possesses the same essential features as the evolution law (58) of the isotropic case, i.e., according to (64), there is no plastic volumetric deformation.

Finally, for the established evolution law, the Clausius-Duhem inequality, which corresponds to the positiveness of the dissipated energy, is fulfilled since Equation (54) is satisfied and that $\underline{\bar{\sigma}}: \underline{\dot{\bar{\varepsilon}}}^{vp} = \dot{\lambda} \bar{q} \ge 0$.

G.6 Identification of the material parameters

As mentioned above, in geomechanics the experimental data are obtained in most cases from triaxial tests, that is the reason why we will use these tests to identify the material parameters. The tested material is a shale taken from the Tournemire site in the Massif Central, France. A comprehensive laboratory investigations ([17] and [19]) has shown that this sedimentary rock exhibits transverse isotropy. The Tournemire shale correspond to well-compacted argilites and marks due to lithostatic pressure and diagenetic processes. The primary minerals for this shale are kaolinite, quartz, illite and calcite. It's porosity is between 6 and 9% [15].

The curve-fitting procedure is based on the minimization of the quadratic difference between the measured data and the theoretical predictions. In the following, we shall start by identifying the failure constants which are involved in the four-parameter, as well as in the five-parameter failure criteria, then we determine the material constants of the viscoplastic model.

G.6.1 Failure parameters

Under triaxial loading conditions, both failure surfaces can be expressed as

$$F(\underline{\sigma}) = F(p, q, \Theta) = q - \lambda(\Theta)(\bar{\alpha}_1 p + \bar{\alpha}_2) = 0$$
(65)

In the case of the four-parameter model, we have

$$\lambda(\Theta) = \lambda_c(\Theta) = \lambda_t(\Theta) = 1/\sqrt{A(\Theta)}$$
(66)

whereas for the five-parameter model, we have

$$\lambda_{c}(\Theta) = \frac{2\bar{\alpha}_{3}A(\Theta)}{(1+\bar{\alpha}_{3})A(\Theta)^{(3/2)} - (1-\bar{\alpha}_{3})\phi(\Theta)} \\ \lambda_{t}(\Theta) = \frac{2\bar{\alpha}_{3}A(\Theta)}{(1+\bar{\alpha}_{3})A(\Theta)^{(3/2)} + (1-\bar{\alpha}_{3})\phi(\Theta)} \\ \phi(\Theta) = \phi_{1}(\phi_{1}^{2} - \phi_{2}), \quad \phi_{1} = 1 + a_{2}(1-3\cos^{2}(\Theta)) \\ \phi_{2} = (3/2)[3a_{2}(1-3\cos^{2}(\Theta)) - \alpha_{1}\cos^{2}(\Theta)]\sin^{2}(\Theta)$$

$$(67)$$

with

$$p = (1/3) (2P + Q), \quad q = |Q - P|$$

A (\Theta) = 1 + (\alpha_1/4) \sin^2 (2\Theta) + (\alpha_2/9) (1 - 3\cos^2 (\Theta))^2 } \begin{bmatrix} (68)

where $\lambda = \lambda_c$ holds for triaxial compression and $\lambda = \lambda_t$ for triaxial extension. Noting that, when $\alpha_2 = 0$, both models do not distinguish between the particular orientations $\Theta = 0^{\circ}$ and $\Theta = 90^{\circ}$.
Four-parameter model				Five-parameter model				
α_1	α_2	$\bar{\alpha}_1$	$\bar{\alpha}_2 [\text{MPa}]$	α_1	α_2	$\bar{\alpha}_1$	$\bar{\alpha}_2 [\text{MPa}]$	\bar{lpha}_3
2.896	0.608	1.179	17.276	2.802	0.619	1.182	17.315	0.780

TAB. 1 – Parameters values for both criteria

As for experimental data, laboratory investigations were performed mainly on triaxial compression tests with moderate confining pressure and for the orientations $\Theta = 0^{\circ}$, $\Theta = 45^{\circ}$, $\Theta = 60^{\circ}$ and $\Theta = 90^{\circ}$, only some extension tests for the particular orientations $\Theta = 0$ and $\Theta = 90^{\circ}$ were carried out.

The values of the material constants involved in the proposed criteria were calculated so as to obtain the best fit to the experimental data. The curve-fitting procedure, was performed in two steps. The first step, consisted, for a given orientation, in fitting data in the p - q plane to obtain λ as a function of Θ . In the second step, we fit the obtained function to its analytical expression. The obtained values are given in Table 1.

Figures 1, 2, 3 and 4 show the comparison of the failure criteria with the triaxial data in the axial-lateral pressure planes. The solid lines correspond to the theoretical curves obtained in application of the proposed models when the triaxial compression configuration is considered. Note that for this configuration, both models give the same results, as should be the case. Concerning the triaxial extension configuration, predicted results are represented by dashed lines for the five-parameter model and by dotted lines for the four-parameter model. In these figures, experimental points are indicated by symbols.

As can be seen, the agreement is very satisfactory along the compression meridian. Along the extension meridian, it is evident that the five-parameter model gives the closer curves to the experimental points. However, although the overall performances of the proposed models, it seems reasonable that further triaxial extension tests should be undertaken especially to better evaluate the five-parameter model's potential.

Figure 7 shows the variation of the failure compressive strength (Q) with the orientation (Θ) for three different confining pressure (P). The experimental results are represented by symbols. Dashed lines correspond to the results given by the four-parameter model. In this case, the results of the five-parameter are similar to that of figure 7. All the curves demonstrate the similar nature of the responses of Tournemire shale under confining pressures, the maximum strength is obtained for $\Theta = 90^{\circ}$, while the minimum strength is found around $\Theta = 45^{\circ}$. As shown in the figure, the influence of the confining pressure on the strength characteristics is rather well described.

G.6.2 Viscoplastic parameters

In this section we present the identification of the material constants appearing in the viscoplastic constitutive model. For this purpose, triaxial compression creep tests at different axial pressure Q have been used. The lateral pressure has been kept constant, P = 5 MPa. The identification procedure consists of determining the set of constants (α_1 , α_2 , α , β , K) by fitting the axial strain to the measured data. Under triaxial loading conditions, the strain component ε_{zz} can be expressed in terms of the time t, the orientation Θ and the equivalent

stress q = Q - P as

$$\left. \begin{array}{l} \varepsilon_{zz}\left(t, \ \Theta, \ q\right) = -10^{-6}\varepsilon_{a}\left(t, \ \Theta, \ q\right) \\ \varepsilon_{a}\left(t, \ \Theta, \ q\right) = 10^{6}\frac{q\left(t\right)}{E\left(\Theta\right)} + \Lambda\left(\Theta\right)\left(\int_{0}^{t}\left(q\left(\tau\right)\right)^{\beta/\alpha}d\tau\right)^{\alpha} \\ \Lambda\left(\Theta\right) = K^{-\beta}\Lambda\left(\Theta\right)^{(1+\beta)/2} \\ \Lambda\left(\Theta\right) = 1 + \left(\alpha_{1}/4\right)\sin^{2}\left(2\Theta\right) + \left(\alpha_{2}/9\right)\left(1 - 3\cos^{2}\left(\Theta\right)\right)^{2} \end{array}\right\}$$

$$(69)$$

where ε_a is the axial strain in micrometer per meter. The first part in its expression corresponds to the elastic response which depends on the orientation via the Young's modulus E. The best fit to the experimental data was obtained with the following material constants :

$$\alpha_1 = 4.669, \quad \alpha_2 = 0.000, \quad \alpha = 0.110, \quad \beta = 1.300, \quad K = 0.203 \text{ MPa}$$

It should be noted that, for each orientation, we have added to the fitting set parameters $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha, \beta, K)$ the Young's modulus. But, when determined in this way, the Young's modulus is significantly different from the elasticity modulus deduced from the stress-strain curves. This may be explained by the difference between the used experimental procedures and apparatus.

As opposed to failure tests where we have observed a difference between the particular orientations $\Theta = 0^{\circ}$ and $\Theta = 90^{\circ}$ ($\alpha_2 \neq 0$), in this case, experimental data corresponding to these orientations (Figure 5) coincide practically with each other. That is the reason why we have obtained $\alpha_2 = 0$.

Figure 5 shows the comparison of the predicted result with the measured data obtained under a constant axial pressure (Q = 25 MPa) and for the orientations $\Theta = 0^{\circ}$ and $\Theta = 90^{\circ}$. The solid line corresponds to the response of the model while experimental points are indicated by symbols. Obtained results with multiple axial pressure (Q = 10, 15, 20 MPa) are shown in Figures 6 and 10. These figures correspond to the orientations $\Theta = 45^{\circ}$ and $\Theta = 60^{\circ}$.

As can be seen, the proposed model furnishes a rather good fit to the experimental data.

G.7 Conclusions

In this paper, the concept of the isotropic equivalent formulation has been developed for transversely isotropic materials. The findings of these developments have allowed us to perform two failure criteria and a viscoplastic constitutive model. The procedure of the identification of the material parameters from triaxial tests has been outlined. The application of this procedure to a transversely isotropic solid (Tounemire shale) has shown that theoretical predictions seem to be in good agreement with the experimental data.

Although the overall performance of this study, it should be noted that further experimental tests must be undertaken under different stress states, not only triaxial, to better evaluate the capacity of the proposed models to describe the behaviour of transversely isotropic solids.



FIG. 3 – Comparison of the proposed failure criteria with triaxial data, $\Theta=0^\circ$



FIG. 4 – Comparison of the proposed failure criteria with triaxial data, $\Theta = 45^{\circ}$



FIG. 5 – Comparison of the proposed failure criteria with triaxial data, $\Theta = 60^{\circ}$



FIG. 6 – Comparison of the proposed failure criteria with triaxial data, $\Theta = 90^{\circ}$



FIG. 7 – Failure compressive strength variation as a function of anisotropy orientation



FIG. 8 – Comparison of the viscoplastic model with triaxial creep data, $\Theta = 0^{\circ}, \Theta = 90^{\circ}$



FIG. 9 – Comparison of the viscoplastic model with triaxial creep data, $\Theta = 45^{\circ}$



FIG. 10 – Comparison of the viscoplastic model with triaxial creep data, $\Theta = 90^{\circ}$

Références

- Spencer A.J.M. Theory of invariants in Continuum Physics. Eringen C. ed. Academic Press, 1971; 239-353.
- [2] Zheng QS. Theory of representations for tensor functions A unified invariant approach to constitutive equations. *Applied Mechanics Review* 1994; **47**:545-587.
- [3] Lui IS. On the representation of anisotropic invariants. International Journal of Engineering Science 1982; 20(10) :1099-1109.
- [4] Boehler JP, Sawczuk A. Equilibre limite des sols anisotropes. Journal de Mécanique. 9(1),5-33.
- [5] Truesdell C, Noll W. The Non-Linear Field Theories of Mechanics. 3rd Edition, Springer, 2004
- [6] Hill R. The mathematical Theory of Plasticity. Oxford : Clarendon Press 1950.
- [7] Boehler JP, Sawczuk A. On Yielding of oriented solids. Acta Mechanica 1977; 27 :185-204.
- [8] Nova R. The failure of transversely isotropic rocks in triaxial compression. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 1980; **7**(6) :325-332.
- [9] Taliercio A., Sacchi Landriani G. A failure condition for layered rock. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences 1988; 25(5):299-305.
- [10] Matsuoka H., Nakai T. Stress, deformation and strength characteristics under three different principal stresses. Proc. JSCE, 1974; 59-70.
- [11] Matsuoka H., Nakai T. A new failure condition for soils in the three dimensional stresses. Deformation and failure of granular materials, Delft, Vermeer P.A., Luger H.J. eds., Balkema, 1982.
- [12] Boehler JP. Yielding and failure of transversely isotropic solids. In Application of tensor functions in solid mechanics (Boehler JP ed.), International Centre For Mechanical Sciences Courses and lectures No. 292, Springer-Verlag, 1987; 67-97.
- [13] Cazacu O, Cristescu ND, Shao JF, Henry JP. A new anisotropic failure criterion for transversely isotropic solids. *Mechanics of Cohesive-Frictional materials* 1998; 3:89-103.
- [14] Car E, Oller S, Onate E. A large strain plasticity model for anisotropic materials composite material application. *International Journal of Plasticity* 2001; 17:1437-1463.
- [15] Nunez JC, Beaucaire C, Bruno G, De Windt L, Genty A, Ramambasoa N, Rejeb A, Savoye S, Volant P. Projet Tournemire. DPRE/SERGD 01-19, Département de Protection de l'Environnement, Institut de Protection et de Sûreté Nucléaire, France 2001.
- [16] Tijani SM, Vouille V, Hugout B. Le sel gemme en tant que liquide visqueux. Proceed 5th. ISRM Symp. Rock Mech. Melbourne, Australia, 1983; D241-D246.
- [17] Rouabhi A, Tijani M, Rejeb A. Etudes expérimentale et théorique du comportement des argilites en vue de la compréhension des zones endommagées autour des ouvrages souterrains du site de Tournemire. R051216AROU, Centre de Géothechnique d'Exploitation du Sous-sol, Ecole des Mines de Paris, France 2005.
- [18] Zienkiewicz OC, Pande GN. Some useful forms of isotropic yield surfaces for soil and rock mechanics. *Finite elements in geomechanics*, G. Gudhehus, ed., John Wiley and Sons, New York, 1977;179-190.
- [19] Humbert B, Vouille G. Argilite de Tournemire. R99/4/ROC/MR, Centre de Géothechnique d'Exploitation du Sous-sol, Ecole des Mines de Paris, France 1999.

H Semi-analytical approach for heat transfer

ROUABHI, A., STAB, O., CHARNAVEL, Y., YOU, T., TIJANI, M., A semi-analytical approach for modelling heat transfer during salt-cavern leaching process, Article soumis à Int. J. for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, en attente de parution (2007).

SUMMARY

The use of gas storage caverns in salt formations is a growing industry that continues to gain momentum because it allows gas to be injected and withdrawn at high rates compared to other underground gas-storage system such as porous rock systems.

In order to predict cavern production performances, cavern thermodynamics behaviour must be studied by higher accuracy approaches. This behaviour is extremely related to the temperature distribution in the surrounding formations. During the leaching process, the thermal equilibrium of the rock salt surrounding the cavern is extensively disrupted. The purpose of the present paper is to study the heat transfer problem during the leaching process and to develop a thermal model which can be easily used in field applications. The results of this work will be the input data for the prediction of the gas temperature and pressure during cavern gas-storage operation phase. Moreover, the developed model can find its use in the design of salt caverns since it can be coupled with geometrical modelling of salt dissolution codes.

KEYWORDS : Salt cavern, leaching, heat transfer, semi-analytical approach, finite element simulations

H.1 Introduction

Salt cavern leaching is used to create deep cavities (at a depth varying from 300 m to 2000 m) in salt deposits. These underground deposits may exist in two geological formations : salt domes and salt beds. The leaching process consists of using fresh water to dissolve and extract a certain amount of salt from the deposit leaving a large empty space in the formation (cavern with volume varying from 5000 to 1 000 000 m^3).

Cavern development involves drilling a well through which the fresh water will enter and the brine will exit. As fresh water and brine move through the well, there is transfer of heat between fluids and geothermal temperatures. Heat transfer exists also between the cavern brine and the salt formation around the cavern. This results from the temperature difference between the initial rock temperature (a typical value being $45^{\circ}C$ at a depth of 1000 m) and the fresh water temperature (a typical value being $15^{\circ}C$). Therefore, estimation of temperature distribution during the leaching process requires an understanding of the thermal processes which occur not only around the cavern but also inside the well.

The transient heat transfer problem under consideration can be solved by using numerical codes based on finite element method. However, this problem is a challenge to computational techniques because it involves two difficult problems. The first problem concerns the large number of elements that may be employed to ensure accurate results. Indeed, due to the high flow rate in the well (a typical value being 100 m^3 per hour) and the small dimension of the well radius compared to the final cavern radius, fine meshes (around ten millimeter) are necessary to handle the problem accurately. The second problem concerns the moving boundary condition at the interface between the salt formation and the cavern brine.

The moving interface is induced by the change in cavern shape and size during the leaching process. With these consideration in mind, it seems unrealistic, for engineering applications, to model the general transient heat transfer problem by classical numerical methods.

The technical literature on gas storage in salt caverns deals primarily with the engineering geologic and rock-mechanical aspects of caverns. Only a few computer codes, based on the finite difference method, have been developed to provide an approach to the heat transfer problem during the leaching phase (see, for example, References [4, 5]). In these codes, the real problem is always simplified by considering 1D approaches based on volume equivalence between the actual and the theoretical caverns. Flow within the well is assumed, in the majority of cases, to be steady state and adiabatic.

The objective of this study is to develop an accurate, robust and efficient heat transfer model which takes into account the heat exchange, under various operating conditions, not only around the cavern but also in the well surroundings. The results of this work can be used as an input data for precise predictions of the initial phase of gas-cavern exploitation. The developed approach is also useful for the design of salt caverns since it can be coupled with geometrical modelling of salt dissolution codes.

To achieve the objective above and to allow numerical calculations with minimal cost, semianalytical solutions have been investigated. As can be seen in what follows, this approach introduces very little error and allows, on the other hand, accurate and rapid results which are often preferable to the alternative time-consuming numerical solutions.

The outline of this work is as follows. In Section H.2, the physical system that we wish to model is briefly described. It also gives the general considerations used in our investigations. Section H.3 discusses the thermal equilibrium of the cavern brine. Section H.4 deals with the heat transfer problem in the rock salt around the cavern. Results of the model developed in this section are compared to 2D numerical results. Section H.5 is devoted to the heat transfer in the well. This section includes a description of an iterative algorithm that calculate the temperature distribution in the well. The semi-analytical approach for modelling the complete heat transfer during the leaching process is presented in Section H.6. Section H.7 deals with some further numerical validations.

H.2 Physical model

Figure 1(a) shows the physical system that we wish to model. It consists of the salt cavern that is connected to the ground surface by straight, vertical, cased and cemented well equipped with a concentric tubing system. With direct leaching, fresh water flows into the cavern through the central tubing and brine is extracted from the cavern through the annulus. With reverse leaching, the fresh water travels down the annulus space and the brine returns up the central tubing.

To allow analytical developments, we subdivide the problem into three parts : (1) cavern brine (Section H.3), (2) rock salt around the cavern (Section H.4), (3) well (Section H.5). For each subsystem, the transient heat transfer problem will be studied regardless thermal interactions with the other subsystems. Therefore, adequate simplifications can be formulated. Based on these simplifications, the complete problem will be reconsidered (Section H.6). In our investigations, the following general considerations are taken into account :

- We consider an isolated cavern that is connected to the ground surface by a single leaching well;
- We neglect the presence of the undissolved impurities that settle in the cavern bottom and we assume that, at each time, the cavern is fully filled with saturated brine;
- The geometrical evolution of the cavern during leaching is considered as a given function of time. Geometrical modelling of salt dissolution codes such as SIMLESS code
 [6] can be used to predict the evolution cavern geometry when it is unknown;
- The geothermal temperature T_g distribution is assumed to be a piecewise linear and continuous function of depth;
- Unless otherwise specified, the examples handled here are derived from the Gaz de France site in Etrez, in south-eastern France. For interested readers, further information about this site can be found in references such as [5, 7];
- For modelling purposes, time derivatives are represented, when numerical discretization is needed, by the implicit Euler method which can be expressed, for a continuous function of time f, as $df/dt(t) = (f(t) - f(t^*))/\Delta t$, where $t^* = t - \Delta t$ and Δt is the time step size.

H.3 Thermal equilibrium of the cavern brine

The brine temperature T_b inside the cavern changes with time due to the heat exchanges with the salt-body and with the entering fresh water. The endothermic process of salt dissolution may also affect the brine temperature evolution.

To predict the transient brine temperature distribution inside the cavern, both convection and conduction must be considered. This is a difficult problem which requires complicated numerical tools. In order to make it tractable, we will assume the homogeneity of the brine temperature. This assumption may be justified when considering the cavern brine stirring phenomenon caused by the thermal convection inside the cavern.

Having these considerations in mind, the heat energy balance inside the cavern can be expressed as follows :

$$\rho_b C_b \mathcal{V}(t) \frac{d\mathbf{T}_b}{dt}(t) = \rho_w C_w Q_w \left(\mathbf{T}_w(t) - \mathbf{T}_b(t)\right) + \rho_s L_s \frac{d\mathcal{V}}{dt}(t) + \Psi(t)$$
(1)

where the subscripts b, w and s denote the brine, the water and the salt respectively, ρ is the mass density, C is the heat capacity, \mathcal{V} is the actual cavern volume, $d\mathcal{V}/dt$ is the rate at which the cavern volume is changing due to the salt dissolution, Q_w is the volumetric fresh water injecting rate, L_s is the latent heat of salt dissolution and T_w is the temperature of the fresh water entering into the cavern. The terms on the right of Equation (1) represent the heat exchanged with the entering water, the latent heat of solution and the heat entering the cavern volume across its bounding surface, respectively. At t = 0, we assume that the cavern brine is in thermal equilibrium with the salt formation.

In this work, the volume is considered as a prescribed function of time. However, T_w and Ψ have to be calculated according to the following developments. The other parameters in Equation (1) are forming part of the input data. The temperature T_w is calculated according to the heat transfer model in the well (Section H.5). For direct leaching, T_w is given by the central tubing whereas in the reverse leaching case, it is given by the annular space.

H.4 Heat transfer in the rock salt

H.4.1 Cavern geometry

The cavern geometry can be predicted by using leaching simulators. (see, for exemple, References [6, 8]). The size and the shape of the resulting cavern can be confirmed with sonar measurements. Figure 1(b) shows typical measured shapes, obtained for a cavern (EZ-12) from the underground gas storage of Etrez (France), at the end of four successive leaching steps.



FIG. 1 - (a) Schematic of underground cavern in salt formation. (b) Average vertical sections obtained by sonar measurements at the end of four leaching steps.

In general, caverns must be considered as three-dimensional structures. However, in most cases, it is sufficient to consider the two-dimension assumption with axisymmetric condition. As mentioned above, even when dealing with 2D calculations, the moving boundary condition associated to the leaching process remains too difficult to be handled and often too complicated for field applications. For this reason, in the modelling of this class of problems, 1D geometry is always assumed. Therefore, the two-dimensional axisymmetric geometry can be replaced by cylindrical or spherical shape. In this work, spherical shape will be adopted since it has finite dimensions as the actual cavern. Indeed, due to its confined property, the spherical shape allows to take into account the heat exchange between the confined cavern fluid with its surroundings better than the infinite cylindrical shape.

H.4.2 Formulation of the problem

We shall examine the heat transfer equations inside the salt formation. For modelling purposes, we assume an homogeneous, isotropic and infinite rock salt mass with a thermal diffusivity k and a thermal conductivity λ . Here, we assume also that T_g is a linear function of the vertical coordinate z. The problem is to determine the temperature T in the salt body (Ω) as a function of position \overrightarrow{x} and time t that satisfies the thermal diffusion problem

$$k\Delta T = \frac{\partial T}{\partial t} \tag{2}$$

where Δ is the Laplacian operator. Equation (2) has to be solved with the following initial and boundary conditions :

$$T(\vec{x}, 0) = T(\infty, t) = T_g(z)$$
(3)

To these equations, we must add the boundary condition at the cavern wall. To do this, we introduce the coefficient of surface heat transfer H_{bs} so that heat transfer at the cavern wall, i.e. $\vec{x} \in \partial \Omega$, can be expressed by the radiation boundary condition (Newton's Law)

$$\overrightarrow{q} = \mathcal{H}_{bs}(\mathcal{T} - \mathcal{T}_b)\overrightarrow{n} \tag{4}$$

where \overrightarrow{q} is the heat flux vector which also can be written in terms of the Fourier's law of heat conduction $\overrightarrow{q} = -\lambda \overrightarrow{\nabla T}$, \overrightarrow{n} is the unit vector normal to $\partial \Omega$. In this section, we shall consider the cavern brine temperature T_b as a prescribed function of time. Notice that H_{bs} can be constant or time-dependent parameter.

Since $\Delta T_g = 0$, this problem can be formulated in terms of $\Theta(\vec{x}, t) = T(\vec{x}, t) - T_g(z)$ as

$$\begin{cases} k\Delta\Theta = \frac{\partial\Theta}{\partial t} \\ \Theta(\overrightarrow{x},0) = 0, \quad \Theta(\infty,0) = 0 \\ \overrightarrow{q}.\overrightarrow{n} - \mathbf{H}_{bs}\Theta = \mathbf{H}_{bs}(\mathbf{T}_g - \mathbf{T}_b) \quad \text{for } \overrightarrow{x} \in \partial\Omega \end{cases}$$
(5)

Now, in order to derive an equivalence between the 3D actual cavern and the 1D theoretical cavern, one can consider either a volume or a surface equivalence. To the best of our know-ledge, the volume equivalence is the only approach identified in the literature. However, this approach seems to be not adequate when dealing with heat conduction problems. In fact, in the transient heat transfer problem under consideration, the phenomenon of principal interest is the heat exchange between the cavern fluid and the salt body. Thus, the most important variable, in this case, is the rate of heat transfer entering the cavern volume across its bounding surface

$$\Psi = -\lambda \int_{\partial\Omega} \overrightarrow{\nabla T} \cdot \overrightarrow{n} \, dS = \int_{\partial\Omega} \mathcal{H}_{bs} (\mathcal{T} - \mathcal{T}_b) \, dS \tag{6}$$

In terms of Θ , Ψ becomes

$$\Psi = -\lambda \int_{\partial\Omega} \partial_n \Theta \, dS = \mathcal{H}_{bs} \left(\int_{\partial\Omega} \Theta \, dS + \int_{\partial\Omega} \mathcal{T}_g \, dS - \mathcal{T}_b \int_{\partial\Omega} \, dS \right) \tag{7}$$

where ∂_n denotes differentiation in the direction of the outward normal to the surface. In the equation above we have considered that $\int_{\partial\Omega} \overrightarrow{\nabla T_g} \cdot \overrightarrow{n} \, dS = 0$ since $\Delta T_g = 0$. Dividing by the cavern surface $S = \int_{\partial\Omega} dS$, Equation (7) becomes

$$\frac{1}{S}\Psi = -\lambda \frac{1}{S} \int_{\partial\Omega} \partial_n \Theta \, dS = \mathcal{H}_{bs} \left(\frac{1}{S} \int_{\partial\Omega} \Theta \, dS + \frac{1}{S} \int_{\partial\Omega} \mathcal{T}_g \, dS - \mathcal{T}_b \right) \tag{8}$$

in which appear temperature average values over the cavern surface. Thus, the reduction of the 3D problem to 1D problem seems to be well approximated when using average values over the cavern surface. Consequently, the equivalence between the actual and the theoretical caverns will be based on surface conservation. The theoretical cavern, assumed here to have a spherical shape, will therefore be described by two geometrical parameters which are the radius and the depth of the cavern center of inertia defined as

$$4\pi a^2 = \int_{\partial\Omega} dS, \quad 4\pi a^2 Z = \int_{\partial\Omega} z \, dS \tag{9}$$

During the leaching process, a and Z vary with time . In this study, we consider them as prescribed functions.

For the sake of simplicity, in what follows, average value will usually be noted by the same symbol as the variable itself unless otherwise specified.

H.4.3 Semi-analytical solution

With the above simplifying assumptions and using the spherical coordinate system, the unknown temperature distribution Θ as a function of $r \ge a(t)$ and time t, will satisfy the following equations :

$$\begin{cases} k\left(\frac{\partial^2\Theta}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\Theta}{\partial r}\right) = \frac{\partial\Theta}{\partial t} \\ \Theta(r,0) = \Theta(\infty,0) = 0 \\ \lambda \frac{\partial\Theta}{\partial r}(a(t),t) - \mathcal{H}_{bs}\Theta(a(t),t) = \mathcal{H}_{bs}(\mathcal{T}_g(Z(t)) - \mathcal{T}_b(t)) \end{cases}$$
(10)

Notice that, since T_g is a linear function of z, the average value of T_g over the cavern surface is the same as the geothermal value evaluated at the cavern center of inertia Z.

Now, if we consider the special case of $H_{bs} = \infty$, which means that the temperature of the cavern surface is equal to the cavern brine temperature, it's possible to derive the analytical solution of our problem by using Duhamel's theorem [1]. The solution may expressed as

$$\Theta(r,t) = \int_0^t \Theta(a(t), \tau) \frac{\partial U}{\partial t} (r - a(t), t - \tau) d\tau, \quad U(x,t) = \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{kt}}\right)$$
(11)

where erfc is the complementary error function $\left(\operatorname{erfc}(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi\right)$. For engineering applications, the fact to consider $H_{bs} = \infty$ and to take advantage of the analytical solution seems to be a very attractive approach. Unfortunately, this is a time-consuming approach since it involves convolution operations to evaluate the integral of Equation (11) : the solution on next time level includes the solutions on all previous time levels. For this reason and also to be able to solve the considered problem with finite heat transfer coefficient, we will consider, in this work, semi-analytical solution. The main idea behind this approach is firstly to discretize the time derivative and then to find the analytical solution of the obtained space ordinary differential equation. This approach is particularly useful in developing methods with higher accuracy for the complete leaching problem.

If the time derivative $\partial \Theta / \partial t$ is approximated by the implicit Euler method, then the basic problem we shall solve is to update Θ to time t in a manner consistent with the boundary conditions and by considering the fact that $\Theta(r, t^*)$ is a known function of r. Changing the variable Θ such that

$$v(r)/r = \Theta(r,t), \quad u(r)/r = \Theta(r,t^{\star}) \tag{12}$$

we obtain the following second order differential equation that involves the unknown function v and the known function u:

$$-\ell^2 \frac{d^2 u}{dx^2} + v = u \tag{13}$$

with $\ell = \sqrt{k\Delta t}$. This differential equation can be resolved by considering, for instance, the method of variation of parameters. When considering the boundary conditions, the solution which gives v(r) can easily be found to be :

$$v(r) = \bar{v}(r) + a(t) \{ T_s(t) - T_g(Z(t)) \} e^{-(r-a(t))/\ell}$$
(14)

where $T_s(t) = T(a(t), t)$ is the temperature at the cavern wall. $\bar{v}(r)$ is given by

$$\begin{cases} \bar{v}(r) = u(r) + g(r) - f(r) - \{u(a(t)) + g(a(t))\} e^{-(r-a(t))/\ell} \\ f(r) = \frac{1}{2} e^{-r/\ell} \int_{a(t)}^{r} \frac{du}{dx} e^{x/\ell} dx \\ g(r) = \frac{1}{2} e^{r/\ell} \int_{r}^{\infty} \frac{du}{dx} e^{-x/\ell} dx \end{cases}$$
(15)

Now if we come back to evalute the heat transfer rate $\Psi = -\lambda \int_{\partial\Omega} \overrightarrow{\nabla T} \cdot \overrightarrow{n} \, dS$ for the spherical cavern, we can easily find that this quantity can be related to the brine temperature $T_b(t)$ by the following linear relationship

$$\Psi(t) = S(t)(-A_{\Psi}T_b(t) + B_{\Psi})$$
(16)

with

$$\begin{cases}
A_{\Psi} = \frac{\lambda A H_{bs}}{H_{bs} + \lambda A}, \quad B_{\Psi} = \frac{\lambda H_{bs}}{H_{bs} + \lambda A} \left(A T_g(Z(t)) + B \right) \\
A = \frac{1}{\ell} + \frac{1}{a(t)}, \quad B = \frac{u(a(t)) + 2g(a(t))}{\ell a(t)}
\end{cases}$$
(17)

where $S = 4\pi a^2$ is the actual cavern surface.

H.4.4 Numerical validation

In situ measurements of the temperature distribution during the leaching process seems difficult to obtain. Due to the lack of such measurements, we will use, in order to validate the proposed approach, 2D numerical simulations which allow the best representation of the real problem. 2D numerical calculations have been done with the use of the program CHEF developed at the Ecole des Mines de Paris. This numerical tool, based on the finite element method, can solve both steady- and unsteady-state heat conduction problems.

We consider the real case of a concern at the Gaz de France site in Etrez. The cavern is located between the depth levels 1414 - 1580 m and has a final volume of about 400000 m^3 . The cavern geometry, during the leaching process, is given by 16 successive steps (Figure 2(a)). The overall leaching time is about 2000 days.

In this case, we assume that the brine temperature is homogeneous and has a constant value of $45^{\circ}C$. Moreover, we consider that the rock temperature of the cavern wall is equal to the brine temperature ($H_{bs} = \infty$) which is less than the average geothermal temperature around the cavern ($57^{\circ}C$). The diffusivity and the thermal conductivity of the rock salt were taken $k = 2.62 \ 10^{-6} \ m^2/s$ and $\lambda = 5 \ W/m/^{\circ}C$, respectively.



FIG. 2 - (a) Theoretical cavern shapes during the 16 leaching steps. (b) Computational mesh used for 2D calculations. (c) Heat flux vectors at the final leaching time.

Taking into account the moving boundary condition between the fluid and the rock salt is the main computational challenge because the spatial domain occupied by the fluid changes in time, and the formulation must be able to handle this accurately and efficiently. In the real leaching problem, the location of the moving boundary is an unknown that needs to be determined as part of the overall solution. In this study, as mentioned earlier, we assume that this boundary is a prescribed function of time. In the case considered here, the cavern geometry evolution is represented by 16 zones (Figure2(b)). The elements of each zone are suppressed instantaneously which means that the boundary is a staged function of time. It is to be noted further that 2D computations were carried out with axisymmetric conditions around the vertical axis.

Of particular interest, in this study, as mentioned before, is the heat transfer exchange between the cavern fluid and the salt body. Figure 2(c) shows the heat flux vectors at the end of the leaching process. Notice, firstly, that flux vectors are normal, as they should be, to the cavern wall because we have considered that the cavern surface is a prescribed isothermal surface. Secondly, it is important to note also that, at the cavern wall, the heat flux intensity is practically uniform.

Now, in order to make comparison between 2D and 1D results, 1D calculations have been carried out under the same conditions. Results from both calculations are illustrated in Figure 3. This figure shows the rate of heat transfer entering the cavern across its bounding surface as a function of time. The time line represents 2000 days corresponding to the leaching period. As can be observed, the agreement is really excellent. Consequently, it can be concluded that the proposed 1D approach is valid to reproduce accurately the 2D complicated problem. Finally, let us reconsider the Figure 3. The observed discontinuities are the consequence of the instantaneously dissolution assumption which we have adopted to deal with the moving interface between the rock salt and the brine at each leaching step. To obtain smooth solutions, so that getting closer results to the real process, we should increase widely the number of leaching steps. Unfortunately, with a great number of steps, 2D simulations become not reasonable since they will involve exorbitant time calculations. On the other hand, 1D simulations are always possible due to the simplicity of the proposed approach. Figure 4 shows the evolution of the heat transfer rate corresponding to both situations. The curve below represents the 2D result associated to the 16 steps where we have kept, for each step, only the final value of the heat transfer rate. The other curve represents the same thing but with great number of steps (1000), of course, this result is obtained from 1D calculations. Contrary to the good agreement shown in Figure 3, in this case, we obtain different numerical results. These findings demonstrate the fact that we have to simulate the leaching process in a "continuous" way. This suggests that only 1D approaches will be of engineering interest, 2D calculations will be too hard to be handled and too complicated for field applications.



FIG. 3 – Comparison between 1D and 2D calculations for the rate of heat transfer across the cavern surface during the leaching process.



FIG. 4 – Effect of the number of leaching steps

H.5 Heat transfer in the well

As fluids move down the central tubing and back up the annulus (direct leaching), or down the annulus and up the central tubing (reverse leaching), there is transfer of heat between fluids and at the interface well/formation. This section presents a solution to the well heat transfer problem involved in the leaching process. In this case, the solution is based on the following considerations :

- Brine and fresh water are incompressible, and their constant or time-dependent physical properties are considered as known parameters;
- Average quantities (velocities, temperatures) over cross-sections are employed to reduce the 3D problem to a one-dimensional problem. This is the most convenient approximation to make the problem tractable;
- Vertical conduction of heat in the fluid is negligible compared with vertical convection.
 This is a good assumption for circulating rates normally encountered in practice;
- During the leaching process, the length of the well L may change with time, however, these variations remain negligible compared with the total length;
- Initially, we assume that the well is in thermal equilibrium with the formation;
- The boundary conditions must be specified depending on the leaching method (direct or reverse) that is used;
- The differential equation satisfied by the fluid temperature in each region is obtained by writing a heat energy balance on a cylindrical differential volume of the considered fluid between the depth z and z+dz. Note that z is positive in the downward direction;
- The system to be modeled can be subdivided into three parts : (1) central tubing, (2) annulus space, and (3) formation.

Let $T_c(z,t)$, $T_a(z,t)$ and $T_f(z,t)$ be the temperature in the central tubing, the temperature in the annulus space and the temperature at the well/formation interface respectively. The principal unknowns here are T_c and T_a . These unknowns can be determined by using a fully coupled numerical techniques. However, it is our opinion that an iterative approach is more natural and robust. This approach does not depend neither on the theoretical equations to be solved in each subsystem nor on the chosen numerical method.

H.5.1 Central tubing

In this case the unknown function is $T_c(z,t)$, $T_a(z,t)$ is considered as a known function. The heat is transferred between the central tubing fluid and that in the annulus according to Newton's law by incorporating an overall heat transfer coefficient H_{ca} which can be either constant or time-dependent parameter.

The differential equation for the temperature $T_c(z,t)$ can be written as

$$\rho_c C_c \Sigma_c \left(\frac{\partial \mathbf{T}_c}{\partial t} + v_c \frac{\partial \mathbf{T}_c}{\partial z} \right) = \mathbf{H}_{ca} (\mathbf{T}_a - \mathbf{T}_c) + \mathbf{P}_c$$
(18)

where the subscript c denotes the central tubing, Σ_c is the cross-sectional area, v_c is the cross-sectional mean velocity of the fluid in the central tubing (positive when the flow is downward), and P_c is a heat source term which can be generated by viscous dissipation. The term $(\partial T_c/\partial t + v_c \partial T_c/\partial t)$ is the time derivative following the motion of the fluid (material derivative). The solution of (18) can be found to be

$$T_{c}(z,t) = \omega(z,t) + (1/v_{c}) \int_{\max(z-v_{c}t,0)}^{z} e^{-\alpha(z-\xi)} \phi\left(\xi, t - (z-\xi)/v_{c}\right) d\xi$$
(19)

with

$$\begin{cases} \phi(z,t) = T_a(z,t)/\tau + P_c \\ \omega(z,t) = T_c(0,t-z/v_c)e^{-\alpha z} & t > z/v_c \\ \omega(z,t) = T_c(z-v_c t,0)e^{-t/\tau} & t < z/v_c \end{cases}$$
(20)

where $\tau = \rho_c C_c \Sigma_c / H_{ca}$ and $\alpha = 1/(v_c \tau)$. In Equation (19), τ and α are assumed to be constant. It is to be noted that (19) can be obtained by using, for example, the Laplace transformation method.

Examination of the results of several sets of calculations indicated that immediately after the beginning, a pseudo-steady state is reached. Such behaviour suggests that the unsteady state term $\partial T_c/\partial t$ can be neglected. This simplification leads to the following solution

$$T_c(z,t) = T_a(z,t) + P_c/H_{ca} - e^{-S_c z} \int_0^z e^{S_c x} \frac{\partial T_a}{\partial x}(x,t) \, dx + C e^{-S_c z}$$
(21)

where $S_c = H_{ca}/(\rho_c C_c v_c \Sigma_c)$ which, in this case, can be regarded as constant or timedependent parameter. The integration constant C is evaluated from the boundary condition. It should be noted here that (21) is valid only when $v_c \neq 0$. If $v_c = 0$, $\partial T_c/\partial t$ cannot be neglected. In this case, it can be replaced by the implicit Euler approximation.

H.5.2 Annular space

Here the unknown function is $T_a(z,t)$, $T_c(z,t)$ and $T_f(z,t)$ are considered as known functions. Similarly to the heat exchange between the central tubing and the annulus, the heat is transferred between the annulus fluid and the formation according to Newton's law by incorporating an overall heat transfer coefficient H_{af} which can be either constant or time-dependent parameter.

The differential equation for the temperature $T_a(z,t)$ can be written as

$$\rho_a C_a \Sigma_a \left(\frac{\partial T_a}{\partial t} + v_a \frac{\partial T_a}{\partial z} \right) = \mathcal{H}_{ca} (\mathcal{T}_c - \mathcal{T}_a) + \mathcal{H}_{af} (\mathcal{T}_f - \mathcal{T}_a) + \mathcal{P}_a$$
(22)

here the subscript a denotes the annular space. It may be noticed that Equation (22) can be solved in a manner similar to Equation (18) and the diffusive term can also be neglected as discussed before. Similarly to the central tubing case, the assumption $\partial T_a/\partial t = 0$ yields the following solution

$$T_a(z,t) = T_d(z,t) - e^{-S_a z} \int_0^z e^{S_a x} \frac{\partial T_d}{\partial x}(x,t) \, dx + A e^{-S_a z}$$
(23)

with

$$T_d(z,t) = \frac{1}{\alpha_a + \alpha_f} \left(\alpha_a T_c + \alpha_f T_f + \alpha_a P_a / H_{ca} \right)$$
(24)

where $\alpha_a = H_{ca}/(\rho_a C_a \Sigma_a)$, $\alpha_f = H_{af}/(\rho_a C_a \Sigma_a)$ and $S_a = (\alpha_a + \alpha_f)/v_a$. These parameters can be considered as constant or time-dependent parameters. The integration constant A is evaluated from the boundary condition. Notice here that (23) is valid only when $v_a \neq 0$. If $v_a = 0$, $\partial T_a/\partial t$ cannot be neglected. In this case, it can be replaced by the implicit Euler approximation.

H.5.3 Formation around the well

In this section we consider the transient heat conduction problem in the formation around the well. The solution of this problem will be used to obtain the desired temperature $T_f(z, t)$.

The formulation of the problem under consideration is based on the following assumptions :

- We consider the region bounded internally by an infinite circular cylinder with radius r = R;
- Heat conduction in the vertical direction is neglected compared with heat conduction in the radial direction. This assumption will be justified in Section H.6;
- Non-homogeneous formations can be approximated as a multiple horizontal layers with different physical proprieties. Thus, the diffusivity k and the conductivity λ may be assumed to be a staged functions of the vertical coordinate z.

With these simplifying assumptions and using the cylindrical coordinate system, the differential equation which governs the unsteady temperature distribution T(r, z, t) is

$$k(z)\left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial T}{\partial r}\right) = \frac{\partial T}{\partial t}$$
(25)

The initial and the boundary conditions are :

$$\begin{cases} T(r, z, 0) = T(\infty, z, t) = T_g(z) \\ 2\pi R\lambda(z) \frac{\partial T}{\partial r}(R, z, t) = H_{af} \left(T_f(z, t) - T_a(z, t) \right) \end{cases}$$
(26)

Here, we have $T_f(z,t) = T(R, z, t)$. Defining a new temperature $\Theta(r, z, t) = T(r, z, t) - T_g(z)$, then the problem can be formulated in terms of Θ as follows :

$$\begin{cases} k(z)\left(\frac{\partial^2\Theta}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial\Theta}{\partial r}\right) = \frac{\partial\Theta}{\partial t} \\ \Theta(r, z, 0) = \Theta(\infty, z, t) = 0 \\ 2\pi R\lambda(z)\frac{\partial\Theta}{\partial r}(R, z, t) - \mathcal{H}_{af}\Theta(R, z, t) = \mathcal{H}_{af}\left(\mathcal{T}_g(z) - \mathcal{T}_a(z, t)\right) \end{cases}$$
(27)

To solve (27), we shall proceed as in Section H.4. The time derivative $\partial \Theta / \partial t$ at time t is replaced by the implicit Euler approximation. Then, the obtained space ordinary differential equation is solved in a manner consistent with the boundary conditions and by considering $\Theta(r, z, t^*)$ as a known function. Let $v(r, z) = \Theta(r, z, t)$ and $u(r, z) = \Theta(r, z, t^*)$. The solution which gives the temperature distribution v(r, z) at time t can easily be found to be :

$$v(r,z) = \bar{v}(r,z) + \{ T_f(z,t) - T_g(z) \} \frac{K_0(r/\ell)}{K_0(R/\ell)}$$
(28)

where ℓ and \bar{v} are given by

$$\begin{cases}
\ell = \sqrt{k(z)\Delta t} \\
\bar{v}(r,z) = u(r,z) + g(r,z) - f(r,z) - \{u(R,z) + g(R,z)\} \frac{K_0(r/\ell)}{K_0(R/\ell)} \\
f(r,z) = \frac{1}{\ell} K_0(r/\ell) \int_R^r x \frac{\partial u}{\partial x}(x,z) I_1(x/\ell) \, dx \\
g(r,z) = \frac{1}{\ell} I_0(r/\ell) \int_r^\infty x \frac{\partial u}{\partial x}(x,z) K_1(x/\ell) \, dx
\end{cases}$$
(29)

Here I_0 , I_1 , K_0 and K_1 are the modified Bessel functions.

Finally, from the above equations, it can easily be shown that the temperature at the well/formation interface $T_f(z,t)$ is related to the temperature in the annulus space $T_a(z,t)$ by the following linear relationship

$$T_f(z,t) = A_f T_a(z,t) + B_f \tag{30}$$

with

$$\begin{cases}
A_f = \frac{H_{af}}{H_{af} + 2\pi R\lambda A}, \quad B_f = \frac{2\pi R\lambda}{H_{af} + 2\pi R\lambda A} \left(A \operatorname{T}_g(z) + B\right) \\
A = \frac{1}{\ell} \frac{K_1(R/\ell)}{K_0(R/\ell)}, \quad B = A u(R, z) + \frac{g(R, z)}{\ell} \left(\frac{K_1(R/\ell)}{K_0(R/\ell)} + \frac{I_1(R/\ell)}{I_0(R/\ell)}\right)
\end{cases}$$
(31)

H.5.4 Iterative method

In order to calculate the unsteady-state temperature distribution in the central tubing and the annulus space resulting from the heat exchanges between the three parts of the considered system, we shall use, as noted previously, an iterative approach. The basic idea of this approach is to consider the fact that, in terms of the temperature T_a , the problem under consideration can be converted, at each time step, into the form $T_a = \mathcal{F}(T_a)$ and then to use the well-known fixed-point iterative scheme. In fact, from Equations (23) and (24), it can be observed that T_a depends on the one hand on the temperature T_c which is written as a function of T_a as shown in Section H.5.1, and on the other hand on the temperature T_f which is related to T_a by Equation (30).

The iteration scheme consists of the following steps.

- 1. Initially (t=0), we assume that the well is in thermal equilibrium with the formation, i.e. $T_c(z,0) = T_a(z,0) = T_g(z)$;
- 2. At each time-step, the initial guess for the fixed-point problem is chosen from the previous time step, i.e. $T_a(z, t^*)$;
- 3. Solve the problem in the central tubing (Section (H.5.1))
- 4. Solve the problem in the annular space (Section (H.5.2)) using the previous results and Equation (30) to evaluate T_c and T_f respectively. This step will give new values of T_a . Determine the difference D between the new and the previous values. This difference can be expressed in any chosen norm;
- 5. As long as D is yet higher than some given level of accuracy, continue the iterative process restarting from step 3.

The above iteration scheme has proved to be very robust and fast. In general, convergence is obtained within few iterations.

H.6 Heat transfer during the leaching process

In this section, we shall couple the above separated models in order to obtain a single model (semi-analytical model) that simulate the thermal behaviour of the whole system during the leaching phase. In order to do this, it is necessary to consider the assumption which neglect the transition zone between the rock around the well and that around the cavern. This assumption will be justified numerically, by using 2D calculations, in the next section.

With this simplifying assumption, the formulation of the whole heat transfer problem becomes obvious since we need only to specify the adequate boundary conditions for each subsystem. To do this, let us reconsider, firstly, the thermal equilibrium of the cavern brine. In the differential equation(1) if the time derivative dT_b/dt is replaced by the implicit Euler approximation, then the brine temperature inside the cavern T_b can be found to be a linear function of the entering fresh water temperature T_w

$$T_b(t) = A_b T_w(t) + B_b \tag{32}$$

with

$$\begin{cases}
A_b = \frac{\rho_w C_w Q_w}{\rho_b C_b \mathcal{V} / \Delta t + \rho_w C_w Q_w + SA_\Psi}, \\
B_b = \frac{\rho_b C_b \mathcal{V} T_b(t^*) / \Delta t + \rho_s L_s d\mathcal{V} / dt + SB_\Psi}{\rho_b C_b \mathcal{V} / \Delta t + \rho_w C_w Q_w + SA_\Psi}
\end{cases}$$
(33)

Here, the linear relationship (16), at each time-step, between the heat transfer rate entering the cavern volume across its bounding surface and the brine temperature is used. Notice that, in Equation (33), both the actual cavern volume and the actual cavern surface are used. At t = 0, we assume that the cavern brine is in thermal equilibrium with the rock salt, i.e. $T_b(0) = T_g(Z(0))$.

Concerning the temperature T_w , it is calculated according to the heat transfer model in the well. For direct leaching, T_w is given by the central tubing $(T_w(t) = T_c(L, t))$, whereas in the reverse case, it is given by the annular space $(T_w(t) = T_a(L, t))$.

Once T_w is obtained, Equation (32) allow us to calculate T_b and also to solve the heat problem in the rock salt around the cavern since the boundary condition (4) at the cavern wall becomes known.

On the other hand, the heat problem in the well is solved only when the boundary conditions, that allow to calculate the integration constant C in Equation (21) and the integration constant A in Equation (23), are specified. One boundary condition is given by the surface fresh water temperature T_w^0 . This temperature, assumed here to be a prescribed function of time, can be imposed on the central tubing wellhead $(T_c(0,t) = T_w^0(t)))$ or on the annulus wellhead $(T_a(0,t) = T_w^0(t))$ depending upon the used leaching method (direct or reverse). As for the next boundary condition, it is given by the brine temperature inside the cavern. This condition can take the form $(T_a(L,t) = T_b(t))$ for direct leaching, or $(T_c(L,t) = T_b(t))$ for reverse leaching.

H.7 Other numerical validations

<

Let us come back to the assumptions concerning the transition zone between the well and the cavern, and the heat conduction in the vertical direction in the formation around the well. In order to confirm the fact that these phenomena can be neglected, we conducted 2D calculations using the finite element code CHEF. Since the purpose here is limited to the validation of those assumptions, we have simplified the problem as follows. The cavern geometry is maintained constant over time and it corresponds to the final leaching step of section (H.4.4). In this case, the cavern is connected to the surface by a well. Figure 5(b) shows the mesh used to carry out the numerical computations. The 2D computations were done with the axisymmetric condition.



FIG. 5 - (a) Temperature profiles. (b) Computational mesh used for 2D calculations. (c) Heat flux vectors at the final time.

In order to take into account the heat exchange between the circulating fluids in the well and the surrounding medium, a radiation boundary condition is considered. The temperature distribution in the fluid adjacent to the surface is assumed, in this case, to be time-independent function. In Figure 5(a) a comparison between the temperature distribution in the fluid and the initial geothermal temperature is shown. As regards the boundary condition at the cavern wall, a prescribed constant temperature is used (49°C). The overal heat transfer coefficient between the fluid and the formation was taken $H_{af} = 6.22 W/m/^{\circ}C$.

Figure 5(c) shows the heat flux vectors at the final time (200 days). It can be observed that the flux vector are normal to the well surface. This result confirms the fact that heat conduction in the vertical direction in the formation around the well is negligible. The flux vectors are also normal to the cavern wall, but, in this case, this results from the fact that the cavern surface is considered as a prescribed isothermal surface. From this figure, it can also be appreciated that the transition zone between the well and the cavern is negligible. At the region between the cavern and the well, the heat flux is largely dominated by the flux coming from the formation around the well.

In order to make comparison between 2D and 1D results, 1D calculations which take into account the thermal interactions between the different subsystems have been carried out. Figure 6 shows the radial heat flux at the well surface obtained by the 2D numerical solution and the 1D semi-analytical solution at the final time. As can be seen, the numerical results are in good agreement with the semi-analytical solution. Here, it is also possible to observe that the transition between the well and the cavern (around 1400 m in the case under consideration) is insignificant.



FIG. 6 – Comparison between 1D and 2D calculations for the profile of the radial heat flux at the final time.

H.8 Conclusions

In the present paper, a semi-analytical formulation for modelling the heat transfer during salt-cavern leaching process has been constructed utilizing the following main considerations :

- The physical system is divided into different subsystems. In each subsystem, the transient heat transfer problem is solved by considering adequate simplifying assumptions;
- The brine cavern thermal behaviour is studied by assuming the homogeneity of the temperature inside the cavern;
- 1D approach based on the surface equivalence between the theoretical and the actual caverns is used to solve the heat transfer problem in the rock salt around the cavern. The obtained results with this approach are in good agreement with 2D numerical results obtained by using a finite elements code;
- The heat conduction problem in the formation around the well is solved by considering the fact that the heat in the vertical direction can be ignored. The obtained results with this approach are also in good agreement with 2D numerical results;
- The diffusive terms in the equations governing the heat transfer problems in the circulating fluids in the well are neglected compared with the convective terms. This assumption was justified by considering the analytical solution of the heat transfer problem in the central tubing;
- The heat transfer problem in the well is solved by considering an iterative scheme based on the semi-analytical solutions obtained for the circulating fluids temperatures in the central tubing and in the annulus space;
- The thermal behaviour of the whole system is described by coupling the developed separated models through adequate boundary conditions. The transition zone between the well and the cavern was neglected. This assumption was justified by considering 2D calculations;

Based on these considerations, a suitable thermal model has been developed. The model is capable of describing the heat exchanges during the leaching process under various operating conditions. The semi-analytical approach used in this model introduces very little numerical errors and allow accurate results with minimal cost.

Finally, it should be noted that in this study we have neglected the insoluble impurities which are an important factor in the leaching process. Further studies should therefore investigate the possibility to take into account the presence of these impurities in the modelling. In addition, the proposed model should be validated by considering in situ measurements. This validation is under investigation and it will be published in a forthcoming paper.

ACKNOWLEDGMENTS : We wish to acknowledge many valuable suggestions and contributions of our colleague Faouzi Hadj-Hassen. We would also like to express our gratitude to Olivier Pichayrou, from Gaz de France, and Nicolas Gatelier, from Géostock, for their contributions.

Références

- Carslaw HS, Jaeger JC. Conduction of heat in solids. Second Edition, Oxford Unversity Press, 1959.
- [2] Kaka S, Yener Y. Heat conduction. Second Edition, Hemisphere Publishing Corporation, 1985.
- [3] Kaka S, Yener Y. Convective heat transfer. Second Edition, CRC Press LLC, 1995.
- [4] Andrzej SK, Kazimierz MU. Computer simulation of temperature distribution around Well and Cavern during Leaching. SMRI meeting, New Orleans, USA, 1995.
- [5] Hugout B. Conception des modèles d'exploitation des cavités salines. Gaz de France internal report (M.D5-BH/BZ E 50423), France 1984.
- [6] Charnavel Y, Leca D, Poulain F. Advanced geometrical modelling of salt dissolution during cavern leaching - Illustration with a case study. SMRI meeting, Las Vegas, Nevada, USA, 1999.
- [7] Pernette E, Dussaud M. Underground storages at Tersanne and Etrez : Prediction and simulation of cavity leaching in a salt layer charged with insoluble materials. Sixth international symposium on salt. Toronto, Ontario, Canada, 1983.
- [8] Guarascio M. CAVITA. A multipurpose numerical code for brine production planning and caverns design and control. SMRI meeting, Cleveland, Ohio,USA, 1996.
- [9] Bérest P, Ledoux E, Legait B, De Marsily, G. Effets thermiques dans les cavités en couches salifères. Proc. 4th ISRM Congress, Vol. I, Balkema ED., Rotterdam, 31-35, 1979.
- [10] Bérest P. Phénomènes thermiques en géothechnique. La thermomécanique des roches. BRGM Editions, 1988.
- [11] Brouard B. Sur le comportement des cavités-Etude théorique et expérimentation in situ. Thèse de doctorat de l'Ecole Polytechnique, France 1998.
- [12] Raymond LR. Temperature distribution in a circulating drilling fluid. Journal of Petroleum Technology 1969; 333-341.
- [13] Yu-Shu W, Pruess K. An analytical solution for wellbore heat transmission in layered formations. SPE Reservoir Engineering, November 1990.

- [14] Hagoort J. Simulation of production and injection performance of gas storage caverns in salt formations. SPE Reservoir Engineering, Novembre 1994.
- [15] Schoeppel RJ, Bennett RE. Numerical simulation of borehole and formation temperature distributions while drilling to total depth. SPE meeting, New Orleans, 1971.