



Modélisation du comportement et des couplages HMC des milieux poreux

Ha Hoang

► To cite this version:

Ha Hoang. Modélisation du comportement et des couplages HMC des milieux poreux. Autre. Université d'Orléans, 2012. Français. NNT : 2012ORLE2090 . tel-01622632

HAL Id: tel-01622632

<https://theses.hal.science/tel-01622632>

Submitted on 24 Oct 2017

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.

ÉCOLE DOCTORALE SCIENCES ET TECHNOLOGIES

GENIE-CIVIL – LABORATOIRE PRISME

THÈSE présentée par :

Ha HOANG

soutenue le : **20 Décembre 2012**

pour obtenir le grade de : **Docteur de l'université d'Orléans**

Discipline: Génie-Civil

Modélisation du comportement et des couplages HMC des milieux poreux

THÈSE dirigée par :

Dashnor HOXHA

Professeur, Université d'Orléans

RAPPORTEURS :

Karim AIT MOKHTAR

Professeur, Université de La Rochelle

Jean VAUNAT

Professeur, Technical University of Catalonia

JURY (*y reporter tous les membres de jury présents à la soutenance*):

Jian-Fu SHAO

Professeur, Polytech'Lille, Président du jury

Karim AIT MOKHTAR

Professeur, Université de La Rochelle

Jean VAUNAT

Professeur, Technical University of Catalonia

Kun SU

Docteur, HDR

Muzahim AL-MUKHTAR

Professeur, Université d'Orléans

Dashnor HOXHA

Professeur, Université d'Orléans, Directeur de thèse

Naima BELAYACHI

Maître de conférences, Université d'Orléans

Duc Phi DO

Maître de conférences, Université d'Orléans

ÉCOLE DOCTORALE SCIENCES ET TECHNOLOGIES

GENIE-CIVIL – LABORATOIRE PRISME

THÈSE présentée par :

Ha HOANG

soutenue le : **20 Décembre 2012**

pour obtenir le grade de : **Docteur de l'université d'Orléans**

Discipline: Génie-Civil

Modélisation du comportement et des couplages HMC des milieux poreux

THÈSE dirigée par :

Dashnor HOXHA

Professeur, Université d'Orléans

RAPPORTEURS :

Karim AIT MOKHTAR

Professeur, Université de La Rochelle

Jean VAUNAT

Professeur, Technical University of Catalonia

JURY (*y reporter tous les membres de jury présents à la soutenance*):

Jian-Fu SHAO

Professeur, Polytech'Lille, Président du jury

Karim AIT MOKHTAR

Professeur, Université de La Rochelle

Jean VAUNAT

Professeur, Technical University of Catalonia

Kun SU

Docteur, HDR

Muzahim AL-MUKHTAR Professeur, Université d'Orléans

Dashnor HOXHA

Professeur, Université d'Orléans, Directeur de thèse

Naima BELAYACHI

Maître de conférences, Université d'Orléans

Duc Phi DO

Maître de conférences, Université d'Orléans

Ha HOANG

Modélisation du comportement et des couplages HMC des milieux poreux

Résumé : La modélisation du comportement hydromécanique chimique des milieux poreux saturés et non saturés est abordée au niveau microscopique et mésoscopique. Au niveau microscopique la modélisation des écoulements diphasiques est basée sur une représentation du réseau poral comme un ensemble de tubes dont les orientations et les rayons sont choisis sur un principe d'équivalence avec les pores. L'algorithme régissant la génération des conduits et les écoulements d'eau et de gaz est développé en utilisant un langage propre au code 3FLO. En utilisant cette approche directe on étudie ensuite le problème de l'impact de l'endommagement sur les propriétés effectives hydriques en milieu saturé et non saturé. Sans expliciter l'origine et les mécanismes de la naissance et de la propagation des fissures, on simule le développement d'une fissuration au cours d'un essai de compression triaxiale en générant numériquement une fissuration orientée préférentiellement dans la direction de la contrainte maximale en compression. Les simulations réalisées en milieu saturé et non saturé mettent en évidence l'impact de la fissuration sur la conductivité hydraulique, la courbe de rétention et la perméabilité relative.

Une dernière partie de la thèse est consacrée à la modélisation mésoscopique des couplages hydro-chimio-mécaniques par une approche de couplage indirecte ou dite de communication-passerelle. Selon cette méthodologie plusieurs codes spécialisés dans un domaine donné communiquent entre eux et sont capables de réaliser des calculs paramétrés par des champs externes. Un exemple est décrit ici par le couplage d'un code hydro-géochimie (HP1) et d'un code de calculs mécaniques développé sous Matlab. En utilisant cette méthodologie on traite d'abord le problème d'évolution du potentiel de gonflement d'une argile gonflante au cours d'une infiltration par une plume alcaline. Les simulations numériques mettent en évidence que pour la période étudiée la variation de la composition chimique est le mécanisme dominant en comparaison avec la dissolution des minéraux argileux. L'adaptation du modèle ELASGONF pour réaliser des calculs mécaniques paramétrés par des champs de concentration a permis de simuler la diminution de la pression de gonflement lors d'infiltration. En utilisant cette même approche, l'hypothèse de formation du gypse dans le tuffeau blanc par voie aérienne a été étudiée dans le cadre de la problématique de préservation des monuments historiques tels que les châteaux de la Loire. Dans les conditions de nos simulations, la formation du gypse par cette voie n'a pas été vérifiée.

Mots clés : milieu poreux, couplage Hydro-Mécano-Chimique, écoulement, percolation, communication-passerelle

Remerciement

Je souhaiterais sincèrement remercier mon directeur de thèse, Professeur Dashnor Hoxha, qui m'a proposé le sujet de thèse et il a réussi à me soutenir (et à me supporter !) pendant ces trois années. Je le remercie en particulier pour sa grande disponibilité, ses compétences et sa gentillesse. Je remercie également mes encadrants, Duc-Phi Do et Naima Belayachi pour leurs nombreux conseils scientifiques et leurs encouragements aux moments de difficultés au cours de la thèse.

J'adresse tous mes remerciements aux membres du jury devant lesquels j'ai l'honneur de présenter les travaux de ma thèse, au Professeur Jian-Fu Shao de Polytech'Lille pour avoir accepté de présider mon jury de thèse, ainsi qu'au Professeur Karim Ait Mokhtar de l'Université de La Rochelle et au Professeur Jean Vaunat de la Technical University of Catalonia (Espagne) pour avoir accepté d'être rapporteurs de cette thèse. Je remercie également Professeur Muzahim Al-Mukhtar de l'Université d'Orléans et Monsieur Kun Su - expert scientifique de Total d'avoir accepté de participer à mon jury de thèse.

J'adresse mes remerciements à Monsieur Mikael Motelica, qui m'a aidé dans les premiers pas sur la géochimie et à faire connaissances des outils numériques de la géochimie.

Je remercie cordialement tout le personnel de PRISME et de l'Université d'Orléans pour leur accueil chaleureux et leurs encouragements.

Merci aussi à ma famille, à mes amis Trà, Son, Laura, Duc, Hoà, Tu, Thien, Chau, Tho ... pour leurs soutiens tout au long de mes études.

Sommaire

Table des figures	13
Introduction générale.....	17
Chapitre I. Etat de l'art de la modélisation des couplages Hydro-Mécanique et Chimique	21
I.1. Introduction	22
I.2. Approches macroscopiques de modélisation du milieu poreux	23
I.2.1. Poromécanique des milieux poreux saturés [COU 04]	24
I.2.1.2. Description du milieu poreux.....	24
I.2.1.2. Lois de conservation et thermodynamique des milieux poreux.....	25
I.2.1.4. Lois de conduction de diffusion et de conservation de masse fluide.....	28
I.2.2. Milieux poreux partiellement saturés	28
I.2.2.1. Advection et diffusion aux milieux poreux	28
I.2.1.5. Concept de la contrainte effective.....	31
I.2.3. Approches macroscopiques alternatives de modélisation des couplages hydromécaniques	32
I.2.4. Approches macroscopiques de modélisation des couplages Hydro-Chimiques et Hydro-Mécano-chimiques.....	34
I.3. Approches microscopiques de modélisation des milieux poreux.....	35
I.3.1. Principes de bases de techniques de changement d'échelle	36
I.3.2. Propriétés effectives poromécaniques analytiques par champs moyens : problème poromécanique linéaire	37
I.3.3. Approches numériques de changement d'échelle	40
I.4. Conclusion.....	41
Annexe A. Méthodes classiques de la modélisation du comportement de milieux poreux linéaires	43

Chapitre II. Modélisation des écoulements diphasiques dans un milieu poreux par une approche discrète	49
II.1. Introduction.....	50
II.2. Estimateurs de la perméabilité du milieu poreux en saturé et non saturé	50
II.2.1. Ecoulement monophasique	50
II.2.2. Ecoulement diphasique	53
II.3. Proposition d'un modèle de réseaux de conduits pour l'écoulement diphasique dans les milieux poreux.....	55
II.3.1. Principales hypothèses	55
II.3.2. Génération d'un réseau poreux équivalent au milieu poreux et résolution du problème d'écoulement en saturé	57
II.3.3. Algorithme de résolution du problème de l'écoulement diphasique.....	60
II.4. Application : modélisation de l'écoulement en saturé et partiellement saturé du tuffeau blanc	62
II.4.1. Génération d'un réseau poral de porosité.....	63
II.4.2. Simulation d'écoulement saturé et estimation de la conductivité hydraulique.....	66
II.4.3. Estimation des propriétés hydriques effective du tuffeau en partiellement saturé.....	68
II.4.3.1. Simulation de la remontée capillaire	68
II.4.3.2. Simulation de l'isotherme de sorption-désorption.....	71
II.4.3.3. Test de la perméabilité relative.....	73
II.5. Conclusion	76
Annexe B. Capillarité des milieux poreux	78
Annexe C. Conductivité des différentes formes de section des conduits par la loi de Kozeny-Carman	82
Chapitre III. Modélisation de l'impact de l'endommagement sur les propriétés hydriques des milieux poreux en saturé et non saturé.....	87
III.1. Introduction	88
III.2. Résultats expérimentaux, observations et caractérisation de la fissuration.....	89

III.3. Modélisation de l'impact de la fissuration sur le comportement hydrique	91
III.3.1. Génération numérique de fissures dans un échantillon poreux	91
III.3.2. Caractéristiques des fractures induites.....	96
III.3.3. Evolution de la conductivité hydraulique avec la fissuration	98
III.3.3.1. Evolution de la conductivité hydraulique dans la direction d'évolution de la fissuration.....	99
III.3.3.2. Evolution de la conductivité hydraulique dans la direction perpendiculaire avec la direction de l'évolution de la fissuration.....	101
III.3.4. Evolution des propriétés hydriques avec la fissuration en non saturé	102
III.3.4.1. Tests de sorption-désorption à différents niveaux de fissuration.....	102
III.3.4.2. Tests de perméabilité relative à différents niveaux de fissuration	106
III.4. Conclusion	109
Chapitre IV. Modélisation hydro-mécano-chimique en saturé et partiellement saturé par couplage des codes de calculs.....	111
IV.1. Introduction	112
IV.2. Couplages H-M-C par codes passerelles : principes et problèmes	113
IV.3. Modélisation HMC de l'infiltration alcaline d'une argile gonflante.....	119
IV.3.1. Contexte de l'étude	119
IV.3.2. Caractéristiques du test : matériau, modèle numérique et chronologie de simulation	120
IV.3.3. Calcul H-C	122
IV.3.3.1. Principaux résultats du calcul H-C.....	123
IV.3.3.2 Conclusions sur le calcul H-C.....	128
IV.3.4. Modélisation du comportement mécanique de l'argile gonflante paramétrée par champs de concentrations	128
IV.3.4.1. Modèle mécanique des argiles gonflantes	129
IV.3.4.2. Résultats de la simulation numérique d'un essai d'infiltration par une solution hyperalcaline d'un échantillon MX80.....	132
IV.4. Modélisation hydro-chimique du tuffeau blanc	136

IV.4.1. Contexte de l'étude et travaux antérieurs	136
IV.4.2. Géométrie, conditions initiales et aux limites et propriétés considérées dans les simulations	139
IV.4.3. Simulation d'un essai de dissolution des gaz polluants dans un échantillon saturé de tuffeau blanc.....	141
IV.4.3.1. Conditions du test et contrôle numérique de la simulation	141
IV.4.3.2. Résultats et discussion	141
IV.4.3.3 Conclusions	149
IV.4.4 Modélisation H-C d'un mur de tuffeau soumis à une pluie acide.	149
IV.4.4.1. Conditions de la simulation.....	149
IV.4.4.2. Résultats et discussion	150
IV.4.4.3. Conclusions	157
IV.5. Conclusions	157
Annexe D. Equilibre et solubilité des minéraux	159
Annexe E. Cinétique des réactions hydro-chimique du test d'infiltration d'alcaline dans la bentonite MX-80	160
Annexe F. Cinétique des réactions hydro-chimique du test d'altération hydro-chimique de la pierre du tuffeau	161
Annexe G. Description du modèle simplifié du gonflement hydro-mécanique des argiles gonflantes ELASGONF	163
Conclusions et Perspectives	167
Références	171

Table des figures

Figure 1.1: Schéma d'interaction entre phénomènes.	22
Figure 1.2: Superposition de deux milieux continus pour modéliser le milieu poreux [COU 04]	24
Figure 2.1: Système discret formé par 15 plans [ZHU 06].	58
Figure 2.2: Exemple d'un réseau des pores et un extrait au centre de l'échantillon généré.	58
Figure 2.3: Front du liquide d'une conduite.	61
Figure 2.4: Définition de l'état hydrique des conduits et de la variable nodale de la présence du liquide.	62
Figure 2.5: Distribution porale par la porosimétrie [BEC 06].	64
Figure 2.6: Illustration schématique du concept de pipe-bundle comme un groupe de n conduits uniformes.	65
Figure 2.7: Schéma de calcul de la conductivité hydraulique en saturé régime permanente.	67
Figure 2.8: Schéma de calcul du test d'imbibition.	69
Figure 2.9: Etat hydrique des conduits dans le système de pores en fonction du temps : tubes bleus-vides, tubes verts-partiellement remplis, tubes rouges-remplis.	69
Figure 2.10: Evolution de la saturation en fonction de racine du temps.	70
Figure 2.11: Présentation schématique des conditions numériques du test isotherme d'adsorption.	71
Figure 2.12: La courbe de rétention d'eau (a) et son extrait (b).	72
Figure 2.13: Schéma de calcul du test de perméabilité relative.	74
Figure 2.14: Perméabilité relative en fonction de la saturation.	75
Figure 2.15: Réseau des pores saturés et connectés correspondant à des niveaux différents de succions.	76
Figure B.1: Illustration de l'interface entre deux phases I et II d'après [LAS 01].	79
Figure B.2: Remontée du liquide dans un capillaire.	79
Figure 3.1: Evolution de la longueur moyenne des fissures en fonction de la contrainte.	92

Figure 3.2: Evolution de géométrie et de la densité de fissures dans une roche granitique en fonction d'une contrainte déviatorique croissante de a) à e) et f la longueur accumulée des fissures [HOM00].....	93
Figure 3.3: Illustration schématique de l'algorithme de propagation d'une fissure après plusieurs phases de propagation.	95
Figure 3.4: Géométrie des fissures obtenue après chaque phase de simulation, tubes bleus-pores, tubes rouges fissures.....	96
Figure 3.5: Evolution de la porosité de l'échantillon.	97
Figure 3.6: Conductivité hydraulique en fonction de la porosité.	100
Figure 3.7: Conductivité hydraulique horizontales.	102
Figure 3.8.a: Courbes de rétention au cours d'imbibition pour des échantillons à différents niveaux de fissuration.	104
Figure 3.8.b: La sous-saturation au cours de la sorption pour la phase 5 et 9.	105
Figure 3.9.a: Courbes de rétention au cours de séchage pour des échantillons à différents niveaux de fissuration.	105
Figure 3.9.b: Evolution de la sous-saturation au cours de la désorption pour deux niveaux de fissuration.	105
Figure 3.10: Perméabilité relative à l'eau.	107
Figure 4.1: Schéma de principe du couplage HM-C par passerelles de communications.	115
Figure 4.2: Schéma de l'approche de modélisation du couplage HP1.	117
Figure 4.3: Géométrie et conditions aux limites du problème traité.	121
Figure 4.4: Evolution du pH en fonction du temps aux nœuds #1, #50 et #101.....	123
Figure 4.5: Vitesse de dissolution du Na-Montmorillonite.....	123
Figure 4.6: Vitesse de dissolution des autres minéraux à la cellule #50.....	124
Figure 4.7: Vitesse de dissolution des autres minéraux à la cellule #101.....	124
Figure 4.8: Profils du pH le long de l'échantillon à différents instants de simulation pour l'infiltration avec la solution NaOH 1M.	125
Figure 4.9: Vitesse de dissolution des minéraux en fonction des cellules (NaOH 1M).	126

Figure 4.10: Les quantités des minéraux dissous en fonction du temps dans la première cellule. .	126
Figure 4.11: Profils de concentration de Ca^{++} à différents instant de calcul pour l'infiltration avec NaOH 1M.	127
Figure 4.12: Profils de concentration de Na^+ à différents instant de calcul pour l'infiltration avec NaOH 1M.	127
Figure 4.13: Evolution de la pression de gonflement en cour d'un essai d'infiltration par des solutions à composition chimique variée (D'après [KAR 07]).	132
Figure 4.14: Simulation numérique de l'évolution de la pression de gonflement en fonction de la saturation.	134
Figure 4.15: Isovaleurs des contraintes à différents instants de calculs.	135
Figure 4.16: Prédiction de l'évolution de la pression de gonflement en fonction du temps.	136
Figure 4.17: Profils de présence des principaux minéraux le long d'un fragment de pierre de tuffeau dégradée à la surface. D'après [BEC 06].	138
Figure 4.18: Géométrie et conditions aux limites du problème H-C d'interaction du tuffeau blanc avec l'atmosphère polluée.	139
Figure 4.19: a) Evolution de pH aux nœuds d'observation ; b) Zoom de l'évolution de pH aux nœuds d'observation.	142
Figure 4.20: Profile du pH à différents instants de calcul.	142
Figure 4.21: L'évolution de la concentration de Ca^{+2} (figure 4.21a) aux nœuds observés et son extrait pour 3 jours (figure 4.21b).	143
Figure 4.22: La concentration de Ca^{+2} de tous les nœuds de l'échantillon à temps différents.	144
Figure 4.23: L'évolution de la concentration de C^{+4} (figure 4.23a) aux nœuds observés et son extrait (figure 4.23b).	144
Figure 4.24: La concentration de C^{+4} de tous les nœuds de l'échantillon à temps différents.	145
Figure 4.25: L'évolution de la concentration de S^{+6} (figure 4.25a) aux nœuds observés et son extrait (figure 4.25b).	145
Figure 4.26: La concentration de S^{+6} de tous les nœuds de l'échantillon à temps différents.	146
Figure 4.27: L'évolution de la concentration de Si^{+4} (figure 4.27a) aux nœuds observés et son extrait (figure 4.27b).	146

Figure 4.28: La concentration de Si^{+4} de tous les nœuds de l'échantillon à temps différents.	147
Figure 4.29: L'évolution de la cinétique de la calcite (figure 4.29a) aux nœuds observés et son extrait (figure 4.29b).	147
Figure 4.30: La cinétique de dissolution de la calcite de tous les nœuds de l'échantillon à temps différents.....	148
Figure 4.32: L'évolution de pH dans les nœuds.	151
Figure 4.33: La variation de la teneur en eau aux nœuds d'observation.....	151
Figure 4.34: La cinétique de dissolution de calcite aux nœuds d'observation.....	152
Figure 4.35: La cinétique de dissolution de quartz dans les nœuds.	152
Figure 4.36: La concentration des solutés dans les nœuds 6(a), 48(b) et 86(c).	153
Figure 4.37: L'évolution de la teneur en eau dans l'échantillon à des moments successifs de calculs avant, pendant et après une pluie.	154
Figure 4.38: L'évolution de pH dans l'échantillon à des moments successifs de calculs avant, pendant et après une pluie.	154
Figure 4.39: La vitesse de dissolution de la calcite dans l'échantillon	155
Figure 4.40: La vitesse de dissolution du quartz dans l'échantillon	155
Figure 4.41: La concentration de Ca^{+2} et S^{+6} dans l'échantillon.....	156
Figure 4.42: L'index de saturation du gypse au nœud 2.	156

Introduction générale

Les géomatériaux d'origine naturelle (tels que les sols ou les roches) ou artificielle (les bétons, les mortiers, ...), sont bien connus pour être des milieux poreux fortement hétérogènes avec des microstructures complexes. Cette nature hétérogène, mise en évidence par des études expérimentales de caractérisation à différentes échelles, conditionne en grande partie leur comportement macroscopique. De nombreux phénomènes observés à l'échelle macroscopique ont donc leur origine dans les mécanismes physico-chimiques à l'échelle microscopique. En particulier, en tant que matériaux poreux, le comportement des géomatériaux est conditionné par les caractéristiques du réseau poral tels que la forme, la taille, la densité et la distribution spatiale des pores. L'utilisation pratique des géomatériaux dans des applications industrielles modernes, en particulier dans les domaines du génie-civil, de l'exploitation pétrolière, de la séquestration du dioxyde de carbone ou encore du stockage des déchets radioactifs, justifie l'intérêt particulier du milieu scientifique (et pas seulement scientifique) que suscite la compréhension des relations entre leur structure et leur comportement. Si dans le passé, les connaissances empiriques obtenues par l'expérience humaine au cours des siècles, permettaient de satisfaire les besoins en ingénierie, des nouvelles applications faisant intervenir des temps caractéristiques de plusieurs générations (la problématique des stockages en est l'illustrateur le plus pertinent), demandent une compréhension profonde des mécanismes microscopiques et des couplages entre différents mécanismes à plusieurs échelles de temps et d'espace.

De par leur structure complexe, ainsi que de par les sollicitations simultanées ou successives qu'ils subissent (et qui peuvent être de natures très différentes : mécaniques, thermiques, hydriques, chimiques, électriques, ...) les géomatériaux sont par excellence des milieux poreux où des couplages complexes entre les phénomènes multi physiques peuvent avoir lieu. Des fluides résidant dans leur espace poral peuvent circuler selon des lois bien définies en étant toujours en interaction avec les minéraux autour, si bien qu'un couplage hydrique et chimique est une évidence au même titre que l'état hydrique, de plus les transformations chimiques des minéraux en interaction avec le fluide ont un impact (généralement) considérable sur le comportement mécanique global du matériau.

On comprend aisément, qu'afin de prédire la réponse mécanique et son évolution dans le temps de tels matériaux, il est nécessaire de comprendre et modéliser ces couplages multiphysiques dont le vecteur principal reste l'espace poral occupé par les fluides.

A cette fin, différentes approches peuvent être suivies :

- L'approche macroscopique considère le milieu poreux comme continu si bien qu'à tout moment et à tout point de l'espace, le comportement global est celui d'un volume représentatif suffisamment grand pour négliger les détails de la microstructure. La poromécanique classique initiée par les travaux fondateurs de Biot [BIO 41] et développée dans de nombreux travaux à nos jours [COU 95, COU 04] est un exemple pertinent de ce type d'approches. Partant des hypothèses classiques de la continuité locale et des lois thermodynamiques de conservation et de dissipation à l'échelle locale, ces approches permettent d'aborder avec succès de nombreux problèmes complexes liés aux milieux poreux.

- Alternativement, des approches microscopiques de modélisation des matériaux hétérogènes et poreux peuvent être utilisées. En se basant sur les informations au niveau de la microstructure et des mécanismes qui gouvernent le comportement des constituants à l'échelle microscopique, ces approches tentent de prédire le comportement macroscopique d'un matériau donné en utilisant les techniques dites de changement d'échelle. Parmi les schémas analytiques et semi-analytiques qui suivent cette approche, les plus connus sont sûrement ceux basés sur la solution d'Eshelby permettant dans de nombreux cas d'obtenir des relations constitutives explicites au prix d'une description souvent simplifiée de la microstructure [ESH 57, HAS 62, BUD 65, MOR 73, HIL 65].

- Les approches microscopiques numériques quant à elles sont en plein essor et prennent davantage de l'évolution rapide des outils numériques et des capacités de calculs. Ces approches permettent de dépasser les limites naturelles des schémas précédemment évoqués et de prendre en compte des structures très complexes ainsi que les interactions éventuelles entre les différents constituants et des différents phénomènes physiques. De telles approches permettent d'étudier le comportement des matériaux hétérogènes de façon unifiée via une modélisation directe de la microstructure y compris dans le cas où les comportements des constituants sont non-linéaires. Le principe de ces approches consiste à réaliser (assez souvent avec un code aux éléments finis) un calcul sur un volume élémentaire représentatif (VER) en adoptant quelques hypothèses sur la nature du VER (l'hypothèse de la périodicité par exemple). Bien que ces méthodes permettent de connaître en détails et précisément la réponse d'un VER, elles ont l'inconvénient de ne pas pouvoir aboutir (ou alors que très rarement et au prix d'efforts supplémentaires) à des lois constitutives macroscopiques.

Cette thèse s'inscrit dans la continuité des travaux de recherche réalisés dans l'axe de recherche Génie Civil du Laboratoire PRISME dans le domaine de modélisation macro et microscopique du comportement multi physiques des géomatériaux [HOX 07, BEL 12a]. Des modélisations

macroscopiques basés sur la mécanique des milieux poreux, étendue aux milieux partiellement saturés ont permis par exemple de répondre aux questions de l'évolution à long terme de l'état thermo-hydro-mécanique autour des ouvrages de stockage [HOX 07, SHA 98, HOX 04] ou encore ont permis de mettre en évidence le rôle des variations des conditions thermiques et hydriques dans la dégradation des monuments historiques en pierre calcaire [BEL 12b]. Des modélisations de nature microscopique ont été utilisées pour mettre en évidence le rôle de l'hétérogénéité de la microstructure dans la distribution des champs internes et de l'endommagement [WU 11] ou encore de mettre en lumière le rôle des interfaces entre constituants sur les propriétés effectives [DO 12].

Cette thèse s'inscrit dans la continuité de ces travaux de modélisation microscopique et macroscopique des milieux poreux avec pour objectif de contribuer à l'élucidation de certaines questions soulevées ou restées sans réponse par la recherche actuelle :

1 – Tout d'abord, concernant les écoulements en partiellement saturés, l'objectif de la thèse sera de contribuer à la compréhension des mécanismes de transfert des fluides dans le réseau poral, à celle du rôle de la capillarité dans ce transfert et enfin à la vérification des fondements microscopiques de certaines lois empiriques utilisées en pratique (telles que la courbe de rétention et la perméabilité relative décrites par exemple par les relations de Van Genuchten-Mualem [GEN 80, GHA 10]).

2 – Ensuite le problème du rôle de l'endommagement sur les propriétés hydriques effectives d'un matériau poreux partiellement saturé est adressé. Il s'agit d'un problème d'un intérêt croissant, particulièrement dans le domaine des stockages de tout type. De nombreuses évidences expérimentales et observations in situ montrent une augmentation de la perméabilité avec l'endommagement [SUZ 98, SOU 01, ODA 02, HOX 05, HOM 00] et l'anisotropie de cette évolution. Cependant la question de l'évolution de la courbe de rétention et/ou de la perméabilité relative avec l'endommagement n'est que rarement (si ce n'est jamais) posée.

La réponse à ces deux premières questions se trouve à l'échelle microscopique et notamment sur l'organisation (ou re-organisation dans le cas de l'endommagement) de l'espace poreux. Ces problèmes seront alors étudiés à cette échelle via des outils de calculs particuliers développés et/ou adoptés/adaptés.

3 – Les couplages hydro-chimio-mécaniques sont au cœur de plusieurs problèmes que nous abordons actuellement : la dégradation des pierres des monuments historiques, la capacité gonflante des argiles traitées ou celle des barrières ouvragées des stockages de déchets nucléaires ne sont que quelques applications qui font appel à ce type de couplage. A la différence des deux premières questions, le manque du recul et d'expérience dans le domaine nous obligent à nous placer dans ce

cas, à une échelle mésoscopique, en ouvrant la perspective d'une étude microscopique du problème dans de futurs travaux.

La thèse est organisée en 4 chapitres.

Dans le premier chapitre on présente d'abord succinctement des notions et des connaissances générales sur les milieux poreux. Ensuite, les approches utilisées dans la modélisation des milieux poreux sont décrites via un tableau synoptique de l'état d'art dans le domaine. Dans les approches macroscopiques, les équations principales de la poromécanique étendues aux milieux partiellement saturés ainsi que leur application pratique sont rappelées et discutées. Les approches microscopiques de modélisation des milieux hétérogènes et poreux sont ensuite analysées ainsi que les principes des méthodes de changement d'échelle.

Le deuxième chapitre est dédié à la modélisation du comportement hydraulique d'un milieu poreux saturé et partiellement saturé. Une approche directe de modélisation des écoulements en milieux poreux est proposée. L'idée de base de cette approche réside dans la représentation du réseau poral d'un matériau poreux par un système de conduits 1D équivalent. Pour cela le code commercial 3FLO (Itasca Ltd) a été adapté afin de prendre en compte les écoulements en milieu non-saturé. La méthodologie de modélisation proposée est alors appliquée à une pierre poreuse et les résultats sont comparés avec des résultats expérimentaux connus.

La problématique de la modélisation de l'impact de l'endommagement mécanique sur le comportement hydrique d'un matériau poreux est abordée dans le chapitre 3. En utilisant l'approche de modélisation proposée au chapitre 2 et en modélisant l'initiation et la propagation des fissures dans un matériau poreux par un algorithme numérique d'augmentation préférentielle de conduits, on évalue les propriétés hydrauliques d'un matériau à différents niveaux de fissuration et on les compare avec ses propriétés à l'état sain.

Le chapitre 4 présente une approche macroscopique de la modélisation des couplages Hydro-Chimique et Hydro-Mécano-Chimiques par une technique dite de « passerelles de communication » entre codes existants, spécialisés pour des domaines physiques différents. L'exemple du couplage d'un code de modélisation Hydro-Chimique (logiciel HP1) avec un code de calcul mécanique est présenté. Deux applications illustrent cette technique de modélisation : le problème d'évolution du potentiel de gonflement d'une argile suite à l'infiltration d'une solution hyperalcaline et le problème de formation du gypse par voie aérienne dans le tuffeau blanc.

Chapitre I. Etat de l'art de la modélisation des couplages Hydro-Mécanique et Chimique

I.1. Introduction

Dans ce premier chapitre, on s'intéressera aux couplages hydro-mécano-chimiques en négligeant la température, non pas parce que celle-ci n'est pas importante mais parce que dans une partie des applications considérées par la suite sa variation est faible. La conséquence directe de ceci sera souvent une simplification du problème en permettant le découplage des autres phénomènes de la thermique. Un schéma conceptuel de ces couplages HMC est montré sur la figure 1.1, où l'accent est mis sur le cadre applicatif de ces couplages qui est celui du vieillissement et de la durabilité des géomatériaux.

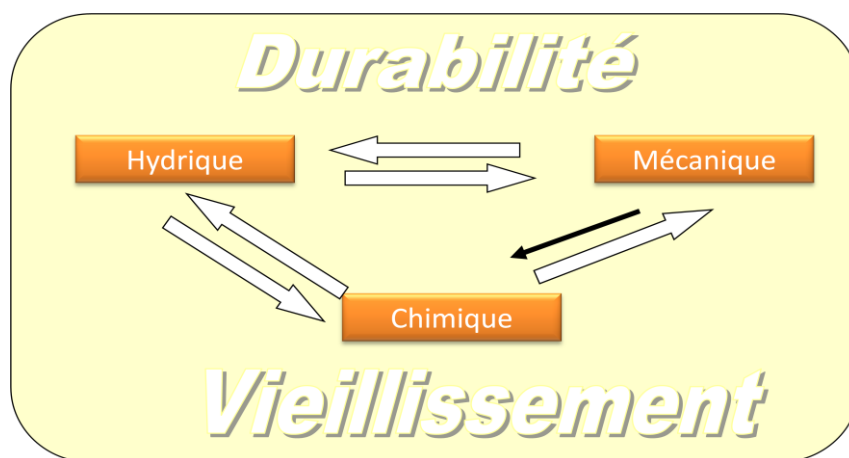


Figure 1.1: Schéma d'interaction entre phénomènes.

Ces phénomènes s'influencent mutuellement si bien que le changement des variables d'état liées à un des phénomènes est susceptible d'être accompagné par des variations des variables d'état liées aux autres phénomènes ou par la modification de la réponse du matériau vis à vis des sollicitations externes. Cependant, cette interaction et l'influence réciproque entre les phénomènes n'est pas symétrique dans la mesure où certains phénomènes ont un effet plus fort sur les autres. Dans le couplage Chimio-Mécanique par exemple, les phénomènes chimiques sont susceptibles d'influencer plus fortement le comportement mécanique que les actions mécaniques peuvent modifier le comportement chimique. La compréhension de ces différents phénomènes, en tenant compte des mécanismes couplés, est primordiale dans le cadre de la problématique de la durabilité des ouvrages et des structures. Bien que l'on prendra le temps au début de chaque chapitre de décrire plus en détails les approches de modélisation les plus répandues des différents domaines abordés, on résume ici quelques éléments permettant de se faire une idée de l'état de compréhension et de modélisation de ces

phénomènes. Deux types d'approches peuvent être distingués selon la description choisie du milieu poreux. Les approches macroscopiques supposent que le milieu poreux est homogène, continu et multiphasique, à l'échelle étudiée. Selon ces approches le volume élémentaire représentatif (VER) est une superposition de deux milieux continus : le squelette et le vide (ou particule de fluides) [COU 04], tel qu'à un instant donné, une particule élémentaire appartient à la fois au squelette et au fluide. Le comportement du milieu à l'échelle macroscopique est alors établi à partir des outils classiques de la thermodynamique. Pour les approches microscopiques, les phases de fluide et de solide constituent des éléments distincts du volume élémentaire du milieu et une particule matérielle peut exclusivement appartenir, soit au réseau de vides, soit au réseau du squelette du solide. Le comportement global est alors déduit (souvent) par la prise moyenne des champs locaux.

Les matériaux poreux se composent d'un assemblage de grains, ou fibres (le squelette) et d'un espace connecté entre les grains ou fibres (l'espace porale ou les pores) qui peut être occupé par du gaz, de la vapeur ou du liquide.

Classiquement on définit la porosité et la saturation S_i d'un fluide i par

$$n = \frac{V_{vide}}{V_{total}} \quad (1.1)$$

$$S_i = \frac{V_i}{V_{vide}} \quad i = eau, air \quad (1.2)$$

où V_{vide} , V_{total} et V_i sont respectivement le volume des vides, le volume total et le volume occupé par le fluide i .

I.2. Approches macroscopiques de modélisation du milieu poreux

En raison de la complexité de la constitution des milieux poreux (la forme, la disposition, la caractéristique cristalline des grains, la forme de l'espace des pores connecté ...), l'utilisation d'une approche pour simplifier le milieu est indispensable pour modéliser son comportement. Cette simplification commence par la définition d'un Volume Élémentaire Représentatif (VER), comme un volume minimal contenant une quantité de squelette et de vide suffisamment grande pour représenter certaines propriétés intrinsèques du matériau et dans lequel le matériau apparaît homogène. L'effet du changement d'échelle par l'utilisation d'un

VER est la continuité et l'homogénéité du milieu poreux. Les paramètres intrinsèques et les variables d'état sont alors ceux définis dans le VER.

I.2.1. Poromécanique des milieux poreux saturés [COU 04]

On illustre l'approche macroscopique initialement adoptée par Biot [BIO 41, BIO 57] et étendue par Coussy [COU 91, COU 04] via une description succincte de la théorie de la poromécanique des milieux poreux partiellement saturés. Nous ne présenterons pas de manière exhaustive les formulations mathématiques, mais un rappel des équations régissant le comportement d'un milieu poreux sera fait, suivant (principalement) la référence [COU 04] que le lecteur intéressé peut consulter pour une description détaillée de la théorie.

I.2.1.2. Description du milieu poreux

A cette échelle, les détails de la structure géométrique du milieu ne sont pas décrits. A chaque instant le VER où sont définis les variables et les fonctions d'état, contient un réseau squelettique et un réseau poral (figure 1.2) où peuvent résider plusieurs phases fluides, capables d'avoir ou non un échange de matière avec l'extérieur [COU 91, COU 04].

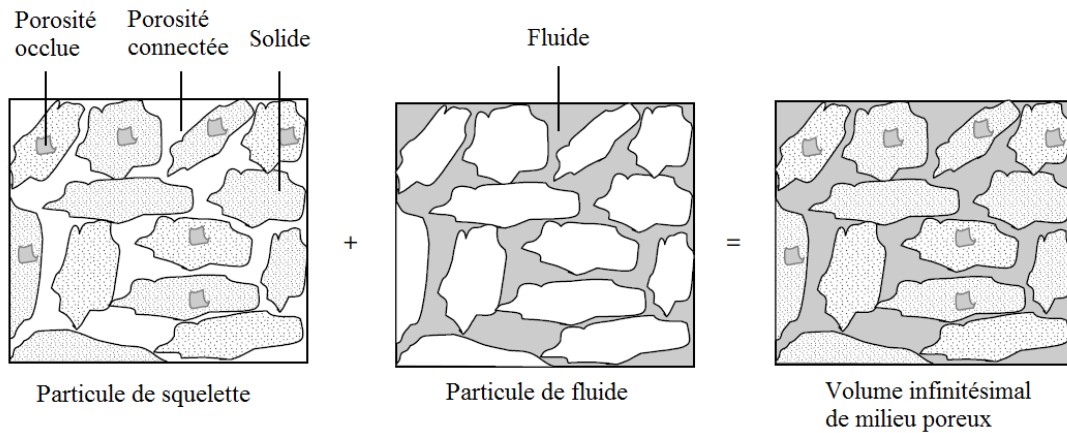


Figure 1.2: Superposition de deux milieux continus pour modéliser le milieu poreux [COU 04]

On considère d'abord un milieu poreux saturé, de porosité eulérienne n , pour lequel le fluide occupe un volume $n.d\Omega_t$ dans la configuration actuelle. Le volume initial $d\Omega_0$ et la porosité lagrangienne ϕ (porosité par rapport donc au volume initial) sont liés par :

$$n.d\Omega_t = \phi.d\Omega_0 \quad (1.3)$$

En adoptant l'hypothèse des transformations infinitésimales ($\|\nabla \xi\| \ll 1$), le tenseur de déformation de Green-Lagrange peut être remplacé par sa forme linéarisée ε :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\nabla \boldsymbol{\xi} + {}^t\nabla \boldsymbol{\xi}); \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i}\right) \quad (1.4)$$

En notant ϵ , la dilatation du volume de squelette et ϵ_s , on obtient sans difficulté :

$$\epsilon = (1 - \phi_0)\epsilon_s + \phi - \phi_0 \quad (1.5)$$

I.2.1.2. Lois de conservation et thermodynamique des milieux poreux

Bien que la thermodynamique se limite aux évolutions réversibles et infiniment lentes entre les états d'équilibre successives des systèmes homogènes, le postulat de l'état local, permet d'étendre les résultats de la thermostatique à tous les systèmes discrets et continus, et toutes les évolutions réversibles et irréversibles.

La première loi de la thermodynamique (la loi de conservation d'énergie) stipule que lors d'une évolution infiniment lente, d'un matériau d'un état d'équilibre homogène à un autre, la variation de l'énergie interne du système correspond à la somme du travail mécanique effectué par les forces extérieures sur le système et la fourniture de chaleur externe. Appliquée à un volume Ω_t de matériau poreux cette loi s'écrit :

$$\frac{d^s}{dt} \int_{\Omega_t} \rho_s (1 - n) \left(e_s + \frac{1}{2} (V^s)^2 \right) d\Omega_t + \frac{d^f}{dt} \int_{\Omega_t} \rho_f n \left(e_f + \frac{1}{2} (V^f)^2 \right) d\Omega_t = \mathcal{P}_{f,T}(V^s, V^f) + Q^0 \quad (1.6)$$

Où e_s, e_f sont les énergies internes de la matrice solide et du fluide.

Q^0 est l'énergie fournie par l'extérieur.

$\mathcal{P}_{f,T}(V^s, V^f)$ est la puissance mécanique.

V^s, V^f sont les vitesses de la matrice solide et fluide.

La deuxième loi de la thermodynamique postule l'existence d'une fonction additive appelée entropie telle que la variation de l'entropie d'un système dans une évolution infiniment lente entre deux états d'équilibre, est égal à l'approvisionnement externe de l'entropie.

La balance d'entropie montre que la vitesse de changement de l'entropie ne peut pas être inférieure à l'entropie fournie de l'extérieur.

$$\frac{d^s}{dt} \int_{\Omega_t} \rho_s (1 - n) s_s d\Omega_t + \frac{d^f}{dt} \int_{\Omega_t} \rho_f n s_f d\Omega_t \geq \int_{\partial\Omega_t} -\frac{q \cdot n}{T} da \quad (1.7)$$

Où ρ_s, ρ_f sont respectivement les densités intrinsèques de la matrice et du fluide.

s_s, s_f sont l'entropie spécifique de la matrice solide et du fluide.

Depuis l'équation (1.7), l'équation de balance d'entropie Lagrangienne est exprimée :

$$\frac{dS}{dt} \geq -\nabla_x \cdot \left(s_f \mathbf{M} + \frac{\mathbf{Q}}{T} \right) \quad (1.8)$$

où S est la densité totale Lagrangienne d'entropie par unité de volume $d\Omega_0$, décrite par:

$$S d\Omega_0 = (\rho_s(1-n)s_s + \rho_f n s_f) d\Omega_t \quad (1.9)$$

L'énergie libre définit l'état thermodynamique (ou énergétique) d'un milieu poreux. Pour un comportement réversible elle ne dépend que des variables d'état :

$$\Psi = E - TS \quad (1.10)$$

La dissipation de l'énergie peut s'écrire sous la forme additionnelle de trois termes :

$$\Phi = \Phi_s + \Phi_f + \Phi_{th} \geq 0 \quad (1.11)$$

Où Φ_s est la dissipation de la matrice solide.

Φ_f est la dissipation de fluide.

Φ_{th} est la dissipation thermique.

En particulier la dissipation de la matrice solide peut s'écrire sous la forme:

$$\Phi_s = \pi : \frac{d\Delta}{dt} + p \frac{d\phi}{dt} - S \frac{dT}{dt} - \frac{d\Psi}{dt} \geq 0 \quad (1.12)$$

Avec π , le tenseur de contrainte totale de Piola-Kirchhoff, Δ le tenseur de déformation de Green Lagrange, p la pression de fluide et ϕ la porosité lagrangienne.

Pour une transformation réversible (sans dissipation) en combinant la première et la deuxième loi de la thermodynamique, on obtient les équations d'état:

$$\pi = \frac{\partial \Psi}{\partial \Delta}; \quad p = \frac{\partial \Psi}{\partial \phi}; \quad S = -\frac{\partial \Psi}{\partial T} \quad (1.13)$$

En tenant compte de l'énergie fournie au volume de système élémentaire thermodynamique ouvert $d\Omega_0$, la dissipation peut s'écrire également par :

$$\Phi_s = \pi : \frac{d\Delta}{dt} + \mu_f \frac{dm_f}{dt} - S \frac{dT}{dt} - \frac{d\Psi}{dt} \geq 0 \quad (1.14)$$

qui conduit aux équations d'état suivantes:

$$\pi = \frac{\partial \Psi}{\partial \Delta}; \quad \mu_f = \frac{\partial \Psi}{\partial m_f}; \quad S = -\frac{\partial \Psi}{\partial T} \quad (1.15)$$

Où μ_f est le potentiel chimique spécifique de fluide.

m_f est la masse de fluide entrée dans le volume $d\Omega_t$.

De façon similaire, on peut écrire la dissipation du fluide sous la forme :

$$\phi_f = \left(-\nabla_x p + \rho_f(f - \gamma^f) \right) \mathcal{V} \geq 0 \quad (1.16)$$

Il est clair que pour les phénomènes isothermes que nous considérons la dissipation thermique sera nulle.

En élasticité, sous les hypothèses de déformations infinitésimales, l'équation de dissipation du squelette de solide est nulle et la déformation de Green Δ_{ij} et la contrainte de Piola-Kirchhoff peuvent être remplacées par le tenseur de déformation linéaire et contrainte de Cauchy :

$$\sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} + p d\phi - S_s dT - d\Psi_s = 0 \quad (1.17)$$

Après développement de l'énergie libre par rapport à un état de référence (indiqué par 0), la loi de comportement thermo-poro-élastique linéaire s'écrit explicitement sous la forme suivante [COU 04] :

$$\sigma_{ij} - \sigma_{ij}^0 = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} - b_{ij}(p - p_0) - C_{ijkl} \alpha_{kl}(T - T_0) \quad (1.18)$$

$$\phi - \phi_0 = b_{ij} \varepsilon_{ij} + \frac{p - p_0}{N} - 3\alpha_\phi(T - T_0) \quad (1.19)$$

$$S_s - S_s^0 = C_{ijkl} \alpha_{kl} \varepsilon_{ij} - 3\alpha_\phi(p - p_0) + \frac{C}{T_0}(T - T_0) \quad (1.20)$$

Où

C_{ijkl} est la $ijkl^{\text{ème}}$ composante du tenseur de rigidité élastique.

α_{kl} est la $kl^{\text{ème}}$ composante du tenseur des coefficients de dilatation thermique.

C est la chaleur spécifique volumique du squelette.

b_{ij} est la $ij^{\text{ème}}$ composante du tenseur de Biot

$1/N$ est l'inverse de module Biot du solide.

$3\alpha_\phi$ est le coefficient de dilatation thermique volumique.

$\sigma_{ij}, \sigma_{ij}^0$ sont les $ij^{\text{ème}}$ composantes des tenseurs de contrainte actuelle et initiale.

p, p_0 sont les pressions actuelle et initiale.

T_0 est la température initiale.

Dans des conditions isothermes, le dernier terme, proportionnel à la variation de la température, est strictement égal à zéro.

I.2.1.4. Lois de conduction de diffusion et de conservation de masse fluide

A l'échelle macroscopique on accepte assez largement que la conduction hydraulique soit gouvernée par la loi de Darcy à l'état saturé en eau (similaire à la loi de Fourier pour la thermique). La dissipation φ_f , associée à l'écoulement visqueux dans un milieu poreux peut s'écrire :

$$\varphi_f = \mathcal{L} \cdot \mathcal{V} \quad (1.21)$$

Où : $\mathcal{V} = n \cdot (V^f - V^s)$; $\mathcal{L} = -\nabla_x p + \rho_f(f - \gamma^f)$ sont respectivement le vecteur de filtration et la force qui produit la filtration. La loi de Darcy lie linéairement le flux $\mathcal{V}$ et la force $\mathcal{L}$:

$$\mathcal{V} = K \cdot \mathcal{L} \quad (1.22)$$

$$n \cdot (V^f - V^s) = K[-p + \rho_f(f - \gamma^f)] \quad (1.23)$$

Où K est la perméabilité positive pour garantir que la dissipation soit positive :

$$\varphi_f = \frac{[n \cdot (V^f - V^s)]^2}{K} = \frac{\mathcal{V}^2}{K} \quad (1.24)$$

avec V^s et V^f , respectivement la vitesse de la matrice solide et celle de la matrice du fluide.

La conservation de la masse de fluide est décrite sous forme différentielle :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_a^f) + \text{div}(\rho_a^f V^f) = 0 \quad (1.25)$$

Où $\rho_a^f = \phi \rho^f$, ϕ est la porosité et ρ^f est la masse volumique du fluide.

I.2.2. Milieux poreux partiellement saturés

La théorie de la poromécanique décrite ci-dessus peut être étendue aux milieux poreux multiphasiques où des équations concernant les fluides doivent cette fois-ci prendre en compte, non seulement les différentes phases, mais aussi leurs interfaces.

I.2.2.1. Advection et diffusion aux milieux poreux

Dans le cas de milieux partiellement saturés on s'intéresse d'une part aux propriétés hydriques, notamment à la courbe de rétention et à la perméabilité effective et d'autre part aux conséquences mécaniques de la présence de plusieurs phases fluides.

La courbe de rétention d'eau présente la relation entre la saturation en eau et la succion (ou l'humidité relative) et dans de nombreuses approches de modélisations macroscopiques diphasiques constitue une donnée d'entrée du problème. En pratique des expressions empiriques issues de résultats expérimentaux sont utilisés, la plus connues étant celles de Brooks Corey, Haverkamp, Van Genuchten et Mualem [GEN 80, VOG 00, DIR 96, GHA 10]. Par exemple, l'expression de Van Genuchten fait le lien entre la succion et la saturation effective S_{ef} définie en fonction de la teneur en eau θ_s à l'état saturé et à la teneur en eau résiduelle θ_r :

$$S_{ef} = \frac{\theta(h) - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (1.26)$$

Où : $\theta(h)$ est la teneur en eau à une succion h .

Avec cette notation l'expression de van Genuchten s'écrit :

$$\theta(h) = \begin{cases} \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + (\alpha|h|)^n]^m}, & h < 0 \\ 1, & h \geq 0 \end{cases} \quad (1.27)$$

Où : h est la pression d'eau (kPa), $h < 0$ signifie que le milieu est non saturé et $h \geq 0$ est le cas d'un milieu saturé, α , n , m ($m = 1 - 1/n$) sont des paramètres empiriques.

Selon ces modèles, la perméabilité à l'eau dépend de la saturation du matériau. Dans le cas particulier où la pression de gaz est constante, l'écoulement dans la zone non saturée est régi par l'équation de Richards :

$$\frac{\partial \theta(h)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \frac{\partial h}{\partial z} - K(h) \right] \quad (1.28)$$

La perméabilité effective est donc dans le cas des milieux partiellement saturés, une fonction de la pression relative et de la perméabilité intrinsèque :

$$K(h) = K_{sat} K_r(h) \quad (1.29)$$

La perméabilité relative est exprimée en fonction de la saturation effective :

$$K_r = S_{ef}^{1/2} \left[1 - (1 - S_{ef}^{1/m})^m \right]^2 \quad (1.30)$$

Dans le cas d'une pression non constante de la phase non-mouillante un modèle souvent utilisé est le modèle semi-empirique de Buckley – Leverett. Ce modèle est conçu pour deux phases liquides incompressibles et utilise la loi de Darcy généralisée avec k_α et k_β étant respectivement les perméabilités relatives des phases α et β . Ces perméabilités tiennent

comptent de la réduction de la section de passage due à la présence de l'autre phase. Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement sont décrites de la façon suivante :

$$\phi \frac{\partial s}{\partial t} + \text{div} \vec{v}_\alpha = 0 ; -\phi \frac{\partial s}{\partial t} + \text{div} \vec{v}_\beta = 0 \quad (1.31)$$

$$\vec{v}_\alpha = -\frac{Kk_\alpha}{\mu_\alpha} \overrightarrow{\text{grad}} P_\alpha ; \vec{v}_\beta = -\frac{Kk_\beta}{\mu_\beta} \overrightarrow{\text{grad}} P_\beta \quad (1.32)$$

$$P_\beta - P_\alpha = P_c(s) = \frac{\sigma \cos \theta}{\sqrt{K/\phi}} J(s) \quad (1.33)$$

La pression capillaire macroscopique a la forme de la loi de Laplace pour le cas d'un ménisque individuel avec ϕ étant la porosité, $\vec{v}$ la vitesse de l'écoulement dans le milieu poreux, μ la viscosité dynamique, S la saturation de la phase, K la perméabilité, P est la pression de la phase, σ est la tension surfacique, θ est l'angle de contact, $P_c(s)$ est la pression capillaire macroscopique et t est le temps. Les perméabilités relatives k_α et k_β sont des fonctions empiriques de la saturation. En remplaçant les expressions de vitesses à l'équation (1.32), on obtient :

$$\text{div}(\lambda \text{grad} P) = -\text{div}(\lambda_\beta \text{grad} P_c) \quad (1.34)$$

$$\phi \frac{\partial s}{\partial t} - (\lambda \text{grad} P + \lambda_\beta \text{grad} P_c) \text{grad} F = -\text{div}(\lambda_\beta F \text{grad} P_c) \quad (1.35)$$

$$\lambda_\alpha(s) = Kk_\alpha(s)/\mu_\alpha ; \lambda_\beta(s) = Kk_\beta(s)/\mu_\beta ; \lambda = \lambda_\alpha + \lambda_\beta ; F(s) \equiv \lambda_\alpha/\lambda \quad (1.36)$$

Avec $F(s)$ étant la fraction volumique de la phase α dans le flux total.

Pour le cas monodimensionnel, on a :

$$\lambda(s) \frac{\partial P}{\partial x} = -\lambda_\beta(s) \frac{\partial P_c}{\partial x} - U(t) \quad (1.37)$$

$$\phi \frac{\partial s}{\partial t} + U(t) \frac{\partial F(s)}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_\beta(s) F(s) \frac{\partial P_c(s)}{\partial x} \right) \quad (1.38)$$

Où $U(t)$ est la vitesse totale des deux phases.

Ce modèle a pour limites les hypothèses de simplification qu'il utilise. L'une d'elles provient de l'utilisation de la théorie des écoulements phénoménologiques dans les milieux poreux, et sans lien apparent avec sa structure interne. Les deux phases sont considérées comme étant deux milieux continus, homogènes et se croisent en chaque point de l'espace du milieu. De

plus, le fluide diphasique est homogène, sa taille d'hétérogénéité n'est donc pas prise en compte. Les paramètres hydrodynamiques du système tels que la perméabilité relative et la pression capillaire ne dépendent que de la saturation. Ainsi, le modèle classique de Buckley-Leverett (1942) utilise une approche sans structure apparente mais avec des paramètres hydrodynamiques tenant compte de la structure [PAN 03].

Le transport de masse des fluides peut aussi avoir lieu par diffusion et dispersion. Le flux diffusif est généralement décrit par la loi de Fick [DAG 00] :

$$q_v = -D_v \text{grad} C \quad (1.39)$$

Où : q_v est le flux diffusif du fluide.

D_v est la diffusivité du fluide dans le matériau considéré.

C est la concentration de l'espèce considérée.

I.2.1.5. Concept de la contrainte effective

L'équation (1.18) suggère que la déformation du matériau poreux chargé mécaniquement par une contrainte et une pression est identique à la déformation d'un même matériau chargé uniquement par une contrainte effective égale à la somme de la contrainte mécanique et de la pression liquide modifiée par le tenseur de Biot. La notion de contrainte effective est initialement proposée en mécanique des sols par Terzaghi [TER 34] et exprime la répartition du chargement entre le solide et le fluide. Pour un sol saturé, la contrainte effective de Terzaghi est décrite par :

$$\sigma' = \sigma - p_l \mathbf{I} \quad (1.40)$$

Où σ et p_l sont respectivement la contrainte totale et la pression interstitielle de la phase liquide et $\mathbf{I}$ est le tenseur d'identité d'ordre 2.

La contrainte effective de Biot pour un poreux saturé s'écrit de façon similaire en faisant intervenir le coefficient de Biot :

$$\sigma' = \sigma - b p_l \mathbf{I} \quad (1.41)$$

Où $b = 1 - \frac{K}{K_s}$ est le coefficient de Biot.

Dans le cas non saturé, le concept de contrainte effective est une extension de la contrainte effective en milieu saturé. Bishop [BIS 59] a proposé initialement d'écrire la contrainte effective en milieu partiellement saturé sous la forme :

$$\boldsymbol{\sigma}' = \boldsymbol{\sigma} - p_g \mathbf{I} + \chi(p_g - p_l) \mathbf{I} \quad (1.42)$$

Où p_g, p_l sont les pressions gazeuse et liquide. La fonction χ a une valeur entre 0 et 1 correspondant respectivement à un sol sec et à un sol saturé. A l'état saturé, l'équation (1.42) devient l'équation de Terzaghi (1.40). D'autres relations de contraintes effectives similaires à la relation de Bishop, sont proposées pour les milieux partiellement saturés par plusieurs auteurs. Il s'agit souvent des expressions issues des résultats expérimentaux sur des roches ou des sols faisant χ une fonction de la succion [LEW 82, GRA 01, KHA 98, KHA 04, HOX 07]. En se basant sur une analyse thermodynamique rigoureuse, Coussy [COU 95] a proposé de décrire la contrainte effective de la forme suivante :

$$d\boldsymbol{\sigma}' = d\boldsymbol{\sigma} + [dp_g - S_e dp^c] \mathbf{I} \quad (1.43)$$

Où : $p^c = p_g - p_l$

D'autres expressions de la contrainte effective sont établies à partir d'analyses microscopiques conduisant souvent à des expressions similaires aux expressions macroscopiques avec des coefficients qui sont des fonctions de la microstructure [CHA 98, CHA 02, GIL 02, LI 03, JIA 04, GRA 09].

Grâce à sa simplicité et à son applicabilité aux milieux saturés ou partiellement saturés, la contrainte effective reste toujours le moyen de base des couplages hydromécaniques traduisant l'impact des fluides sur le comportement mécanique. Retenons néanmoins que la contrainte effective reste un concept rhéologique et son utilisation dans l'écriture des fonctions seuil est une facilité pratique plus qu'un résultat d'une quelconque théorie rigoureuse.

I.2.3. Approches macroscopiques alternatives de modélisation des couplages hydromécaniques

Au-delà du couplage hydromécanique décrit dans le cadre poromécanique et assuré dans le cas élastique par le coefficient (et plus généralement, le tenseur) de Biot et le module de Biot, plusieurs approches complémentaires et alternatives de couplages hydromécanique sont proposées dans la littérature, notamment en milieu partiellement saturé. A l'heure actuelle des approches dites à deux pressions permettent de décrire aisément des problèmes complexes en mécanique des sols et des roches partiellement saturés. L'idée de base, initiée par les travaux de l'équipe de Barcelone (voir par exemple [ALO 90] dans la description de ce qui a été

nommé par la suite Basic Barcelona Model) consiste à ajouter dans les variables d'état, la succion. Il est alors possible selon cette approche de décrire non seulement les déformations, y compris celles induites par un gonflement, mais aussi les fonctions seuils.

Dans un certain nombre de travaux publiés dans la littérature, qui généralement ne prône pas la poromécanique comme base de travail, un couplage entre la mécanique et l'hydrique est réalisé via des passerelles reliant deux codes de calculs : un code de calcul fluide et un code de calcul mécanique [GEN 03, MAR 12]. Le couplage est alors réalisé par un appel séquentiel de chacun des codes qui envoient comme résultat les champs respectifs (mécaniques ou hydriques) calculés. En retour chacun des codes peut utiliser les champs résultats de l'autre comme des paramètres modifiant le comportement hydrique ou mécanique [ULM 03]. Un certain nombre de codes de calcul commerciaux utilisent ce type de couplage sous une forme plus ou moins sophistiquée [FLA 11]. L'avantage de cette approche de couplage externe réside dans la possibilité de coupler n'importe quel modèle mécanique avec n'importe quel modèle fluide. Par conséquent, ce type de couplage de part la séparation des problèmes physiques, conduit à une réduction du nombre de degrés de liberté du problème dans chaque calcul et permet d'aborder des problèmes à grandes échelles comme c'est le cas souvent par exemple dans l'industrie pétrolière.

En dehors du cadre poromécanique déjà discuté, les couplages hydromécaniques portent souvent sur le rôle de la mécanique dans la redistribution des pressions de pores dans les massifs rocheux ou dans les structures, soit par la variation de la porosité, soit par une modification sensible de la perméabilité due à un endommagement par fissuration [HOX 99, SHA 99, SOU 01, MAR 94, HOX 12]. La problématique de l'EDZ autour des ouvrages souterrains est une expression (peut être la plus discutée dans la littérature) de ce couplage. A partir des essais de laboratoire et in situ, Souley et al [SOU 01] ont montré que dans l'EDZ, la perméabilité augmente jusqu'à 6 ordres de grandeurs en comparaison avec la roche saine, due à la fracturation et à la fissuration qui se développe autour des ouvrages. Des résultats similaires ont été reportés par d'autres auteurs sur d'autres sites. Par ailleurs, notamment dans la problématique des réservoirs, la perméabilité et l'écoulement des fluides sont souvent attribués exclusivement aux réseaux de fractures et de fissures en négligeant la perméabilité de la matrice [MAR 07]. Le comportement des fractures (leur ouverture ou fermeture en fonction de la pression) et leur évolution (scellement partiel ou propagation et naissance de nouvelles fractures) sont alors les vecteurs principaux qui contrôlent les écoulements et le champ de pression autour des ouvrages.

I.2.4. Approches macroscopiques de modélisation des couplages Hydro-Chimiques et Hydro-Mécano-chimiques.

Les approches macroscopiques des couplages hydro-mécano-chimiques sont souvent une extension du cadre classique de la poromécanique décrit précédemment [LOR 02, GHA 03, FAB 12].

En génie civil, ce type de couplages est étudié en relation avec la problématique de la durabilité des ouvrages de Génie Civil [MOH 12, ZHA 08, ULM 03], notamment l'attaque acide des bétons [ULM 05, ZHA 08] et le comportement des argiles gonflantes [MOK 10, DOR 03, CAR 12, MON 05, LIU 05, MOI 02]. La difficulté de la tâche de modélisation de tels couplages réside dans la complexité des réactions géochimiques dont les temps caractéristiques peuvent être très différents des temps caractéristiques des phénomènes hydriques et mécaniques. En même temps, cela permet souvent de découpler la résolution de tels problèmes et donc, d'utiliser une stratégie de couplage de phénomènes par des passerelles entre différents codes de calculs [CAR 09, DIE 05].

Les transformations des espèces chimiques que nous considérons ont lieu dans des solutions peuplant les pores, ce qui sous-entend la présence du fluide poral chaque fois qu'on parle de ces couplages. Dès lors, l'interaction entre la phase solide et les ions se trouvant dans l'espace poral peut conduire dans la dissolution de la première ou à la précipitation de ces dernières. Dans cette interaction, l'impact de l'état mécanique sur le sens des transformations et de leurs cinétiques, du moins dans la plage des contraintes, des périodes de temps et de concentrations auquel nous nous intéressons, est minimal, négligeable, voire inexistant au-delà peut être de certaines réactions mécano-chimiques citées par certains auteurs [HOX 06, AUV 08] ou du phénomène (un peu) plus connu de la dissolution sous contrainte [RUT 83, GRA 93].

Les transformations chimiques peuvent en revanche, avoir un très fort impact sur le comportement mécanique. Cet impact des phénomènes chimiques sur le comportement mécanique est multi facettes : d'abord, les transformations minéralogiques peuvent conduire au remplacement de certains minéraux avec d'autres [GAU 04, BLA 10, LER 11] conduisant in fine à la modification des propriétés mécaniques des matériaux. Ensuite, la dissolution de certains minéraux comme la calcite crée d'une part, les conditions pour une recombinaison des ions et la formation de nouveaux minéraux et d'autre part, modifie l'espace poreux par la création de nouveaux pores [ZHA 08, ULM 03]. L'impact de la chimie sur l'hydraulique et la mécanique se manifeste finalement lors de la précipitation de certains minéraux, lorsque les

conditions sont réunies. Ces minéraux se déposant dans l'espace poreux peuvent significativement modifier les chemins d'écoulement (c'est le cas par exemple de la cicatrisation de fractures dans les massifs rocheux) [EDV 99, MAH 06] ou au contraire, par la pression de cristallisation peuvent créer de nouvelles fissures qui sont souvent considérées comme étant les éléments déclenchant ou aggravant l'endommagement/dégradation des matériaux de construction. C'est par exemple le cas des différents sels et tout particulièrement du NaCl et du CaSO₄ qui semblent jouer un rôle tout à fait distingué dans le vieillissement des bétons et des pierres de bâtiments historiques. Enfin une forme particulière de l'impact de la chimie sur le comportement mécanique est le phénomène du gonflement osmotique des argiles où, selon le fait que la charge ionique dans l'espace poreux, notamment celui entre les feuillets, augmente (respectivement diminue), le matériau se contracte (respectivement se dilate) [LOR 02, SAL 06, ONA 07, DOM 12a, 12b].

La littérature publiée est très riche en études géochimiques sur les sujets des transformations minéralogiques à basse température et à basse pression lors du processus de vieillissement des matériaux [VAN 03, SAM 08, FRI 10, JAC 10, ULM 03, ULM 05]. Un bilan détaillé de ce type d'études n'est pas dans les objectifs de cette thèse et on se limitera à faire remarquer qu'au niveau des outils de modélisation géochimique, des codes de calculs performants, qui font la référence dans le domaine, sont en accès libre (exemple PHREEQC).

Si l'eau porale est le lieu des réactions chimiques, elle contribue également au transport des ions par advection et diffusion en recréant de nouvelles conditions d'équilibres chimiques. De ce point de vu le couplage hydro-chimique dans le sens Hydro→Chimie est un couplage fort.

En revanche le couplage chimio-hydrique (dans le sens Chimie→Hydro) est moins fort dans la mesure où la pression osmotique et la diffusion de Fick, par différence de concentration des espèces chimiques et/ou ioniques, le plus souvent (mais pas toujours !!), ne sont que des facteurs de deuxième ordre dans le problème hydrique et de transport de masses.

I.3. Approches microscopiques de modélisation des milieux poreux

Les approches microscopiques tentent de déduire la réponse macroscopique d'un milieu hétérogène en exploitant les informations sur les propriétés, les caractéristiques géométriques et la distribution des constituants à l'échelle où les grains et les pores sont des éléments distincts. En utilisant les techniques de changement d'échelle, le milieu hétérogène devient

alors un milieu homogène équivalent à une échelle supérieure à celle de description des constituants. Ces techniques de changement d'échelle (ou d'homogénéisation) ont de nos jours des applications dans tous les domaines incluant les matériaux hétérogènes multiphasiques [ZAO 02] et le transport dans les milieux poreux [ENE 75, BEA 91, LEM 01, DOR 02].

I.3.1. Principes de bases de techniques de changement d'échelle

Les méthodologies d'homogénéisation (ou de changement d'échelle) sont intimement liées avec le principe de séparation des échelles. Si la « taille caractéristique » de la structure macroscopique est L , la taille caractéristique du VER l et la « taille caractéristique » des hétérogénéités prises en compte d , le principe de séparation des échelles impose pour la taille du VER les conditions suivantes :

- $l \ll L$: cette condition permettra de considérer que la structure est continue et d'y déterminer des champs (de contraintes, déformations, pressions, températures, concentrations, etc).
- $l \gg d$: cette condition est importante pour affecter aux points macroscopiques de la structure un comportement homogène, si son matériau constituant est considéré macroscopiquement homogène.

Dans la mise en œuvre des techniques de changement d'échelle on distingue trois phases nécessaires [ZAO 01] :

- Représentation : on décrit les constituants, leurs propriétés, la disposition des éléments, la géométrie, la distribution spatiale (souvent simplifiée), en bref, on décrit les éléments de la microstructure aussi fidèlement que la connaissance du problème le permet.
- Localisation : dans cette phase on définit les champs réponse (mécaniques, hydriques, thermiques, ...) dans les constituants, suite aux sollicitations macroscopiques (bien choisies) sur les frontières du VER (ou pour certains cas à l'infini)
- Homogénéisation : en connaissant les champs locaux, la réponse globale effective du VER est souvent obtenue par une opération des moyennes des champs sur le volume et les propriétés effectives peuvent être déduites.

Pour un milieu périodique [LEN 84, BEN 89], le problème d'homogénéisation peut être posé sur une cellule de base en respectant des règles de périodicité sur les conditions limites.

I.3.2. Propriétés effectives poromécaniques analytiques par champs moyens : problème poromécanique linéaire

Les principes de la méthodologie de changement d'échelle sont illustrés ici, d'abord pour le problème mécanique et ensuite poromécanique, sur un matériau de structure simplifiée, dont le VER est présenté par une matrice et une inclusion.

Ce VER occupe le domaine Ω et sa frontière est $\partial\Omega = S_u \cup S_T$ avec $S_u \cap S_T = \emptyset$. S_u est la partie frontière où le champ de déplacement u^d est imposé et S_T est la partie complémentaire où les forces de surface $\underline{T}^d$ sont connues. Ce domaine Ω est soumis à la frontière à une contrainte macroscopique Σ ou une déformation $\mathbf{E}$ provoquant au sein du matériau les champs locaux de contrainte $\sigma(x)$ et de déformation $\varepsilon(x)$. On cherche à déterminer le comportement homogène macroscopique, c.à.d. une relation entre la moyenne de contrainte Σ et de déformation $\mathbf{E}$. Dans le cas où les phases sont élastiques et linéaires, l'opération de la moyenne volumique conduit à (par une approche en contraintes) :

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \sigma d\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \underline{x} \otimes^s (\sigma \cdot \underline{n}) dS = \mathbb{C}^* : \mathbf{E} = \mathbb{C} : \langle \varepsilon \rangle \quad (1.44)$$

et par une approche en déformations :

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \varepsilon d\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \underline{u} \otimes^s \underline{n} dS = \mathbb{S}^* : \Sigma = \mathbb{S} : \langle \sigma \rangle \quad (1.45)$$

Où $\underline{u}$ est le champ de déplacement sur la frontière, $\underline{x}$ le champs de vecteurs contraintes sur la frontière, $\underline{n}$ est la normale unitaire sortante à la frontière $\partial\Omega$, $\otimes^s$ est le produit tensoriel symétrique, $\mathbb{S}^*$ et $\mathbb{C}^*$ sont les tenseurs de souplesse et de rigidité homogène équivalents.

Les grandeurs microscopiques du problème mécanique sont liées directement aux grandeurs macroscopiques par les tenseurs de localisation ou de concentration :

$$\begin{cases} \varepsilon(x) = \mathbb{A}(x) \cdot \mathbf{E} \\ \sigma(x) = \mathbb{B}(x) \cdot \Sigma \end{cases} \text{ avec } \forall x \in \Omega \quad (1.46)$$

$\mathbb{A}(x)$ et $\mathbb{B}(x)$ sont les tenseurs d'ordre 4 de localisation, respectivement en déformations et en contraintes. Ces tenseurs sont tels que :

$$\begin{cases} \langle \mathbb{A}(x) \rangle = \mathbb{I} \\ \langle \mathbb{B}(x) \rangle = \mathbb{I} \end{cases} \quad (1.47)$$

Où $\mathbb{I}$ est le tenseur unitaire d'ordre 4.

En remplaçant ces tenseurs dans les équations (1.44) et (1.45), le comportement homogénéisé a la forme :

$$\begin{cases} \mathbb{C}^* = \langle \mathbb{C}(x) : \mathbb{A}(x) \rangle \\ \mathbb{S}^* = \langle \mathbb{S}(x) : \mathbb{B}(x) \rangle \end{cases} \quad (1.48)$$

Où $\mathbb{C}(x)$ et $\mathbb{S}(x)$ sont respectivement les tenseurs de rigidité et de souplesse élastique des phases constituant le matériau.

Les deux approches (en déformation imposée ou en contraintes imposées) conduisent à des comportements différents, $\mathbb{C}^*$ et $\mathbb{S}^*$ et ne sont pas stricto-sensu réciproquement tenseurs inverses [CHR 79, ABO 91].

On peut arriver aux mêmes résultats en utilisant une approche énergétique et en se basant sur le principe des puissances virtuelles : pour une approche en déformations on obtient alors:

$$E : \mathbb{C}^* : E = \langle \varepsilon(x) : \mathbb{C}(x) : \varepsilon(x) \rangle \quad (1.49)$$

Et pour une approche en contraintes :

$$\Sigma : \mathbb{S}^* : \Sigma = \langle \sigma(x) : \mathbb{S}(x) : \sigma(x) \rangle \quad (1.50)$$

En mettant en place les tenseurs de localisation, on obtient :

$$\begin{cases} \mathbb{C}^* = \langle \mathbb{A}(x) : \mathbb{C}(x) : \mathbb{A}(x) \rangle \\ \mathbb{S}^* = \langle \mathbb{B}(x) : \mathbb{S}(x) : \mathbb{B}(x) \rangle \end{cases} \quad (1.51)$$

Le comportement poromécanique linéaire peut être obtenu suivant la même procédure en introduisant un état de précontrainte [DOR 06, XU 04, DO 08, BIE 10]. Dans ce cas, le milieu poreux est constitué d'un solide élastique linéaire occupant le domaine Ω_s et d'une partie des vides Ω_p occupée entièrement par un fluide saturant. Ce volume est soumis à un chargement hydromécanique couplé à savoir une déformation imposée $\mathbf{E}$ pour le chargement mécanique et une pression p pour le chargement hydraulique, uniforme appliqué dans les pores.

Les champs locaux de déplacements, de déformations et de contraintes régnant en un point du VER induits par ce chargement macroscopique sont désignés par $\underline{\mathbf{u}}, \underline{\boldsymbol{\varepsilon}}$ et $\underline{\boldsymbol{\sigma}}$. Ces champs sont les solutions du problème cellulaire [BIE 10] :

$$\begin{cases} \underline{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{C}_i : \underline{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\tau}_i(\Omega_i, i = s, p) \\ \underline{\text{div}} \underline{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{0} \quad (\Omega_i) \\ \underline{\mathbf{u}}(\underline{\mathbf{x}}) = \mathbf{E} \cdot \underline{\mathbf{x}} \\ \|\underline{\boldsymbol{\sigma}}\| \cdot \underline{\mathbf{n}} = 0, \|\underline{\mathbf{u}}\| = 0 \quad (\omega_{sp}) \end{cases} \quad (1.52)$$

Avec $\boldsymbol{\tau}_p = -p_l \boldsymbol{\delta}$ et $\boldsymbol{\tau}_s = 0$

Où ω_{sp} est l'interface entre la phase solide et la phase liquide.

p_l est la pression de la phase liquide.

$\boldsymbol{\delta}$ est le tenseur identité du second ordre.

Pour trouver la solution de ce problème on le décompose en deux sous-problèmes élémentaires : le premier sous-problème considère un chargement purement mécanique $\mathbf{E} \neq 0, p_l = 0$ et le deuxième sous-problème est un problème élastique linéaire avec précontrainte (un chargement purement hydrique) $\mathbf{E} = 0, p_l \neq 0$. La solution du premier sous-problème est exprimé par :

$$\boldsymbol{\Sigma}' = \mathbb{C}^* : \mathbf{E} \quad (1.53)$$

La solution du deuxième sous-problème est déterminée en utilisant le théorème de Levin [DOR 06] :

$$\boldsymbol{\Sigma}'' = -p_l \mathbf{B} \quad (1.54)$$

$$\mathbf{B} = f_p \boldsymbol{\delta} : \mathbb{A}_p \quad (1.55)$$

Où $\mathbf{B}$ est le tenseur de Biot.

$\boldsymbol{\delta}$ est le tenseur d'identité de deuxième ordre.

Par superposition de deux solutions des sous-problèmes on obtient la solution suivante :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}^* : \mathbf{E} + \langle \boldsymbol{\tau}_i : \mathbb{A} \rangle = \mathbb{C}^* : \mathbf{E} - p_l \mathbf{B} \quad (1.56)$$

La variation de porosité s'écrit sous la forme [DOR 06] :

$$\phi - \phi_0 = \mathbf{B} : \mathbf{E} + \frac{p_l}{N} \quad (1.57)$$

$$\text{Où } \frac{1}{N} = \boldsymbol{\delta} : (\mathbb{C}_s - \mathbb{C}_p)^{-1} : (\mathbf{B} - f_p \boldsymbol{\delta})$$

ϕ, ϕ_0 sont respectivement les porosités lagrangiennes à l'état initial et à l'état actuel.

f_p est la fraction volumique de l'espace poreux (porosité eulérienne).

Pour un milieu microscopiquement et macroscopiquement isotrope le coefficient de Biot b est décrit sous forme :

$$\mathbf{B} = b \boldsymbol{\delta}; b = 1 - \frac{k_{hom}}{k_s} \quad (1.58)$$

La variation de porosité de l'équation (1.57) est réécrite :

$$\phi - \phi_0 = \mathbf{B} : \mathbf{E} + \frac{p_l}{N} = btr\mathbf{E} + \frac{p_l}{N} \quad (1.59)$$

Le module de Biot du solide s'écrit finalement:

$$\frac{1}{N} = \frac{b-\phi}{k_s} \quad (1.60)$$

Les propriétés effectives dépendent des tenseurs de localisation, eux-mêmes fonction des hypothèses sur l'organisation de la microstructure. Ces hypothèses donnent lieu à des schémas d'homogénéisation variés applicables, donc lorsque les conditions des hypothèses de départ sont réunies. Par exemple le schéma dilué suppose que les inclusions n'interagissent pas entre elles et donc reste valable pour des faibles concentrations d'inclusions, alors que le schéma autocohérent est plus adapté pour des matériaux à structure polycristalline. Les hypothèses et les principaux résultats de certains de ces schémas sont donnés dans l'annexe A de ce chapitre.

Pour conclure avec ces méthodes on signale que des adaptations de celle-ci peuvent être utilisées pour résoudre les problèmes non-linéaires via des linéarisations incrémentales ou différentielles [SUQ 95, 97].

I.3.3. Approches numériques de changement d'échelle

Le développement rapide des capacités de calculs a permis de nos jours le développement rapide des approches numériques d'homogénéisation. Ces approches permettent d'étudier d'une façon relativement simple et unifiée le comportement des matériaux hétérogènes complexes, y compris ceux à comportement non linéaire des constituants. Le cœur de ces méthodes consiste à imposer des conditions aux limites adaptées sur un VER et à résoudre le problème résultant par des codes numériques (souvent aux éléments finis) [DOG 06, WU 11]. Par la nécessité de surpasser les difficultés liées au maillage des microstructures complexes, la méthode des éléments finis étendus (eXtended Finite Element Method - XFEM) peut être utilisée. L'avantage majeur de cette méthode est de permettre d'introduire des discontinuités sans un maillage concordant à ces discontinuités, au prix d'enrichissement de la solution recherchée. A l'origine développée dans le cadre de la mécanique de la rupture, cette méthode est développée et utilisée aujourd'hui dans des domaines et problèmes variés [SUK 01, HET 06, ELG 06, MOE 03, BEL 03, BUD 06, BEC 08, WU 11]. Les inconvénients de la méthode sont principalement les difficultés de l'intégration numérique complexe due à la présence des

fonctions discontinues ou singulières et les ressources numériques nécessaires plus importantes que pour la FEM.

Similaire à XFEM, la méthode 'Immersed Interface Method' (IIM) utilise une version adaptée des différences finies pour résoudre un problème avec discontinuités dans un maillage régulier de fond [DO 12].

Dans cette catégorie d'approches numériques d'homogénéisation, font également partie les méthodes dites 'asymptotiques'. Ces méthodes représentent des outils systématiques de recherche des propriétés effectives des matériaux ou des coefficients effectifs d'une équation différentielle homogène [LI 08, MAR 07, BOU 12], sans faire des hypothèses sur le comportement macroscopique. La technique principale de l'homogénéisation asymptotique est l'utilisation de l'expansion multi-échelle. Souvent, elle a une liaison avec la technique de perturbation singulière [MOV 06, BEN 11].

I.4. Conclusion

La modélisation du comportement multi physique des milieux poreux est un domaine de recherche très vaste et complexe au croisement de la mécanique, l'hydraulique, la chimie, la thermique, la géologie, le numérique, la géochimie....

Des approches alternatives et complémentaires microscopiques et macroscopiques, analytiques, semi-analytiques et numériques sont souvent nécessaires pour étudier des facettes différentes d'un même problème. Les rappels bibliographiques de ce chapitre permettent de situer le travail de cette thèse dans la continuité des approches présentées ici. Les approches macroscopiques, très largement utilisées en pratiques, permettent de résoudre de nombreux problèmes pratiques. Il est cependant souvent nécessaire de clarifier les bases physiques de telles approches et de comprendre les mécanismes qui conditionnent la réponse macroscopique des matériaux poreux par une approche microscopique.

Si les approches microscopiques analytiques séduisent par la fermeture des équations résultantes et la forme (souvent) explicite des propriétés effectives, on souligne que cela est obtenue par une simplification de la microstructure des matériaux, de la forme et de la distribution spatiale des constituants, voir même de leur comportement notamment lorsqu'il s'agit du comportement non linéaire.

Finalement les approches numériques de changement d'échelle, fortes de leur possibilité de décrire finement les éléments de la microstructure (forme, position, distribution spatiale) et

d'aborder sans distinction le comportement linéaire et non linéaire, offrent une possibilité formidable pour étudier en particulier l'impact de la distribution spatiale des constituants sur les propriétés effectives. En particulier (mais sans se limiter) en hydraulique, où la connectivité du réseau poral est susceptible de jouer un rôle de première importance, ces méthodes seront d'avantage préférées aux autres.

Annexes du chapitre I

Annexe A. Méthodes classiques de la modélisation du comportement de milieux poreux linéaires

La solution du problème cellulaire dépend du choix du VER et de la façon d'imposer le chargement. Sous une certaine configuration géométrique particulièrement simplifiée, le problème cellulaire peut être résolu explicitement et permet d'obtenir des expressions analytiques du comportement équivalent. Parmi les approches simplifiées, on rappelle les travaux de Voigt, Reuss et Hill. La méthode des distributions diluées, la méthode auto-cohérente ou les méthodes variationnelles ou énergétiques rentrent dans le cadre de cette approche [ABO 91, HAS 62a, HAS 62b, HAS 63].

Il existe également d'autres approches d'homogénéisation qui reposent sur des résolutions numériques des problèmes posés sur des VER enrichis. L'approche d'homogénéisation périodique est appliquée pour des composites à des microstructures périodique [DUV 76, LEN 84, SAN 86]. Cette théorie donne un sens précis au processus d'homogénéisation sous forme d'un problème de convergence avec un paramètre caractérisant la taille des hétérogénéités. De plus en plus, des outils de calcul numérique sont plus performants et permettent de résoudre des problèmes sur des VER de microstructure complexe [GRO 05, ZEG 06, CLA 03].

Dans cette section, quelques méthodes quasi-explicites d'homogénéisation des milieux poreux sont présentées. Ces méthodes utilisent la solution du problème de l'inclusion isolée dans un milieu infini développée par Eshelby [ESH 57]. Afin de suivre les descriptions de ces méthodes, on accepte les notations et hypothèses suivantes. Le milieu hétérogène est constitué d'une phase matricielle (indignée 1) et d'une phase d'inclusion (indignée 2). Les phases sont supposées homogènes, le tenseur de rigidité homogénéisé dans l'équation (1.48) est réécrit sous forme :

$$\mathbb{C}^* = \mathbb{C}_1 + c_2(\mathbb{C}_2 - \mathbb{C}_1) : \mathbb{A}_2 \quad (\text{A.1})$$

Où $\mathbb{C}_1, \mathbb{C}_2$ sont les tenseurs de rigidité des phases 1 et 2.

$\mathbb{A}_2 = \langle \mathbb{A}(\Omega) \rangle_2$ est la moyenne du tenseur de localisation sur la phase d'inclusion

c_2 est la fraction volumique de la phase 2.

A.1. Schéma des distributions diluées :

Les premiers résultats de la méthode des approximations diluées sont connus par Eshelby. Cette méthode est dédiée à des matériaux qui présentent un faible taux de renfort ou de porosité. Si la fraction volumique des hétérogénéités est suffisamment faible et la distance entre ces hétérogénéités est suffisante, ces hétérogénéités peuvent être considérées comme isolées et noyées dans une matrice infinie.

Pour le cas d'une déformation imposée sur un volume infini de matrice qui contient une seule inclusion, le tenseur de localisation de la phase 2 est déterminé par Eshelby et a la forme :

$$\mathbb{A}_2 = [\mathbb{I} + \mathbb{P}_E^1 : (\mathbb{C}_2 - \mathbb{C}_1)]^{-1} \quad (\text{A.2})$$

Où $\mathbb{P}_E^1$ est le tenseur de polarisation ou le tenseur de Hill [HIL 65] associé au milieu 1, ce tenseur est défini par :

$$\mathbb{P}_E^1 = \mathbb{S}_E^1 : (\mathbb{C}_1)^{-1} = \mathbb{S}_E^1 : (\mathbb{S}_1) \quad (\text{A.3})$$

$\mathbb{S}_E^1$ est le tenseur d'Eshelby, pour un matériau isotrope et des hétérogénéités sphériques, ce tenseur est écrit pour la phase i :

$$\mathbb{S}_E^{(i)} = a_E^{(i)} \mathbb{J} + b_E^{(i)} \mathbb{K} \quad (\text{A.4})$$

Avec

$$a_E^{(i)} = \frac{3k^{(i)}}{3k^{(i)} + 4\mu^{(i)}} = \frac{1}{3} \frac{1 + \nu^{(i)}}{1 - \nu^{(i)}}; \quad b_E^{(i)} = \frac{6}{5} \frac{k^{(i)} + 2\mu^{(i)}}{3k^{(i)} + 4\mu^{(i)}} = \frac{2}{15} \frac{4 - 5\nu^{(i)}}{1 - \nu^{(i)}}$$

$$\mathbb{J} = \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}; \quad \mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J}$$

$\mathbf{1}, \mathbb{I}$ sont les tenseurs unitaires d'ordre 2 et 4.

En remplaçant l'équation (A.4) dans le tenseur de Hill qui s'écrit par :

$$\mathbb{P}_E^{(i)} = \frac{1}{3k^{(i)} + 4\mu^{(i)}} \mathbb{J} + \frac{6}{5\mu^{(i)}} \frac{k^{(i)} + 2\mu^{(i)}}{3k^{(i)} + 4\mu^{(i)}} \mathbb{K} \quad (\text{A.5})$$

Où $\mathbb{J} = \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$, $\mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J}$, $\mathbf{1}$ est le tenseur d'identité d'ordre deux et où les tenseurs du 4^{ème} ordre $\mathbb{J}$ et $\mathbb{K}$ sont les projecteurs orthogonaux.

Les propriétés élastiques équivalentes du matériau biphasé sont déterminées à partir des équations (A.2) et (A.3) :

$$\mathbb{C}^* = \mathbb{C}_1 + c_2 (\mathbb{C}_2 - \mathbb{C}_1) : [\mathbb{I} + \mathbb{P}_E^1 : (\mathbb{C}_2 - \mathbb{C}_1)]^{-1} \quad (\text{A.6})$$

Si le matériau a deux phases homogènes et isotropes et des hétérogénéités sphériques, cette approche en déformation imposée donne une estimation des coefficients élastiques (k_D^*, μ_D^*) :

$$k_D^* = k_1 + c_2(k_2 - k_1) \frac{1}{(1-a_E^1) + a_E^1(k_2/k_1)} \quad (\text{A.7})$$

$$\mu_D^* = \mu_1 + c_2(\mu_2 - \mu_1) \frac{1}{(1-b_E^1) + b_E^1(\mu_2/\mu_1)} \quad (\text{A.8})$$

En approche de contrainte imposée, le tenseur de souplesse équivalent $\mathbb{S}^*$ du matériau est déterminé de la même façon :

$$\mathbb{S}^* = \mathbb{S}_1 + c_2(\mathbb{S}_2 - \mathbb{S}_1) : [\mathbb{I} - \mathbb{Q}_E^1 : (\mathbb{S}_2 - \mathbb{S}_1)]^{-1} \quad (\text{A.9})$$

Similairement, $\mathbb{Q}_E^1$ est le tenseur de Hill, qui est défini par :

$$\mathbb{Q}_E^1 = (\mathbb{S}_1)^{-1} : (\mathbb{I} - \mathbb{S}_E^1) = \mathbb{C}_1 : (\mathbb{I} - \mathbb{S}_E^1) \quad (\text{A.10})$$

Dans l'approche de contrainte, les coefficients homogénéisés du matériau isotrope élastique sont :

$$\frac{1}{k_C^*} = \frac{1}{k_1} + c_2 \left(\frac{1}{k_2} - \frac{1}{k_1} \right) \frac{1}{(1-a_E^1)k_1/k_2 + a_E^1} \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{1}{\mu_C^*} = \frac{1}{\mu_1} + c_2 \left(\frac{1}{\mu_2} - \frac{1}{\mu_1} \right) \frac{1}{(1-b_E^1)\mu_1/\mu_2 + b_E^1} \quad (\text{A.12})$$

Dans un milieu poreux avec une porosité ϕ , une estimation des caractéristiques macroscopiques peut être réalisée en faisant tendre k_2 et μ_2 vers zéro avec les équations (A.7)-(A.8) (A.11)-(A.12) :

$$k_D^* = k_s - \phi k_s \frac{1}{(1-a_E^s)}; \mu_D^* = \mu_s - \phi \mu_s \frac{1}{(1-b_E^s)} \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{1}{k_C^*} = \frac{1}{k_s} + \phi \frac{1}{k_s} \frac{1}{(1-a_E^s)}; \frac{1}{\mu_C^*} = \frac{1}{\mu_s} + \phi \frac{1}{\mu_s} \frac{1}{(1-b_E^s)} \quad (\text{A.14})$$

Cette approche n'est pertinente que pour les matériaux de concentrations c_2 faibles ou des porosités ϕ à moins d'une dizaine de pourcents [BEN 05].

A.2. Approximation de Mori-Tanaka :

Mori et Tanaka considèrent que la moyenne de la déformation dans les hétérogénéités peut être approchée par celle d'une hétérogénéité de même forme et de même caractéristiques élastiques isolée dans un milieu infini constitué d'une matrice soumise à une déformation uniforme $\mathbf{E}$.

La déformation moyenne dans l'hétérogénéité s'écrit en utilisant l'équation (A.14) :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_2 = [\mathbb{I} + \mathbb{P}_E^1 : ((\mathbb{C}_2 - \mathbb{C}_1))]^{-1} : \mathbf{E} \quad (\text{A.15})$$

La déformation moyenne dans la matrice est décrite :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_1 = \mathbf{E} \quad (\text{A.16})$$

On a la relation $\mathbf{E} = c_1 \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_1 + c_2 \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_2$. A partir des équations (A.15) et (A.16), les moyennes des tenseurs de localisation des constituants s'écrivent :

$$\mathbb{A}_1 = [c_1 \mathbb{I} + c_2 [\mathbb{I} + \mathbb{P}_E^1 : (\mathbb{C}_2 - \mathbb{C}_1)^{-1}]]^{-1} \quad (\text{A.17})$$

$$\mathbb{A}_2 = [\mathbb{I} + \mathbb{P}_E^1 : (\mathbb{C}_2 - \mathbb{C}_1)]^{-1} : \mathbb{A}_1 \quad (\text{A.18})$$

Le tenseur des modules élastiques homogénéisés de l'estimation de Mori-Tanaka s'exprime :

$$\mathbb{C}_{MT}^* = \mathbb{C}_1 + c_2 (\mathbb{C}_2 - \mathbb{C}_1) : [\mathbb{I} + c_1 \mathbb{P}_E^1 : (\mathbb{C}_2 - \mathbb{C}_1)]^{-1} \quad (\text{A.19})$$

Dans le cas d'un milieu isotrope à constituants isotropes et à renforts sphériques, les coefficients homogénéisés sont décrits :

$$k_{MT}^* = k_1 + c_2 (k_2 - k_1) \frac{1}{(1 - (1 - c_2) a_E^1) + (1 - c_2) a_E^1 k_2 / k_1} \quad (\text{A.20})$$

$$\mu_{MT}^* = \mu_1 + c_2 (\mu_2 - \mu_1) \frac{1}{(1 - (1 - c_2) b_E^1) + (1 - c_2) b_E^1 \mu_2 / \mu_1} \quad (\text{A.21})$$

Les estimations des caractéristiques macroscopiques sont déterminées en faisant tendre les caractéristiques de l'inclusion vers zéro :

$$k_{MT}^* = k_1 + c_2 (k_2 - k_1) \frac{1}{(1 - (1 - c_2) a_E^1) + (1 - c_2) a_E^1 k_2 / k_1} \quad (\text{A.22})$$

$$\mu_{MT}^* = \mu_1 + c_2 (\mu_2 - \mu_1) \frac{1}{(1 - (1 - c_2) b_E^1) + (1 - c_2) b_E^1 \mu_2 / \mu_1} \quad (\text{A.23})$$

A.3. Schéma autocohérent :

Dans ce schéma, on suppose que chaque particule (matrice ou inclusion) est entourée par d'autres phases du milieu. Ce milieu homogène est soumis à un champ de déformation $\mathbf{E}$. La déformation de la phase α ($\alpha = 1; 2$) s'exprime :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_\alpha = [\mathbb{I} + \mathbb{P}_E^* : (\mathbb{C}_\alpha - \mathbb{C}^*)]^{-1} : \mathbf{E} \quad (\text{A.24})$$

Où $\mathbb{P}_E^*$ est le tenseur de polarisation associé au milieu équivalent défini par $\mathbb{P}_E^* = \mathbb{S}_E^* : (\mathbb{C}^*)^{-1}$.

La déformation est déterminée par la relation $\mathbf{E} = c_1 \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_1 + c_2 \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_2$. En supposant que toutes les hétérogénéités sont de même forme et de même orientation, l'estimation des tenseurs de localisation est décrite :

$$\mathbb{A}_\alpha = [\mathbb{I} + \mathbb{P}_E^* : (\mathbb{C}_\alpha - \mathbb{C}^*)]^{-1} \quad (\text{A.25})$$

L'estimation du tenseur de rigidité par le schéma autocohérent est obtenue en résolvant l'équation implicite suivante :

$$\mathbb{C}_{AC}^* = c_1 \mathbb{C}_1 : [\mathbb{I} + \mathbb{P}_E^* : (\mathbb{C}_1 - \mathbb{C}_{AC}^*)]^{-1} + c_2 \mathbb{C}_2 : [\mathbb{I} + \mathbb{P}_E^* : (\mathbb{C}_2 - \mathbb{C}_{AC}^*)]^{-1} \quad (\text{A.26})$$

En supposant que les hétérogénéités sont sphériques, l'équation (A.26) se réduit à la résolution du système non linéaire suivant :

$$\begin{cases} c_1 \frac{k_1 - k_{AC}^*}{1 + a_E^* \frac{k_1 - k_{AC}^*}{k_{AC}^*}} + c_2 \frac{k_2 - k_{AC}^*}{1 + a_E^* \frac{k_2 - k_{AC}^*}{k_{AC}^*}} = 0 \\ c_1 \frac{\mu_1 - \mu_{AC}^*}{1 + b_E^* \frac{\mu_1 - \mu_{AC}^*}{\mu_{AC}^*}} + c_2 \frac{\mu_2 - \mu_{AC}^*}{1 + b_E^* \frac{\mu_2 - \mu_{AC}^*}{\mu_{AC}^*}} = 0 \end{cases} \quad (\text{A.27})$$

Où $a_E^* = \frac{3k_{AC}^*}{3k_{AC}^* + 4\mu_{AC}^*}$; $b_E^* = \frac{6(k_{AC}^* + 2\mu_{AC}^*)}{5(3k_{AC}^* + 4\mu_{AC}^*)}$

Dans le cas d'un milieu poreux à pores sphériques et à squelette homogène isotrope, en faisant tendre k_2 et μ_2 vers zéro dans le système d'équation (A.27), le module de compressibilité macroscopique est obtenu sous la forme :

$$k_{AC}^* = k_s - \phi k_s \frac{3k_s + 4\mu_{AC}^*}{3\phi k_s + 4\mu_{AC}^*} \quad (\text{A.28})$$

Où μ_{AC}^* est obtenue en résolvant l'équation suivante :

$$8(\mu_{AC}^*)^2 - ((8 - 20\phi)\mu_s - (9 - 3\phi)k_s)\mu_{AC}^* - (9 - 18\phi)k_s\mu_s = 0 \quad (\text{A.29})$$

A.4. Schéma autocohérent généralisé :

Le modèle autocohérent généralisé ou le modèle de trois phases de Christensen et Lo [CHR 79] propose une estimation des modules élastiques des composites isotropes à inclusions sphériques. Ce modèle utilise la solution analytique du problème d'une sphère composite à phases isotropes, noyée dans un milieu infini homogène et isotrope soumis à un chargement homogène à l'infini.

En comparaison avec le schéma autocohérent, la différence est que le milieu possède les propriétés du milieu homogène équivalent, la démarche pour obtenir le comportement équivalent est quand à elle identique au schéma précédent.

Le module de compressibilité équivalent k_{3Ph}^* est le même que celui obtenu dans le cas de l'assemblage des sphères composites [HAS 83] :

$$k_{3Ph}^* = k_1 + c_2(k_2 - k_1) \frac{1}{1 + (1 - c_2) \frac{(k_2 - k_1)}{(k_1 + \frac{4}{3}\mu_1)}} \quad (A.30)$$

Le module de cisaillement équivalent μ_{3Ph}^* est écrit :

$$\mu_{3Ph}^* = \mu_1 + c_2 \mu_1 F\left(c_2, \beta, \frac{\mu_{3Ph}^*}{\mu_1}\right) \quad (A.31)$$

Où $\beta = \frac{\mu_2}{\mu_1}$

La fonction F est donnée par :

$$F(c_2, \beta, \beta_0) = \left(A(1 - c) + \frac{1}{\beta - 1} - \frac{c \left(1 - c^{\frac{2}{3}}\right)^2}{B c^{\frac{7}{3}} + C + \frac{D}{\beta_0 - 1}} \right)^{-1} \quad (A.32)$$

Où A, B, C, D sont des constantes en fonction des coefficients de Poisson des phases :

$$A = \frac{2(4 - 5v_1)}{15(1 - v_1)}$$

$$B = \frac{10(1 - v_1)(7 - 10v_2)(7 + 5v_1) - \beta(7 - 10v_1)(7 + 5v_2)}{21 \cdot 4(7 - 10v_2) + \beta(7 + 5v_2)}$$

$$C = \frac{10}{21}(7 - 10v_1)(1 - v_1)$$

$$D = \frac{25}{6}(1 - v_1)$$

En faisant tendre k_2 et μ_2 vers zéro, le module de compressibilité s'exprime :

$$k_{3Ph}^* = k_s - \phi k_s \frac{3k_s + 4\mu_s}{3\phi k_s + 4\mu_s} = k_s - \phi k_s \frac{1}{(1 - (1 - \phi)a_E^s)} \quad (A.33)$$

Le module de cisaillement est écrit :

$$\mu_{3Ph}^* = \mu_s + \phi \mu_s F\left(\phi, 0, \frac{\mu_{3Ph}^*}{\mu_s}\right) \quad (A.34)$$

Chapitre II. Modélisation des écoulements diphasiques dans un milieu poreux par une approche discrète

II.1. Introduction

Dans un milieu poreux, l'espace des vides peut contenir un ou plusieurs fluides, mouillants ou non mouillants qui peuvent se déplacer dans le réseau poreux lorsque les conditions sont réunies. Nous nous intéressons dans ce chapitre d'abord aux écoulements monophasiques qui serviront de base de la modélisation dans un deuxième temps des écoulements diphasiques, où le fluide mouillant est l'eau et le fluide non mouillant est l'air contenant éventuellement de la vapeur de d'eau. Après une description rapide des approches alternatives de la modélisation macro et microscopiques d'écoulement on adopte une approche directe de description du réseau poral comme un ensemble de tubes. Cette description permet dans un premier temps de décrire les écoulements en saturé et en suite elle est utilisée pour décrire le comportement hydrique en partiellement saturé. Les questions abordées dans ce chapitre sont donc celles de la relation entre la perméabilité et la structure de l'espace poreux (comportement en saturé) ainsi que le lien entre la structure de l'espace poreux et la courbe de rétention et la perméabilité relative en non saturé. Les applications présentées concernent le comportement hydrique en saturé et en partiellement saturé d'une pierre poreuse étudiée dans le cadre de la problématique de la durabilité des bâtiments historiques [BEC 06].

II.2. Estimateurs de la perméabilité du milieu poreux en saturé et non saturé

II.2.1. Ecoulement monophasique

On se place dans les conditions d'un milieu poreux, où la vitesse d'écoulement est faible si bien que la loi de Darcy est considérée valide :

$$v_i = K_{sat} \frac{\partial h}{\partial x_i} = \frac{k}{\eta} \frac{\partial P}{\partial x_i} \quad (2.1)$$

Où K_{sat} est la conductivité hydraulique à l'état saturé (m/s), k est la perméabilité spécifique (m^2), $\partial h / \partial x_i$ est le gradient hydraulique, P est la pression hydraulique et x_i est l'abscisse i .

Rappelons le lien entre la perméabilité spécifique k et la conductivité hydraulique K dans le cas de l'écoulement d'un fluide donné :

$$k = \frac{\rho g}{\eta} K \quad (2.2)$$

Où ρ est la densité volumique du liquide (kg/m^3), g est l'accélération de gravité et η la viscosité dynamique de l'eau (Pa.s).

On s'intéresse donc à l'estimation de la perméabilité d'un matériau poreux en supposant que sa structure intrinsèque est connue d'une certaine façon (taille des grains, tortuosité et connectivité de son réseau poreux).

Dans [DOR 04, 06], en considérant la perméabilité du solide connue, un ensemble de fissures en forme de disques uniformément repartit et en se basant sur une approche autocohérente les auteurs obtiennent l'expression suivante pour la perméabilité fonction de la densité de fissuration et/ou la porosité :

$$\mathbb{K}^{AC} = \langle \mathbb{K}(\mathbf{1} + \mathbb{P}^{AC} \cdot (\mathbb{K} - \mathbb{K}^{AC}))^{-1} \rangle \cdot \langle (\mathbf{1} + \mathbb{P}^{AC} \cdot (\mathbb{K} - \mathbb{K}^{AC}))^{-1} \rangle^{-1} \quad (2.3)$$

où : $\mathbb{K}^{AC}$ est le tenseur de perméabilité macroscopique.

$\mathbb{P}^{AC}$ est relié au tenseur d'Eshelby $\mathbb{S}^{AC}$ par la relation $\mathbb{P}^{AC} = \mathbb{S}^{AC} \mathbb{K}^{AC^{-1}}$

$$\begin{cases} z \in \mathcal{F}^j & \mathbb{S}^{AC} = \frac{1}{4}\pi X \mathbf{1} + \left(1 - \frac{3}{4}\pi X\right) n^j \otimes n^j \\ z \in \Omega^s & \mathbb{S}^{AC} = \frac{1}{3} \mathbf{1} \end{cases} \quad (2.4)$$

Où : $\mathbb{S}^{AC}$ est dans $\mathcal{F}^j$ est un développement limité au premier ordre en X.

Il n'est pas difficile de constater que dans cette approche basée sur la solution du problème d'Eshelby, la connectivité des fissures/pores ne joue aucun rôle. Ce qui est considéré souvent comme seuil de percolation de la méthode autocohérente est en fait une percolation numérique et selon certains auteurs n'est qu'un résultat de la structure mathématique de la méthode sans relation directe avec la percolation physique [MAU 94]. Notons enfin que dans cette formulation la perméabilité de la matrice est non nulle.

Il est possible en assimilant les pores par un tube cylindrique et en considérant un écoulement laminaire d'un liquide visqueux de faire une estimation de la perméabilité en connaissant la porosité (loi de Poiseuille). En fait pour un cylindre de longueur L et rayon R , le profile des vitesses en fonction de la position du point d'observation est donné par :

$$v(r, z, \theta) = v(r) = v_{max} \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) \quad (2.5)$$

où la vitesse maximale v_{max} est liée au gradient de pression $\frac{dP}{dz}$, à la viscosité dynamique η et au rayon par :

$$v_{max} = \frac{R^2}{4\eta} \left| \frac{dP}{dz} \right| \quad (2.6)$$

L'écoulement exerce des efforts de cisaillement sur la paroi des pores selon l'axe du cylindre z , ce qui provoque des efforts de cisaillement qui sont les forces selon l'axe z :

$$\sigma_{rz}(r, z, \theta) = \sigma_{rz}(r) = \eta \frac{dv(r)}{dr} \quad (2.7)$$

La variation de pression $\frac{dp}{dz}$ selon l'axe z étant constante le long de cet axe, on considère que les efforts subis par une zone cylindrique de rayon r et de longueur Δz sont :

$$\Delta F_{face} = \pi r^2 \Delta z \frac{dp}{dz} \quad (2.8)$$

La contrainte de cisaillement sur le bord du cylindre lui transmet une force orientée selon l'axe z :

$$F_{bord} = 2\pi r \Delta z \sigma_{rz}(z) \quad (2.9)$$

Il y a un équilibre entre ces deux forces car l'écoulement est permanent, ainsi la contrainte de cisaillement est décrite par l'équation:

$$\sigma_{rz}(r) = \frac{r}{2} \frac{dp}{dz} \quad (2.10)$$

Par la suite, en supposant un gradient de vitesse linéaire en r :

$$\frac{dv(r)}{dr} = \frac{\sigma_{rz}(r)}{\eta} = \frac{r}{2\eta} \frac{dp}{dz} \quad (2.11)$$

On obtient un profile de vitesse parabolique :

$$v(r) = const + \frac{r^2}{4\eta} \frac{dp}{dz} \quad (2.12)$$

En tenant compte de la condition de non glissement $v(R) = 0$, le champ de vitesse devient :

$$v(r) = -\frac{R^2}{4\eta} \frac{dp}{dz} \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \quad (2.13)$$

Selon cette expression, la vitesse d'écoulement dans une conduite cylindrique est plus importante au centre et diminue en fonction du rayon.

Pour un tube cylindrique de section connue et un gradient de pression donné on peut calculer le débit par intégration de (2.12) pour obtenir finalement une expression similaire à celle de

Darcy :

$$q = \frac{\pi r^4}{8\eta} \frac{\Delta P}{L} = cS \frac{\Delta h}{L} \quad (2.14)$$

Où c est la conductivité, S est la section du tube capillaire.

Pour une série de tubes capillaires Kozeny (1927) [ROB 03] a déduit la vitesse effective d'écoulement suivante :

$$v = \gamma c \left(\frac{1}{\mu_w} \right) \left(\frac{\phi^3}{S_s^2} \right) \quad (2.15)$$

v est la vitesse de Darcy, μ_w viscosité dynamique de l'eau, I est le gradient hydraulique, c est une constante géométrique, ϕ est la porosité du matériau, S_s est la surface spécifique ($m^2/masse$). La valeur de c est : 0.5 pour un cercle, 0.562 pour un carré et 0.597 pour un triangle équilatéral.

En partant de cette équation Carman (1939) a introduit la notion de rayon hydraulique en exprimant la surface spécifique par une unité de masse solide et la tortuosité [ROB 03] pour obtenir la conductivité hydraulique d'un milieu poreux formé de tubes capillaires vérifiant l'équation Navier Stokes:

$$k = C \frac{g}{\mu_w \rho_w} \frac{n^3}{S_s^2 D_R^2 (n-1)^2} \quad (2.16)$$

Dans cette expression k est la conductivité hydraulique, C est une constante, n est la porosité, μ_w viscosité dynamique, ρ_w est la densité de l'eau, g est la constante de gravité, S_s est la surface spécifique, D_R est la masse spécifique ($D_R = \rho_s / \rho_w$)

Selon Carman (1939), les résultats de calcul en utilisant le coefficient $C = 0.2$, montrent un bon accord avec les résultats expérimentaux pour le sable [ROB 03].

Une autre expression empirique de la conductivité hydraulique en fonction de la porosité et de la surface spécifique souvent utilisée en pratique est de la forme ([PEN 07]):

$$k = \frac{\phi^3}{c(1-\phi)^2 S_s^2} \quad (2.17)$$

avec c , S_s , ϕ étant respectivement la constante de Kozeny, la surface spécifique et la porosité du matériau.

II.2.2. Ecoulement diphasique

Si on s'intéresse à l'écoulement diphasique en se limitant dans le cas des écoulements en partiellement saturé la perméabilité effective à l'eau est considérée être juste une fraction de la perméabilité en saturé du matériau. Cette fraction, une fonction de la saturation, est exprimée par la perméabilité relative, décrite souvent par des expressions empiriques présentées déjà dans le chapitre 1 (voir équations 1.29). Il n'y a pas donc proprement dit des

estimateurs macroscopiques de la perméabilité relative au-delà des expressions empiriques qui mettent en relation la perméabilité relative avec les paramètres de la courbe de rétention ou directement avec la saturation.

Des estimateurs de la perméabilité en partiellement saturé peuvent être obtenus en suivant une approche microscopique directe. Une approche microscopique directe qui consiste à calculer un écoulement d'un fluide régit par l'équation de Stokes dans l'espace poreux dont la structure est considérée explicitement. Il est dans ce cas difficilement concevable sauf dans le cas des structures très particulières et des petits volumes de reconstituer la structure exacte du réseau de pores, incluant la forme de chaque pore et la distribution des frontières entre les fluides. Dans l'approche dite « de propagation des ménisques » ou du « modèle dynamique des réseaux capillaires » les ménisques sont considérés comme une troisième phase indéformable qui se déplace à petite vitesse [PAN 03]. Les équations d'écoulement sont fermées en utilisant l'équation de Poiseuille pour la vitesse des phases et en respectant la continuité des interfaces.

Les différents algorithmes des « automates cellulaires » proposés dans la littérature peuvent également être utilisés comme estimateurs de la perméabilité effective des écoulements multiphasiques [PAN 03].

Les modèles de percolation classique [BRO 57, LAR 81, CHA 85, WIL 88, SAH 94] considèrent que la phase non mouillante déplace la phase mouillante tandis que la force capillaire empêche la pénétration de la phase non mouillante de sorte à ce qu'une différence de pression ΔP supérieure aux forces capillaires est nécessaire pour permettre l'intrusion de la phase non mouillante dans le pore.

La version probabiliste de l'algorithme de percolation calcule une probabilité $\eta(x, t, \omega)$ de remplissage du pore à l'instant t pour un pore est situé au point x :

$$\eta(x, t, \omega) = \begin{cases} 1, & \text{si } u(x, \omega) = 1 \text{ et } \eta(\bar{x}, t, \omega) = 1 \\ 0, & \text{au contraire} \end{cases} \quad (2.18)$$

où x est la coordonnée du pore, $u(x, \omega)$ est la probabilité que le pore soit un conducteur $u(x, \omega) \in [0,1]$, t est le pas de temps, $\bar{x}$ signifie qu'il existe au moins une conduite voisine de x , ω est un paramètre extérieur de différence de pression.

La contrainte d'avoir un pore voisin rempli pour avoir une probabilité non nulle de remplissage sous-entend l'existence d'un cluster de pores connectés entre eux et avec les frontières.

II.3. Proposition d'un modèle de réseaux de conduits pour l'écoulement diphasique dans les milieux poreux

Nous proposons ici, une modélisation des écoulements bi-phasiques des milieux poreux partiellement saturés par une approche microscopique via une représentation directe de l'espace poreux et un algorithme d'écoulement similaire aux algorithmes des automates cellulaires cités dans le paragraphe précédent. A l'échelle étudiée, l'espace poreux entre les grains d'un géomatériau peut être assimilé par un réseau continu de conduits capillaires avec une topologie aléatoire. La différence avec les approches de type lattice déterministe est le caractère probabiliste de la géométrie, de la connectivité et des propriétés de chaque conduit. L'approche proposée est inspirée du modèle de Buckley-Leverett avec une extension gravitaire selon l'idée initiale du modèle dit « meniscus model » ([PAN 03]). Plus qu'un modèle il s'agit d'un cadre de modélisation des écoulements aux milieux poreux hétérogènes.

II.3.1. Principales hypothèses

H1 : Le modèle considère que la structure de l'espace poreux est connue du moins globalement en termes de porosité totale et de distribution de rayons de pores. Si des informations plus détaillées notamment en termes de connectivité du réseau poral ou du rayon hydraulique voir de la conductivité hydraulique des pores existent alors ces éléments peuvent être intégrés sans aucune difficulté dans le cadre de la modélisation proposée. Bien que les pores isolés (non connectés) puissent être pris en compte, leur contribution dans l'écoulement étant nulle, ils sont ignorés et ils ne sont pas modélisés.

H2 : Chaque pore peut être remplacé par un conduit de forme cylindrique assorti d'un rayon hydraulique (ou de façon équivalente d'une conductivité hydraulique) ce qui est supposé suffisant pour assurer l'équivalence du conduit avec le pore en termes de volume et de conductivité hydraulique. Cela sous-entend également que l'écoulement dans les tubes est supposé visqueux et que l'impact de la forme réelle du pore est inclus dans sa conductivité hydraulique.

H3 : L'écoulement des fluides se fait exclusivement dans les conduits, l'espace non occupé par les conduits est donc réputé imperméable. Selon cette hypothèse l'ensemble des pores et des fissures est présenté de façon unifiée. Cela signifie en particulier que l'ajout d'un conduit peut avoir un impact sur la perméabilité uniquement si ses deux extrémités font partie du

réseau alors qu'il suffit qu'une des deux extrémités ne soit pas connectée avec ce réseau pour que le conduit soit considéré comme étant isolé.

H4 : Le déplacement du fluide à l'intérieur d'un tube est uniquement axial, il n'y a donc pas de dispersion dans le tube et la dispersion macroscopique est uniquement résultat de la géométrie du réseau. Cette hypothèse facilite largement les calculs car à l'intérieur de chaque tube l'écoulement est 1D. Dans sa version initiale le code 3FLO ([3FL 06], Itasca Ltd.) utilisé ici pour la modélisation des écoulements ne simule qu'un écoulement dans un réseau poral saturé monophasique. Le flux dans un conduit saturé s'écrit alors :

$$\vec{q} = C. \overrightarrow{\text{grad}h} \quad (2.19)$$

Où $\vec{q}$ est le flux du fluide ; C : conductivité hydraulique du conduit et $\overrightarrow{\text{grad}h}$ est le gradient de la charge hydraulique. Pour un conduit donné l'ensemble des vecteurs intervenants dans l'équation ci-dessus sont colinéaires avec l'axe du conduit.

H5 : Le transport de la masse fluide d'un point à l'autre du réseau se fait sans changement de phase. Cela signifie en particulier qu'en partiellement saturé l'eau se transfère uniquement par les capillaires (conduits) qui sont saturés. On néglige donc le transport diffusif qui peut avoir lieu entre deux ponts liquides à l'intérieur d'un tube. En fait dans les écoulements des milieux partiellement saturés la perméabilité effective (macroscopique) à l'eau pour une saturation donnée comprend le flux liquide à la sortie d'une section sans faire distinction si le fluide sortant provient d'un tube saturé ou s'il se condense à la sortie de ce tube suite à un transport interne diffusif. Dans l'approche proposée ici le fluide liquide provient exclusivement de conduits complètement saturés.

H6 : La pression de la phase gazeuse reste à tout moment et à tout point d'espace constante et égale à la pression atmosphériques. Par contre la pression partielle de la vapeur de l'eau est variable.

H7 : La température à tout moment et à tout point d'espace est constante.

La méthodologie de modélisation consiste à générer dans un premier temps un réseau de tubes capillaires et calibrer ses propriétés pour coïncider aux propriétés d'un matériau donné (porosité, conductivité hydraulique en saturé) obtenues par des essais de laboratoire ([BEC 06]). La structure ainsi calibrée est en suite utilisée pour reproduire la cinétique capillaire, la courbe d'isotherme de sorption-désorption du matériau poreux et de sa perméabilité relative.

II.3.2. Génération d'un réseau poreux équivalent au milieu poreux et résolution du problème d'écoulement en saturé

Plusieurs stratégies peuvent être utilisées pour produire un réseau poral équivalent à la porosité d'un matériau poreux. Les approches de type lattice par exemple utilisent une grille de nœuds liés entre eux avec des conduits en suivant un numéro de coordination, caractéristique de la lattice.

Nous utilisons ici les capacités du logiciel 3FLO pour produire des réseaux aux caractéristiques statistiques données par des distributions statistiques choisies. Dans l'esprit de 3FLO un conduit est obtenu par l'intersection de deux plans et limité par deux autres plans. Il est possible de générer des familles de plans (ensemble de plans ayant la même orientation) d'une densité (ou une distance entre deux plans successifs) qui peut être une fonction aléatoire, permettant ainsi en cas de besoin de générer des longueurs suivant une fonction de distribution statistique.

On choisit de présenter la porosité d'un matériau quelconque via 15 familles de conduits à densité éventuellement différentes. On peut démontrer sur la base de considérations stéréologiques (voir par exemple [ZHU 06] ou [BAZ 86]) que la discrétisation d'une propriété directionnelle en 15 directions astucieusement choisies permet de reproduire une distribution isotrope de cette propriété. Dans un système de coordonnées cartésiennes défini par les vecteurs directeurs e_1, e_2, e_3 ces 15 directions sont présentées par les 15 vecteurs directionnels ci-dessous (voir aussi la Figure 2.1) :

$$\begin{aligned}
 N^1 &= e_1 & N^2 &= e_2 & N^3 &= e_3 \\
 N^4 &= re_1 + se_2 + te_3 & N^8 &= se_1 + te_2 + re_3 & N^{12} &= re_1 + se_2 + te_3 \\
 N^5 &= re_1 - se_2 + te_3 & N^9 &= se_1 - te_2 + re_3 & N^{13} &= re_1 - se_2 + te_3 \\
 N^6 &= re_1 - se_2 - te_3 & N^{10} &= se_1 - te_2 - re_3 & N^{14} &= re_1 - se_2 - te_3 \\
 N^7 &= re_1 + se_2 - te_3 & N^{11} &= se_1 + te_2 - re_3 & N^{15} &= re_1 + se_2 - te_3
 \end{aligned}
 \tag{2.20}$$

$$\tau = \frac{\sqrt{5}+1}{2} \quad r = \frac{\sqrt{5}+1}{2} \quad s = \frac{1}{2} \quad t = \frac{1}{2\tau}$$

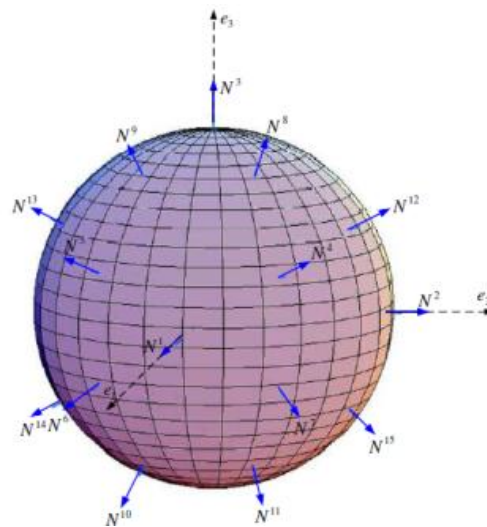


Figure 2.1: Système discret formé par 15 plans [ZHU 06].

Si la distribution isotrope est obtenue en attribuant à chaque direction la même densité, d'autres types de distributions (par exemple des distributions anisotropes d'une classe donnée) peuvent être obtenue par attribution des densités différentes aux différentes directions.

Une distribution isotrope de tubes est alors obtenue en générant 15 familles de plans, chacune orientée selon un des vecteurs directionnels et chacune comportant le même nombre de plans.

La distance entre deux plans parallèles d'une même famille est contrôlée par l'utilisateur et peut suivre une quelconque distribution statistique (par exemple uniforme) et contrôle ainsi la longueur des conduits.

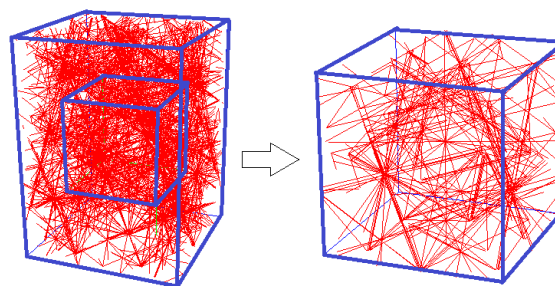


Figure 2.2: Exemple d'un réseau des pores et un extrait au centre de l'échantillon généré.

Une fois la géométrie du réseau poreux construite (figure 2.2) on attribue à tout conduit une conductivité hydraulique selon une loi statistique choisie par avance. Afin de pouvoir construire un réseau poral qui soit équivalent au système poreux en termes du volume et de

conductivité, on choisit d'attribuer à chaque tube un rayon tiré d'une distribution statistique ce qui permet de calculer pour chaque conduit un volume et une conductivité (calculée par exemple selon la loi de Poiseuille ou de Kozeny Carman).

Au niveau de l'écoulement, l'équation de conservation de masse pour chaque conduit peut s'écrire sous la forme proposée par Karasaki (1987) [3FL 06]:

$$C^* \cdot \text{div}(\overrightarrow{\text{grad}h}) = A_s \cdot S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.21)$$

Où C^* est le débit volumétrique total du conduit, h est la charge hydraulique, x est l'abscisse le long du conduit, A_s , S_s sont respectivement la section de l'élément et son emmagasinement spécifique et t est le temps.

Après discrétisation en espace (en utilisant l'équation 2.21) et en temps (en utilisant la méthode θ) de l'équation de conservation, on obtient la forme matricielle discrétisée suivante :

$$\left[\frac{\{S\}^t}{\Delta t} + \theta \{C\}^t \right] \times \{h\}^{t+\Delta t} = \{F\} + \left[\frac{\{S\}^t}{\Delta t} - (1 - \theta) \{C\}^t \right] \{h\}^t \quad (2.22)$$

Où :

$\{S\}$ est la matrice d'emmagasinement du système dont les valeurs sont les suivantes :

$$\{S\}_{ii} = \sum \frac{2A_s l S_s}{6} : \text{somme des conduites reliées au noeud } i$$

$$\{S\}_{ij} = \begin{cases} \frac{A_s l S_s}{6} & \text{si les noeuds } i \text{ et } j \text{ sont reliés par un conduit} \\ 0 & \text{si non} \end{cases}$$

$\{C\}$ est le vecteur de matrice des conductivités :

$$\{C\}_{ii} = \begin{cases} \sum \frac{C}{l} & \text{si les conduits sont reliés à } i \\ \frac{C}{l} & \text{si non} \end{cases}$$

$\{F\}$ est le vecteur des conditions aux limites ; $\{h\}$ est celui des charges hydrauliques (inconnue), l est la longueur du conduit, Δt est le pas du temps, θ est le coefficient de relaxation. Le pas de temps est choisi de façon à ce qu'une perturbation hydraulique, au cours d'un pas de temps reste à l'intérieur de la longueur d'un pore. Si la vitesse d'écoulement dans un tube i est v_i et sa longueur est L_i le pas de temps doit satisfaire la condition suivante :

$$\Delta t \leq \text{Min} \left\{ \frac{L_i}{v_i} \right\} \quad (2.23)$$

L'équation (2.22) représente un système d'équations linéaires résolu par 3FLO en utilisant la méthode du gradient conjugué, pré-conditionné par une décomposition de Choleski incomplète [3FL 06].

II.3.3. Algorithme de résolution du problème de l'écoulement diphasique

Afin de pouvoir modéliser les écoulements en partiellement saturé, où les tubes du réseau capillaire peuvent contenir deux fluides immiscibles (liquide et gaz dans le cas de cette étude) un algorithme d'avancement du fluide dans un tube a été développé dans un langage interne à 3FLO.

L'idée de base de l'algorithme pour l'écoulement en partiellement saturé est d'utiliser les mêmes équations que dans le cas saturé en les modifiant de façon appropriée, en prenant en compte les forces capillaires et en les ajoutant le cas échéant aux forces motrices de l'écoulement de la phase liquide. Ces forces capillaires sont générées au niveau des ménisques, résultant d'une succion présente dans l'espace poreux selon la loi de Laplace (voir annexe B).

Pour un conduit donné, l'état et le niveau du liquide dépendent des pressions aux nœuds (extrémités du conduit), la force capillaire et la force de gravité (poids du liquide pénétrant le conduit). La différence de la charge hydraulique entre deux nœuds (extrémités) d'un conduit s'écrit donc dans ce cas sous la forme :

$$\Delta h = \frac{1}{\rho g} (P_2 - P_1 \pm P_c - P_e) = \frac{1}{\rho g} \left(P_2 - P_1 \pm \frac{2\sigma \cos\theta}{r_c} - \rho g h_f \right) \quad (2.24)$$

Où Δh est la différence de la charge hydraulique entre deux extrémités du conduit, $\delta P = P_2 - P_1$ est la différence de pression entre deux nœuds du conduit; P_e est la pression due au poids du liquide entré dans le conduit; P_c : pression capillaire dans le conduit, le signe de P_c dépend du sens de l'écoulement; ρ : densité du liquide; h_f : hauteur du front du liquide (figure 2.3).

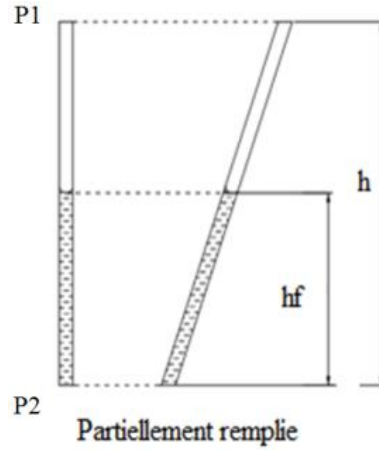


Figure 2.3: Front du liquide d'une conduite.

En injectant la différence de la charge hydraulique de l'équation (2.24) dans l'équation (2.19) et en vertu de l'hypothèse d'un écoulement 1D dans les conduits, on obtient l'équation d'écoulement capillaire en partiellement saturé sous la forme algébrique suivante :

$$q = C \cdot \overrightarrow{\text{grad}h} = C \frac{\Delta h}{\Delta x} = C \cdot \frac{1}{\rho g \Delta x} \left(P_1 - P_2 \pm \frac{2\sigma \cdot \cos\theta}{r_c} - \rho g h_f \right) \quad (2.25)$$

Dans le cas d'un conduit rempli, le ménisque n'existe plus et la force capillaire devient nulle : le front de l'eau dans le tube coïncide avec l'extrémité du conduit, et donc le conduit est considéré saturé et une variable interne indique cet état de saturation. La saturation du VER peut être déterminée en additionnant les volumes de tous les tubes capillaires remplis et les rapportant sur le volume total du réseau.

Dans cet algorithme de l'écoulement en partiellement saturé la condition nécessaire (mais pas suffisante) de remplissage d'un tube est identique à celui de la théorie de percolation : un tube ne peut pas se remplir si au moins un de ses voisins connectés directement ne soit déjà rempli (les tubes connectés avec les frontières sont voisins des conditions aux limites). Comme indiqué précédemment cette condition assure la continuité du cluster de la phase liquide dans le matériau. Du point de vue technique on introduit à chaque nœud une variable indiquant à ce nœud la présence ou pas de la phase liquide. Si au moins un des tubes arrivant à ce nœud est saturé alors la valeur nodale de cette variable est égale à 1 autorisant ainsi le remplissage des tubes connectés à ce nœud (figure 2.4).

A un instant donné, un conduit peut se trouver dans l'un des états suivants : rempli, partiellement rempli, piégé ou vide (figure 2.4). Un conduit peut être « rempli » ou « partiellement rempli » si au moins un de ses deux nœuds est connecté à une source de liquide (la frontière par exemple) ou à un autre conduit rempli.

- Si les deux nœuds du conduit ne sont pas en contact avec du liquide, le conduit est « vide ».
- Un conduit est considéré « piégé » si ses nœuds sont en contact avec la phase liquide et que la pression à l'intérieur du conduit est à l'équilibre avec le poids du liquide, si bien que le front du liquide (l'interface des phases) ne peut pas bouger.

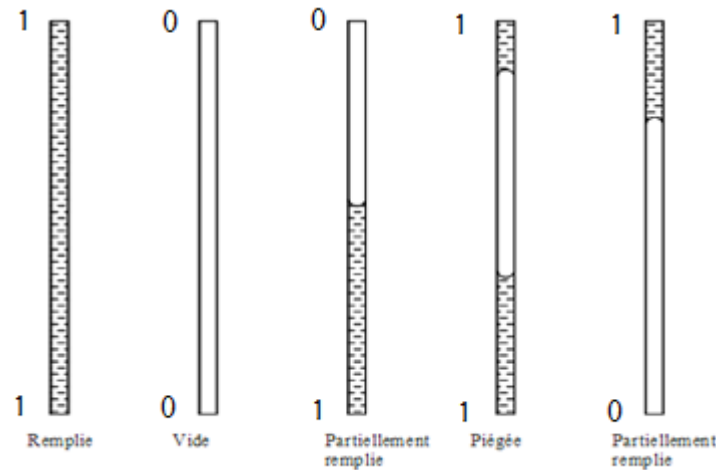


Figure 2.4: Définition de l'état hydrique des conduits et de la variable nodale de la présence du liquide.

L'écoulement au sein du matériau se fait donc par le biais des conduits ayant la variable nodale de présence du liquide (qui est mise à jour à chaque pas de calcul) égale à 1 dans les deux nœuds et ayant une différence de la charge hydraulique ΔP favorable.

II.4. Application : modélisation de l'écoulement en saturé et partiellement saturé du tuffeau blanc

La méthodologie de modélisation présentée ci-dessus a été appliquée pour décrire le comportement hydrique et hygroscopique d'un matériau poreux largement utilisé dans la construction des bâtiments historiques dans la région Centre qui est la pierre du tuffeau blanc. C'est un matériau fortement poreux (la porosité est de $48,7\% \pm 0,5$), tendre qui se prête bien à la taille. Cette pierre est intensivement étudiée notamment au sein des différentes équipes de recherche de l'Université d'Orléans et ces propriétés hydro-(hygro)-mécaniques sont bien connues [BEC 06, ROZ 04]. On utilisera dans cette partie certains résultats des essais de laboratoire obtenu par ces auteurs [BEC 06] comme des données de départ et certains autres comme données de comparaison. En appliquant la méthodologie de construction du réseau

poral décrite dans le paragraphe précédent, on construira dans un premier temps un milieu poreux équivalent en terme de porosité et d'écoulement en saturé avant de déduire par simulation la courbe d'absorption et la perméabilité relative.

II.4.1. Génération d'un réseau poral de porosité

Si, en principe, la reconstitution d'un réseau poral peut se faire à partir de toute information sur la structure porale d'un matériau, le plus souvent cette information est connue sous forme d'une courbe de porosimétrie au mercure. Différents auteurs ont attiré l'attention sur une sur-interprétation de ce type de courbe et sur le fait que les rayons d'accès de pores ne sont pas forcément les rayons de pores proprement dits [SID 00, GIE 06, RIG 01, RIG 02]. La méthode de construction du réseau poral à partir des différents moments de la distribution des rayons de pores semble capable de reproduire non seulement l'allure générale d'une courbe de porosimétrie mais aussi les paramètres statistiques attachés à la distribution des pores (dimension fractale, modalités de distribution etc) [NAG 05].

On utilise comme donnée d'entrée la courbe différentielle (ou la courbe incrémentale du volume de pores) obtenue expérimentalement par intrusion de mercure (figure 2.5) [BEC 06]

La courbe expérimentale de la porosité est discrétisée en un ensemble de 18 classes de pores. Le nombre de classes de pores est arbitraire et est un compromis entre une description fine de la distribution des rayons de pores et la complexité numérique de cette description. Une classe de pores regroupe des pores ayant les rayons compris entre les valeurs limites de la classe : un pore j appartient à la classe i seulement si son rayon r_j satisfait la condition $r_i^{\min} \leq r_j \leq r_i^{\max}$ avec $r_i^{\min}$ et $r_i^{\max}$ étant les rayons limites de la classe i de pores. Au sein d'une même classe de pores les rayons sont supposés être distribués uniformément par simplicité mais toute autre distribution connue pourrait être prise en compte.

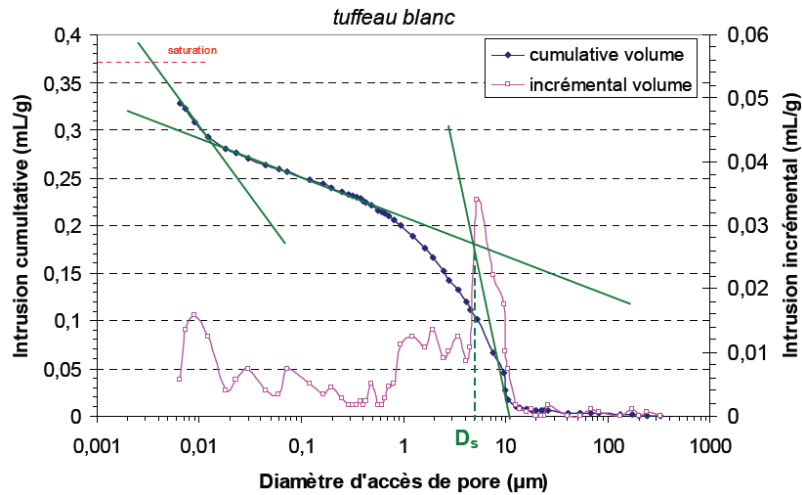


Figure 2.5: Distribution porale par la porosimétrie [BEC 06].

En connaissant la distribution des rayons de pores à l'intérieur d'une classe, la longueur moyenne d'un tube-pore (contrôlée à la phase de génération des conduits, et donc, connue) ainsi que le volume différentielle que les pores de cette classe occupent on peut calculer le nombre de pores de cette classe à générer N_c . On distribue alors aux conduits d'une famille de pores (une famille = une orientation de tubes, $N_f = 15$) de façon aléatoire $N_c/15$ rayons tirés de la distribution des rayons de classe (ici uniforme). En répétant cette procédure pour chacune des 18 classes de pores identifiées sur la courbe de la porosimétrie on peut construire un réseau de conduits dont le volume coïncide exactement au volume poral mesuré.

Pour le cas des matériaux à très forte porosité la procédure ci-dessus conduit à la génération d'un nombre important de tubes étant donné que les rayons de pores sont souvent assez faibles. Cela peut conduire à des calculs numériques très lourds dus à un nombre important de degrés de liberté (plusieurs centaines de milliers de tubes, voire des millions de tubes sont nécessaires pour simuler un volume de quelques millimètres cube d'un matériau à forte porosité).

Pour garder une complexité raisonnable des calculs tout en gardant la finesse de description statistique acceptable, on utilise le concept des « groupes de tubes » (pipe bundle). Selon ce concept l'ensemble de pores ayant les mêmes caractéristiques géométriques (direction, rayon) est remplacé par un élément 1D (pipe-bundle) avec un comportement équivalent. Chaque élément pipe-bundle de rayon R représente ainsi un groupe de n pores de propriétés uniformes de rayon r (figure 2.6), la section de l'élément est égale à la somme des sections de pores correspondants :

$$\pi R^2 = n\pi r^2 \quad (2.26)$$

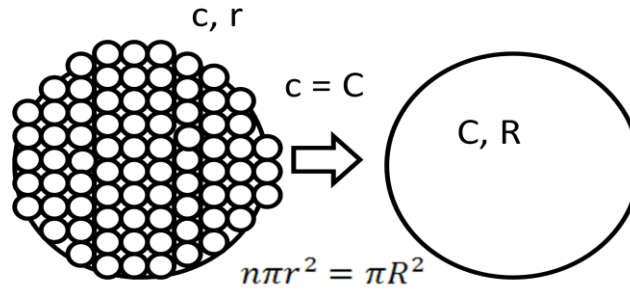


Figure 2.6: Illustration schématique du concept de pipe-bundle comme un groupe de n conduits uniformes

Quant à la conductivité hydraulique de pipe-bundle cela reste à ajuster à partir des hypothèses acceptées du lien entre la forme des tubes et le rayon hydraulique. Pour une section circulaire la conductivité hydraulique de Poiseuille donne :

$$c = \frac{r^2}{8} \quad (2.27)$$

Afin d'obtenir une expression de type de Kozeny-Carman pour un système de pores à morphologie connue une cellule élémentaire microscopique constitue d'un pore et d'une matrice est étudiée en supposant que le VER est obtenu par une répétition de la cellule élémentaire, si bien que la porosité du matériau est identique à la porosité de la cellule. Il est alors possible de calculer une conductivité de Kozeny-Carman par l'expression ci-dessous [PEN 08] :

$$k = \frac{\phi^3}{c^*(1-\phi)^2 S^2} \quad (2.28)$$

Où $c^* = c\tau^2$, c , S , ϕ et τ sont respectivement la constante de Kozeny, la surface spécifique, la porosité et la tortuosité du matériau.

Dans l'annexe C, les conductivités de différentes formes de la section de pores sont calculées selon la formule de Kozeny-Carman. Le tableau 2.1 ci-dessous résumant les valeurs de perméabilité de quelques cellules élémentaires (1 seul tube) estimées par cette procédure.

Les cas de l'ellipse 10, 20, 30 et 40 correspondent respectivement à un rapport d'aspect du grand axe sur le petit axe de 10, 20, 30 et 40.

Pour chacun des pipe-bundles une fois les rayons des pores et le nombre de pores inclus dans le bundle connu, on peut calculer une conductivité en faisant une hypothèse sur la morphologie de la section du tube.

Tableau 2.1: Conductivité hydraulique d'une conduite en fonction de la forme selon Kozeny-Carman

Section	Circulaire	Triangle	Carrée	Rectangle
K	$\frac{\phi}{c4\pi(1-\phi)^2\tau^2} S$	$\frac{\phi}{c12\sqrt{3}(1-\phi)^2\tau^2} S$	$\frac{\phi}{c16(1-\phi)^2\tau^2} S$	$\frac{\phi}{c16(1-\phi)^2\tau^2} S$
Section	Ellipse 10	Ellipse 20	Ellipse 30	Ellipse 40
K	$\frac{\phi}{c20,2\pi(1-\phi)^2\tau^2} S$	$\frac{\phi}{c40,1\pi(1-\phi)^2\tau^2} S$	$\frac{\phi}{c60,06\pi(1-\phi)^2\tau^2} S$	$\frac{\phi}{c80,05\pi(1-\phi)^2\tau^2} S$

Nous utiliserons dans les simulations qui vont suivre un échantillon de dimensions $50 \times 50 \times 70 \text{ mm}^3$. Le système poreux simulant l'espace poreux de la pierre se constitue de 14 614 groupes de conduits avec des rayons répliquant la distribution des rayons de pores donnée par la porosimétrie au mercure. La porosité totale de l'échantillon ainsi générée est de 49.44% contre 48.7+/- 0.5% mesuré.

II.4.2. Simulation d'écoulement saturé et estimation de la conductivité hydraulique

Dans les tests ci-dessous, le fluide mouillant est de l'eau pure avec la tension superficielle égale à 0.072 N/m et la viscosité de 10^{-3} Pa.s .

Pour l'identification de la conductivité hydraulique en saturé on simule numériquement un essai de mesure de conductivité en conditions saturées. Pour cela on part d'un état saturé uniforme de tous les tubes, sans pression de pores, i.e avec une charge hydraulique, à tout point, égale à la coordonnée z : $h(x,y,z,0)=h(z)=z$.

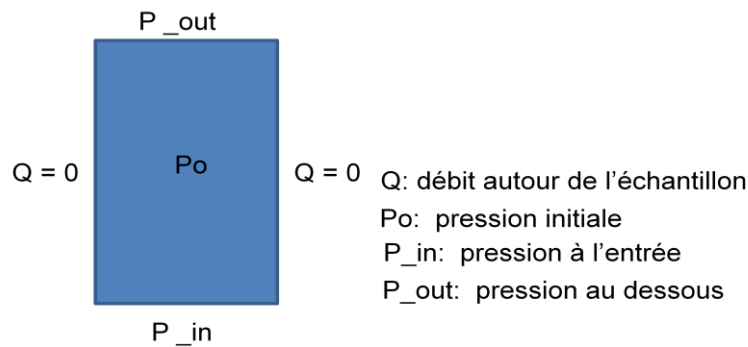


Figure 2.7: Schéma de calcul de la conductivité hydraulique en saturé régime permanente.

L'échantillon est alors soumis à un gradient de pression entre ses deux frontières (supérieure et inférieure) alors que des conditions de flux nuls lui sont imposées sur les surfaces latérales (figure 2.7). On calcule le flux sortant (ou entrant) comme la somme des flux de tous les tubes qui ont une des extrémités liée à une base ce qui permet en suite, en vertu de la loi de Darcy appliquée à l'ensemble de l'échantillon de calculer la conductivité hydraulique de la pierre.

Selon la loi de Darcy, rappelée ici le débit volumique Q est écrit en fonction de la conductivité hydraulique effective K , la surface des bases de l'échantillon et le gradient hydraulique $\frac{\Delta h}{\Delta z} = \frac{\Delta h}{\Delta L}$ par :

$$Q = k \frac{S \Delta P}{\eta L} = KS \frac{\Delta h}{L} \quad (2.29)$$

Les résultats de ces simulations sont présentés dans le tableau 2.2 en fonction de la forme supposée des sections des tubes capillaires. Les cas indiqués comme « ellipse10 » à « ellipse 40 » correspondent à un rapport d'aspect de la section elliptique (ratio du grand axe avec le petit axe d'ellipse) de 10, 20, 30 et 40.

Tableau 2.2: Conductivité hydraulique de l'échantillon en fonction de forme.

Forme	Poiseuille	Circular	Rectangular	Triangular
K m/s	3.08E-05	2.32E-05	1.82E-05	1.40E-05
Forme	Ellipse 10	Ellipse 20	Ellipse 30	Ellipse 40
K m/s	4.60E-06	2.32E-06	1.55E-03	1.00E-06

En vue des résultats de ces simulations les prédictions numériques de la conductivité hydrique selon Poiseuille ou Kozeny-Carman pour les tubes circulaires ne se différencient pas

nettement. Ces différences deviennent plus importantes lorsque la forme des sections dévie d'un tube circulaire vers un tube elliptique de plus en plus aplati. Cela confirme le rôle important, du moins dans le cadre des hypothèses de cette étude, de la surface spécifique sur les propriétés effectives hydriques. La section circulaire a une surface minimale de contact avec les fluides, conduisant généralement à une conductivité maximale. La comparaison de ces résultats avec la valeur expérimentale de la conductivité hydraulique de tuffeau, de l'ordre de $(9,2 \pm 0,8) \cdot 10^{-7} \text{ m/s}$, montre que parmi les réseaux de pores construits celui avec des sections de forme elliptique avec un rapport d'aspect de 40 est celui qui se rapproche au mieux de la réalité. La forme aplatie des tubes coïncide plus à l'idée qu'on se fait des éléments les plus conducteurs du réseau poral. Il faudra néanmoins interpréter ces résultats avec prudence, plus en termes d'équivalence de la conductivité que d'une forme prédominante de pores. Les écarts entre les prédictions numériques et les résultats expérimentaux rappellent que les pores ont en réalité des formes plus complexes que celles considérées ici. Néanmoins, pour la pierre étudiée, le rapport des sections des pores avec leurs périmètres s'approche de celui des ellipses à rapport d'axes d'environ 40. On retient pour la suite des simulations le réseau de conduits avec une forme elliptique identique au cas ellipse 40 pour tous les pores.

II.4.3. Estimation des propriétés hydriques effective du tuffeau en partiellement saturé.

II.4.3.1. Simulation de la remontée capillaire

Pour réaliser un essai d'imbibition, un échantillon est initialement séché ce qui numériquement revient à mener la pression liquide à une valeur uniforme initiale égale à P_o . En suite une des bases de l'échantillon est mise en contact direct avec de l'eau libre et on observe le front de saturation en fonction du temps (figure 2.8). L'imbibition est fortement liée à la taille et à la forme des pores ainsi qu'à la connectivité des pores. La force motrice de remonté capillaire et la tension surfacique de l'eau dans les ménisques capillaires, dont l'intensité est inversement proportionnelle avec le rayon des pores selon la loi de Laplace (voir Annexe B).

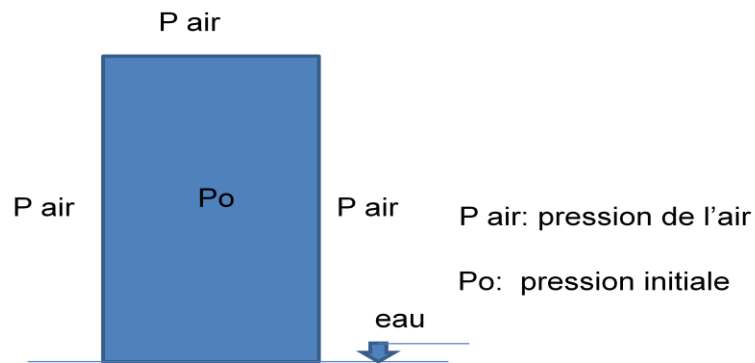


Figure 2.8: Schéma de calcul du test d'imbibition.

On considère alors un état initial uniforme de la pression d'eau (où une humidité relative (HR) équivalente à une succion) de -400 MPa. Cette même succion règne dans tous les tubes ainsi que dans l'environnement autour de l'échantillon, et donc sur toutes ses frontières. La mise en contact avec l'eau est décrite en imposant instantanément une pression capillaire nulle sur la base inférieure de l'échantillon, la variable de la présence d'eau (section II.3.3.) de tous les nœuds se trouvant dans cette base devient donc 1 et ne change pas en cours de simulation (le contact avec de l'eau sur cette base est donc maintenu). L'écoulement commence par les conduits ayant au moins un nœud qui contient de l'eau, donc par les conduits connectés avec la base inférieure dans notre cas et se propagent vers les autres tubes.

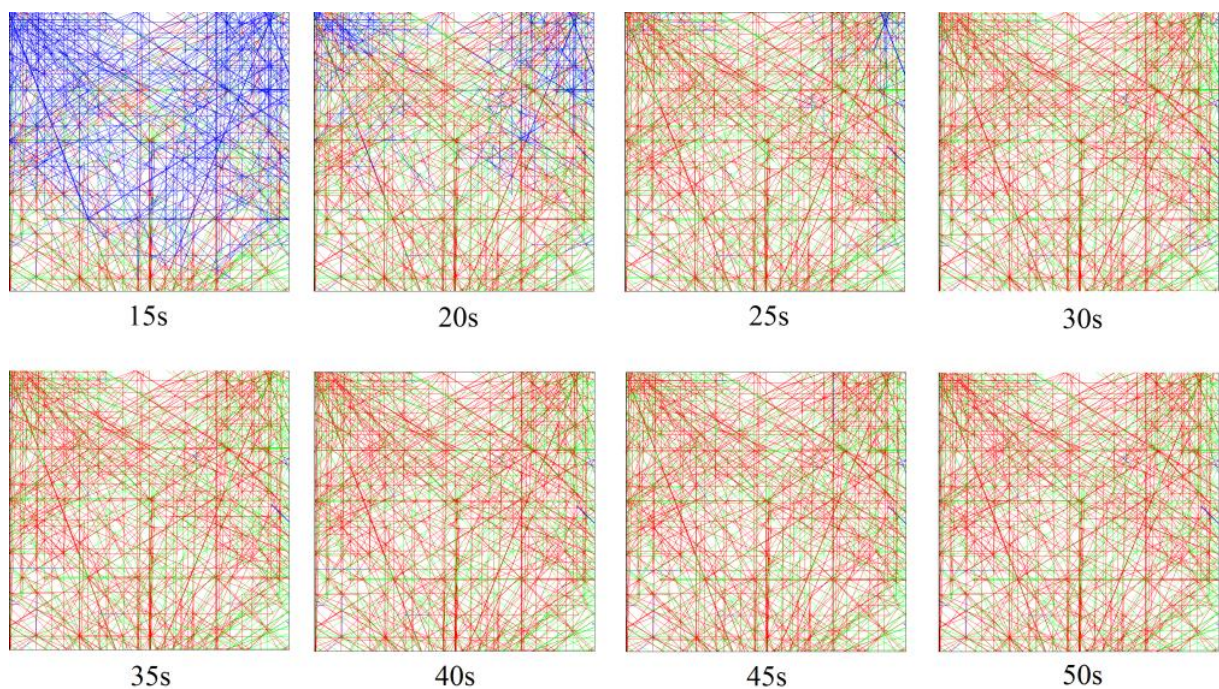


Figure 2.9: Etat hydrique des conduits dans le système de pores en fonction du temps : tubes bleus-vides, tubes verts-partiellement remplis, tubes rouges-remplis.

Sur la figure 2.9, on présente l'état d'un fragment du réseau poreux à différents instants montrant un écoulement partiellement saturé. Il est difficile à définir à partir de ces résultats l'avancement d'un front d'écoulement puisque les tubes remplis se situent un peu partout dans l'échantillon, bien qu'il existe une zone dans laquelle à un moment donné aucun tube n'est complètement vide (donc saturé). Néanmoins il est possible de suivre de façon objective l'évolution de la saturation en fonction racine du temps (figure 2.10).

La courbe présentée sur la figure 2.10 n'est pas une courbe de remontée capillaire proprement dit et donc elle ne peut pas s'interpréter comme telle. Notons néanmoins que son allure bilinéaire distingue singulièrement des courbes de remontée capillaire. On peut spéculer que cette allure bi-linéaire met en évidence deux systèmes d'écoulement, l'un plus rapide qui se remplit rapidement et l'autre plus lent. Si l'entrée d'eau dans les tubes capillaires par le contact direct avec d'eau est à l'origine du premier système, la progression lente de la saturation dans la deuxième partie est liée avec le remplissage de gros diamètres se trouvant dans la partie supérieure de l'échantillon.

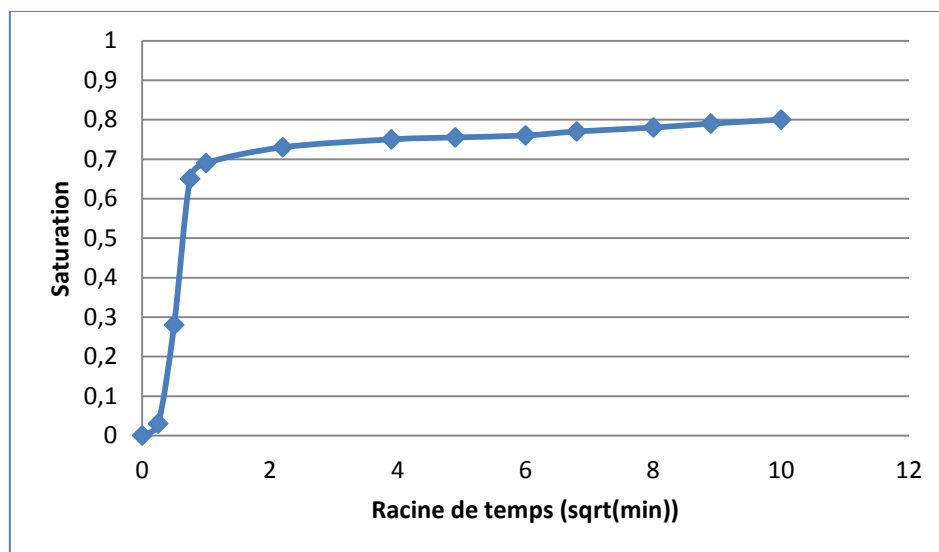


Figure 2.10: Evolution de la saturation en fonction de racine du temps.

Cette distribution spatiale de tubes à des états de saturation variables est la conséquence à la fois de la distribution des rayons des tubes et de leur connectivité. En particulier les résultats numériques mettent en évidence l'existence au sein du matériau des tubes partiellement saturés qui y restent définitivement, tout au long de l'essai.

II.4.3.2. Simulation de l'isotherme de sorption-désorption

Dans cette section, nous nous intéressons à la simulation de la courbe de sorption-désorption de la pierre de tuffeau. Cette courbe qui représente l'évolution du degré de saturation en fonction de la pression capillaire pour une température constante est une donnée importante pour les modèles macroscopiques et est identifiée par des essais de laboratoire [HOX 07, COU 95].

En pratique on place un échantillon dans un environnement à HR contrôlée (par exemple dans une enceinte fermée avec une solution saline qui permet de fixer le HR) et par des mesures de prise de masse on déduit la saturation (figure 2.11) une fois l'équilibre hydrique entre l'échantillon et l'environnement établi. Par des mesures répétitives à différents niveaux de HR on construit la courbe de rétention dans le plan (saturation : humidité relative ou pression capillaire).

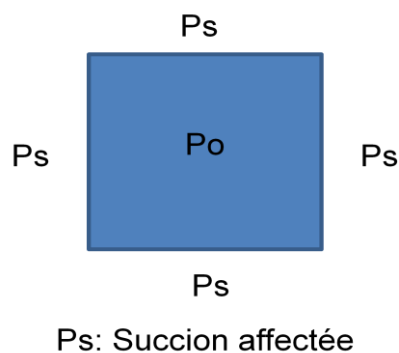


Figure 2.11: Présentation schématique des conditions numériques du test isotherme d'adsorption.

Numériquement, pour obtenir un point de la courbe on part d'un état hydrique connu de l'échantillon et on impose sur toutes ses frontières une pression capillaire fixe P_s coïncidant à l'humidité souhaitée selon la loi de Kelvin et on maintient ces conditions hydriques au cours de l'essai (figure 2.11). La variable de la présence d'eau est imposée à 1 sur toutes les frontières. On peut suivre l'évolution en fonction du temps des échanges hydriques entre l'échantillon et l'environnement via la saturation totale. Un point de la courbe est obtenu une fois la saturation stabilisée. On impose alors une autre pression capillaire pour obtenir un autre point sur la courbe.

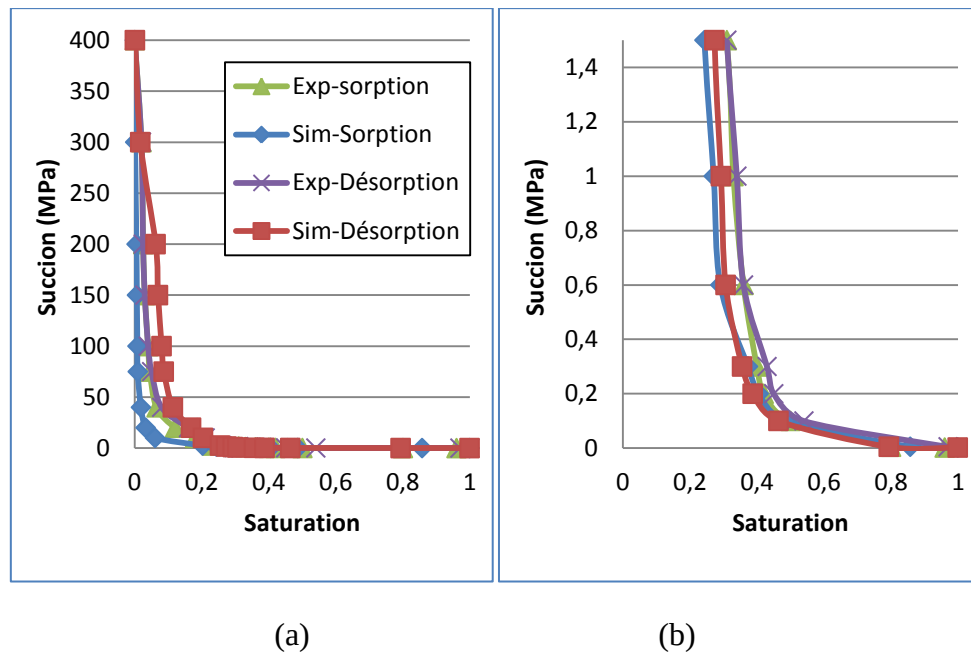


Figure 2.12: La courbe de rétention d'eau (a) et son extrait (b).

Tableau 2.3: Niveau de saturation en fonction de la succion dans les deux processus de saturation et désaturation

Pc	Expérimental		Simulation	
	Sorption	Désorption	Sorption	Désorption
400	0.0000	0	0.000027	0.000180
300	0.0200	0.0200	0.001115	0.016198
200	0.0250	0.0250	0.005237	0.061852
150	0.0300	0.0300	0.006404	0.068874
100	0.0400	0.0400	0.007927	0.079688
75	0.0450	0.05	0.008719	0.086162
40	0.0650	0.08	0.018272	0.113470
20	0.1200	0.16	0.032187	0.167778
10	0.1800	0.21	0.060381	0.203232
2.5	0.2300	0.26	0.202191	0.254116
1.5	0.3100	0.31	0.243169	0.272918
1	0.3300	0.34	0.270837	0.292363
0.6	0.3600	0.36	0.290602	0.306198
0.3	0.4000	0.43	0.372955	0.355481
0.2	0.4200	0.45	0.404960	0.387034
0.1	0.5000	0.54	0.486154	0.463846
0.005	0.8000	0.97	0.857183	0.793183
0.002	0.9600	1	0.998890	0.998890

Dans cette simulation l'eau peut entrer dans l'échantillon par tous les conduits ayant un nœud sur les frontières et pour lesquels la valeur absolue de la différence de charge hydraulique dans les conduits Δh dépasse celle de la force capillaire P_s (équation 2.24). Dans le cas de séchage, le même principe est utilisé dans le sens inverse et une variable nodale appelée variable de vidange (similaire à la variable de présence d'eau) est utilisée pour montrer les extrémités des tubes où la sortie d'eau en forme de vapeur est autorisée.

Les résultats des simulations numériques sont résumés dans le tableau 2.3, et les graphiques 2.12 a et b où les deux courbes (d'absorption et désorption) sont comparées avec les courbes expérimentales.

Les courbes des simulations numériques suivent qualitativement les courbes expérimentales (figure 2.12 a et b), néanmoins quantitativement des différences s'apparaissent pour des saturations inférieures à 0.2 où l'incertitude sur les résultats expérimentaux est plus grande.

Nous observons une hystérésis entre le chemin de séchage et de saturation similaire à celle observée expérimentalement. Néanmoins, l'hystérésis de la simulation est plus forte que celle expérimentale. Dans ces simulations, le transport diffusif est négligé. En réalité la diffusion interne peut conduire à une condensation d'un film liquide sur les parois des pores permettant de former une connexion hydraulique continue dans le réseau poral même pour les pores partiellement-saturés [BEC 06]. Cela explique un nombre plus importants (donc un volume plus important) de tubes piégés dans nos simulations et donc une hystérésis plus forte.

II.4.3.3. Test de la perméabilité relative

La perméabilité relative bien qu'une caractéristique qui conditionne fortement l'écoulement non-saturé est probablement la moins connue et la plus difficile à mesurer en laboratoire. Définie comme un ratio de la perméabilité effective (ou conductivité hydraulique) à un niveau donné de saturation sur la perméabilité effective (ou conductivité hydraulique) à l'état saturé, la perméabilité relative est donc une fonction aux valeurs bornées entre 0 et 1 :

$$K_{rel}(S_{lq}) = \frac{K(S_{lq})}{K(S_{lq}=1)} \quad (2.30)$$

En pratique, pour mesurer la perméabilité relative, l'échantillon est placé comme un bouchon entre deux enceintes fermées de HR constantes et différentes [BEC 06]. A cause des HR différentes dans les deux enceintes, l'échantillon est soumis à un gradient de pression partielle de vapeur d'eau entre les deux faces opposées. En mesurant les variations de masse des deux

enceintes, il est possible d'identifier le moment d'établissement de l'état d'écoulement permanent. On mesure alors le flux entrant (ou sortant) de l'échantillon et on définit la perméabilité relative en utilisant la loi de Darcy généralisée :

$$Q = KS \frac{\Delta h}{L} = K_{rel} K_{intrin} S \frac{\Delta h}{L} \quad (2.31)$$

Pour la modélisation numérique le schéma de calcul est un peu différent. On part d'un état initial avec une pression capillaire P_s constante dans l'échantillon. Pendant qu'une extrémité conserve la succion initiale P_s , l'autre est affectée par une pression légèrement décalée à la succion initiale, $P_s + \Delta P_s$. Sur les faces latérales un flux hydrique nul est imposé. Le mécanisme d'entrée d'eau dans les capillaires est le même que le test précédent (figure 2.13).

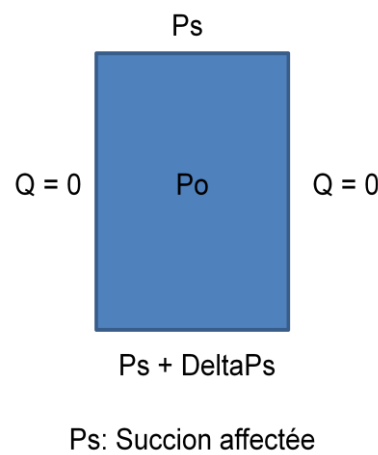


Figure 2.13: Schéma de calcul du test de perméabilité relative.

Rappelons que selon les hypothèses de départ la diffusion de vapeur d'eau est négligée et l'écoulement se déroule exclusivement dans les conduits complètement saturés si bien que seuls les tubes saturés connectés contribuent à la perméabilité effective. L'eau circule dans ce réseau par la différence de pression aux deux limites opposées. A l'équilibre, les débits entrant et sortant des deux extrémités de l'échantillon sont égaux. En cas de fortes succions, les tubes saturés n'arrivent pas à établir un réseau continu d'une extrémité à l'autre, l'eau ne peut pas passer à travers l'échantillon, et la perméabilité est donc nulle. Pour ce test, nous n'appliquons que les pressions capillaires P_s inférieures à 1MPa.

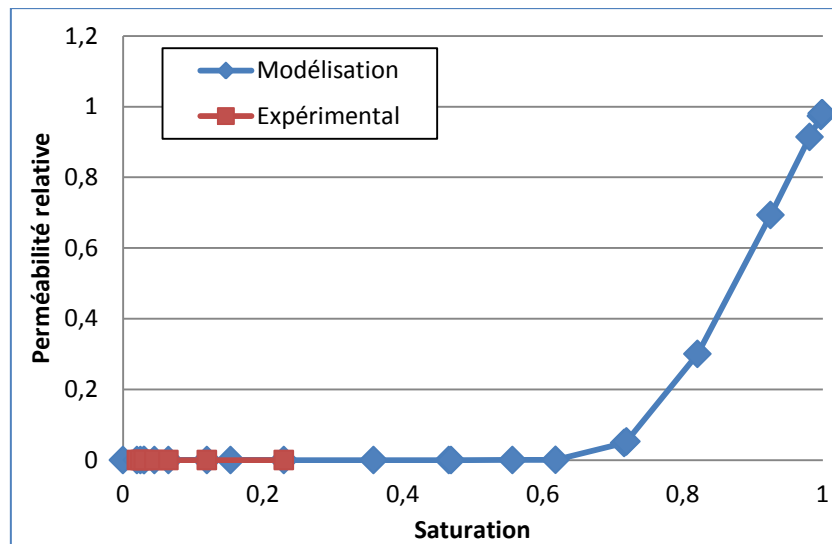


Figure 2.14: Perméabilité relative en fonction de la saturation.

La figure 2.14 résume la perméabilité relative en fonction de la saturation du tuffeau blanc obtenue par des simulations numériques. Quelques données expérimentales disponibles sur le tuffeau (bien qu'incomplètes) sont également présentées. En fait ces données ne sont disponibles que dans un intervalle de fortes succions, où la saturation et perméabilité relative sont quasi nulles. Quant aux résultats de modélisation sur le même intervalle, le nombre des pores qui sont saturés d'eau n'est pas suffisant à créer un réseau de transport de conduits continus d'une extrémité à l'autre et la conductivité hydraulique est donc quasi nulle. Par la suite, les simulations numériques sont effectuées avec toutes les gammes de succions.

Pour un intervalle de saturation compris entre 0 et 0,6, la saturation relative est très faible, elle correspond à une perméabilité presque nulle. Quand la saturation dépasse 0,6, la perméabilité relative commence à évoluer. Pour la saturation de l'échantillon entre 0,7 et 1, la perméabilité relative devient significative et au-delà d'une saturation de 0,8, la perméabilité relative augmente rapidement et approche 1 lorsque l'échantillon est saturé.

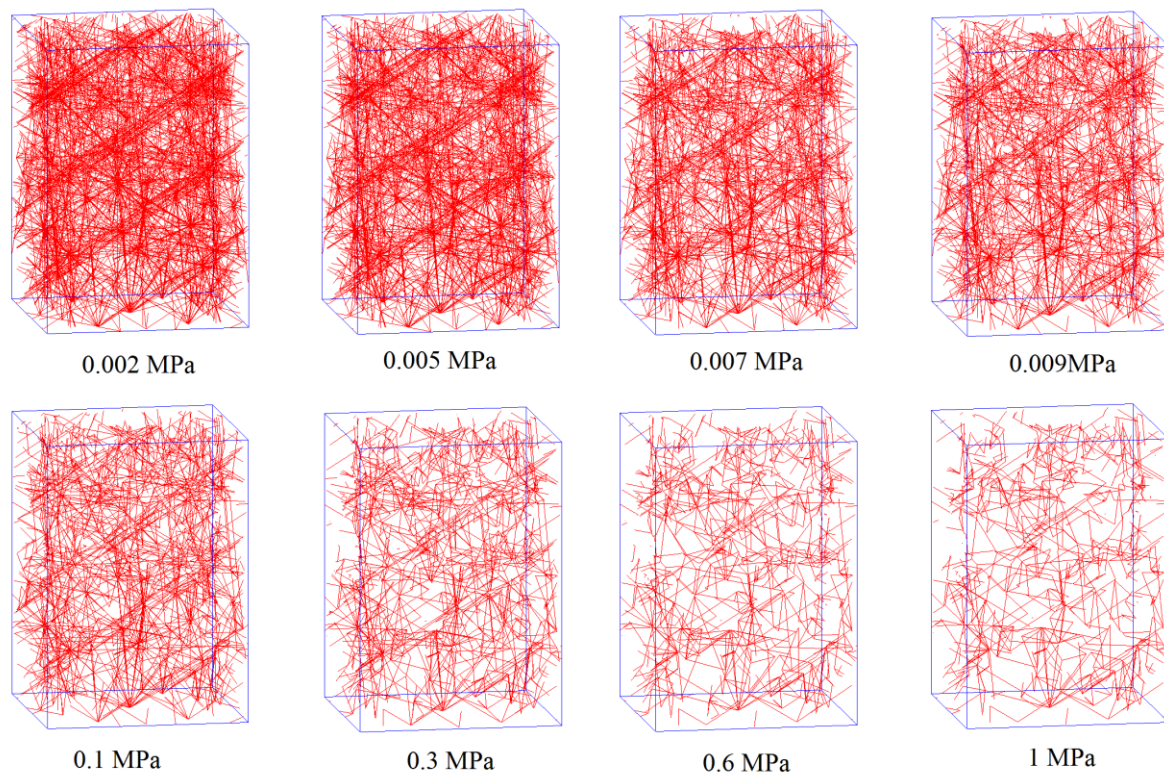


Figure 2.15: Réseau des pores saturés et connectés correspondant à des niveaux différents de succions.

Sur la figure 2.15 est illustré l'effet de l'hypothèse de transport d'eau exclusivement par des tubes capillaires saturés (en absence de toute diffusion). Sur cette figure on présente uniquement les tubes remplis et connectés qui participent dans l'écoulement pour une suction donnée. A une faible pression capillaire P_s , allant de 0.002 MPa à 0.005 MPa, la saturation de l'échantillon est élevée, ils existent dans cette condition plusieurs parcours qui connectent les deux extrémités de l'échantillon. Dans le cas des succions P_s entre 0.6 MPa et 1 MPa, la quantité des pores saturés est faible, les chemins d'une extrémité à l'autre sont très limités ce qui explique la une perméabilité relative proche de zéro.

II.5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une modélisation des écoulements diphasiques de milieux poreux. Nous avons choisi une approche microscopique directe qui considère l'espace poral comme étant un réseau de pores interconnectés. La représentation microscopique de ce réseau démontre l'influence de la morphologie et de la topologie sur le comportement hydrique du matériau. En appliquant les lois de Laplace, Kelvin, Jurin, Poiseuille pour les

capillaires microscopiques, nous avons ajouté dans le code de calcul des algorithmes permettant de modéliser le comportement hydrique dans la zone non-saturée du matériau.

Afin de valider ce travail de modélisation hydraulique, nous avons réalisé une application sur un matériau fortement poreux qui est la pierre de tuffeau. La construction du réseau poral à partir de la courbe de porosimétrie au mercure permet de construire un milieu poreux équivalent qui pourrait alors être utilisé pour identifier différentes caractéristiques hydriques. En saturé la conductivité hydraulique à l'eau est obtenue en considérant différentes morphologies de la section des tubes. Une forme elliptique aplatie semble produire le résultat le plus proche aux mesures de laboratoire. Les résultats numériques acquis par la modélisation suivent qualitativement les résultats des essais expérimentaux : conductivité hydraulique, imbibition, isotherme d'adsorption, perméabilité relative. Les simulations en non-saturé en gardant la même structure du réseau obtenu en saturé donnent des résultats qualitatifs et quantitatifs crédibles et proches des mesures au laboratoire. Les différences observées avec les mesures au laboratoire mettent en évidence l'impact de certaines des hypothèses notamment celle d'un transport exclusivement advectif sur la réponse effective.

Cette modélisation microscopique est le premier pas vers le couplage hydromécanique par une description directe de la microstructure. Elle ouvre des perspectives de compréhension de nombreux couplages qui jouent un rôle majeur dans le processus de vieillissement des matériaux poreux.

Annexes du chapitre II

Annexe B. Capillarité des milieux poreux

B.1. Loi de Laplace

Lorsque deux fluides immiscibles se partagent l'espace poreux alors des ménisques apparaissent dans les frontières entre les deux fluides.

Dans le cas d'un pore saturé par deux fluides immiscibles, l'interface a la forme d'une calotte sphérique (figure B.1) et la résultante des forces de pression qui s'exerce sur la surface est de :

$$T = (P_I - P_{II}) \times \pi r^2 \quad (B.1)$$

Où P_I, P_{II} sont les pressions des phases en contact I et II, r est le rayon de la calotte sphérique $r = R \cos \theta$ où R est le rayon de courbure de l'interface dont le centre est placé dans la phase I, θ est l'angle formé entre la tangente de l'interface et l'axe.

De plus, la résultante des tensions interfaciales γ_{I-II} entre les deux phases I et II, s'exerçant sur la bordure de la surface est la force T' donnée par:

$$T' = 2\pi r \cos \theta \cdot \gamma_{I-II} \quad (B.2)$$

A l'état d'équilibre, ces deux résultantes de forces sont égales, il en résulte la loi de Laplace :

$$P_I - P_{II} = \frac{2\gamma_{I-II} \cos \theta}{r} \quad (B.3)$$

Si l'interface entre deux phases est une courbure quelconque caractérisée par deux rayons principaux de courbure R'_I et R'_{II} , l'équation de Laplace s'écrit sous sa forme générale :

$$P_I - P_{II} = \gamma_{I-II} \left(\frac{1}{R'_I} + \frac{1}{R'_{II}} \right) \quad (B.4)$$

Le cas le plus rencontré est le cas de l'interface de l'eau avec de l'air dans un milieu partiellement saturé où la concavité de l'interface est tournée vers la phase gazeuse :

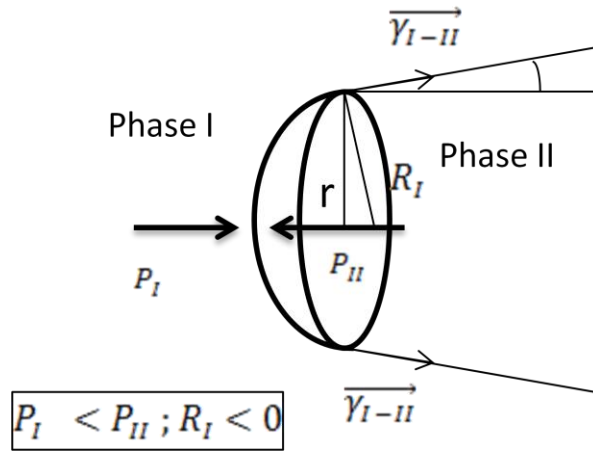


Figure B.1: Illustration de l'interface entre deux phases I et II d'après [LAS 01].

B.2. Loi de Jurin

Il est possible d'établir une relation entre la hauteur d'eau dans le tube capillaire, le rayon interne r du tube capillaire, l'angle de mouillage θ et la tension surfacique liquide-gaz γ_{LG} en écrivant l'équation de l'équilibre du système. On obtient aisément (figure B.2) la loi de Jurin :

$$h_c = \frac{2\gamma_{LG}\cos\theta}{\rho_L g r} \quad (B.5)$$

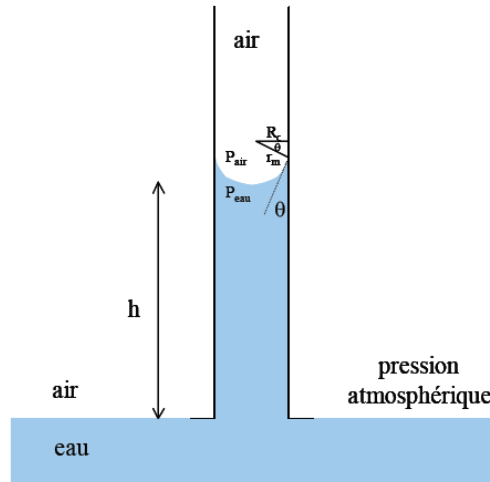


Figure B.2: Remontée du liquide dans un capillaire.

B.3. Loi de Kelvin

Dans le cas particulier lorsque le fluide mouillant est l'eau et le fluide non mouillant est l'air contenant une quantité de vapeur d'eau, les phases liquide et gazeuse de l'eau des deux côtés de l'interface doivent être en équilibre thermodynamique:

$$\mu_L(T, P_L) = \mu_G(T, P_G) \quad (B.6)$$

En exprimant le potentiel chimique sous la forme d'un développement limité du premier ordre autour de l'état saturé :

$$\mu_L(T, P_{sat}) + (P_L - P_{sat}) \left(\frac{\partial \mu}{\partial P} \right)_T = \mu_G(T, P_{sat}) + RT \ln \frac{P_G}{P_{sat}} \quad (B.7)$$

Où $\left(\frac{\partial \mu}{\partial P} \right)_T = v_L = 1/\hat{\rho}_L$ est le volume spécifique de l'eau ($m^3.mol^{-1}$), $\hat{\rho}_L$ est la densité volumique, P_{sat} est la pression de saturation correspondant à l'équilibre liquide-gazeux pour une interface plane à température T et $R = 8.314 J.mol^{-1}.K^{-1}$ est la constante des gaz parfaits.

En tenant compte que

$$\mu_L(T, P_{sat}) = \mu_G(T, P_{sat}) \quad (B.8)$$

L'expression (2.39) peut être simplifiée. En fait si on considère que la variation de pression de la phase liquide est généralement beaucoup plus grande que celle de la phase gazeuse à l'état de saturation ($|P_L - P_{sat}| \gg |P_G - P_{sat}|$), alors on peut remplacer $(P_L - P_{sat})$ par $(P_L - P_G)$. En ajoutant enfin l'hypothèse d'une phase liquide incompressible on obtient l'expression suivante pour la succion :

$$S_c = -(P_L - P_G) = (P_G - P_L) = -\hat{\rho}_L \times RT \ln \frac{P_G}{P_{sat}} \quad (B.9)$$

En utilisant l'équation de Laplace, on obtient l'équation de Kelvin :

$$\ln \frac{P_G}{P_{sat}} = \frac{2\gamma_{LG} \cdot \cos\theta}{\hat{\rho}_L R T r} \quad (B.10)$$

A partir de l'équation (B.10) on peut déterminer un rayon critique de pores (ou rayon de Kelvin) qui définit une limite naturelle : pour une succion donnée tous les tubes capillaires cylindriques ayant un rayon supérieur au rayon de Kelvin ne peuvent pas contenir de l'eau capillaire:

$$R_{Kelvin} = \frac{r}{\cos\theta} = \frac{2\gamma_{LG}}{\hat{\rho}_L R T \times \ln \frac{P_G}{P_{sat}}} \quad (B.11)$$

B.4. Hystérésis de la courbe de sorption

Les essais expérimentaux montrent une différence entre les courbes de drainage (ou désorption) par rapport à celles d'imbibition (ou de sorption). Ce phénomène est dit « hystérésis » ou « hystérèse », il est produit par plusieurs facteurs, notamment la présence de

l'air piégé, la différence entre les angles de contact entrant et sortant de tube (l'angle entre la tangente de l'interface et l'axe de la conduite) [PIT 87] et la non-uniformité des pores.

Dans un milieu poreux, l'assemblage des grains est hétérogène. L'espace entre les grains qui se forme par les pores, est de taille et forme variées. Cela conduit à la présence de vides interconnectés par des passages plus ou moins petits. De plus, pour le cas d'un pore de rayon relativement grand R qui est connecté par des pores plus petits de rayon r , si ce pore est initialement saturé et que le potentiel de pression diminue, il ne se videra que si ce potentiel est inférieur à la succion générée par le pore le plus petit r :

$$P_r = \frac{2\sigma}{r} \quad (\text{B.12})$$

Le changement d'angle de contact dépend de la direction de mouvement du ménisque. La valeur de cet angle est plus grande quand l'écoulement d'eau a tendance à saturer le milieu [PIT 87]. Pour cette raison, dans les différents processus d'un même milieu, la succion générée est plus forte dans le cas de la désorption que dans celui de la sorption.

B.5. Nombre capillaire

Le nombre capillaire est un nombre qui traduit la relation entre les forces visqueuses et les forces capillaires. Pour un milieu poreux dont les pores ont une taille caractéristique a , la perte de charge visqueuse associée à la traversée de ce pore est considérée comme la suivante :

$$\Delta p_v \approx \frac{\eta v a}{k} \quad (\text{B.12})$$

Où : η est la viscosité dynamique de fluide.

k est la perméabilité locale.

v vitesse locale de traversée du pore.

Si ce pore présente une interface, et en supposant que l'interface a une courbure égale à la taille du pore, il existe une pression capillaire décrite sous la forme :

$$\Delta p_c \approx \frac{\gamma}{a} \quad (\text{B.13})$$

Le nombre capillaire est exprimé par l'équation :

$$Ca = \frac{\Delta p_v}{\Delta p_c} = \frac{\eta v a^2}{\gamma k} \quad (\text{B.14})$$

Si on considère que la perméabilité du pore est approximative de a^2 , le nombre capillaire est réécrit :

$$Ca = \frac{\Delta p_v}{\Delta p_c} = \frac{\eta v}{\gamma} \quad (\text{B.15})$$

B.6. Nombre de Reynolds

Le nombre de Reynolds est décrit par le ratio des forces d'inertie et des forces de viscosité :

$$Re = \frac{\rho v^2}{\eta^v/L} = \frac{vL}{\nu} \quad (\text{B.16})$$

Où : ν est la viscosité cinétique.

Annexe C. Conductivité des différentes formes de section des conduits par la loi de Kozeny-Carman

Supposons que chaque conduit (pore) est enveloppé par un bloc élémentaire de matériau solide sans vide. Ce bloc a une aire A , longueur l et la section, la longueur et le périmètre de conduit est respectivement S , L , P .

Le bloc a un seul pore, la conductivité hydraulique du bloc est donc la conductivité du conduit. En utilisant Kozeny-Carman, on peut calculer la conductivité hydraulique de chaque bloc pour les pores de forme différente. Cette conductivité ne dépend que des propriétés de la conduite :

$$k = \frac{\phi^3}{c(1-\phi)^2 S^2} \quad (\text{C.1})$$

La surface spécifique est une fraction de la somme de surface autour des vides par le volume total du bloc élémentaire.

C.1. Section de forme Circulaire :

L'aire de la section du pore :

$$S = \pi R^2 \quad (\text{C.2})$$

Le périmètre de la section du pore :

$$P = 2\pi R \quad (\text{C.3})$$

La porosité du bloc élémentaire est une fonction de S et A

$$\phi = \frac{SL}{Al} = \frac{S}{A} \tau \quad (C.4)$$

La surface spécifique du bloc :

$$S_{spé} = \frac{PL}{Al} = \frac{2\pi R}{A} \tau = \frac{2\phi}{R} \quad (C.5)$$

La conductivité hydraulique du bloc élémentaire (la conductivité du pore) :

$$K = \frac{1}{c} \frac{\phi^3}{S_{spé}^2 (1-\phi)^2 \tau^2} = \frac{1}{c} \frac{\phi^3}{\frac{2^2 \phi^2 (1-\phi)^2 \tau^2}{R^2}} = \frac{\phi}{c 4\pi (1-\phi)^2 \tau^2} S \quad (C.6)$$

C.2. Section de forme triangle équilatéral :

L'aire de la section du pore :

$$S = \frac{1}{2} \frac{a^2 \sqrt{3}}{2} = \frac{a^2 \sqrt{3}}{4} \quad (C.7)$$

$$a = \sqrt{S \frac{4}{\sqrt{3}}} = \frac{2\sqrt{S}}{\sqrt[4]{3}} \quad (C.8)$$

Le périmètre de la section du pore :

$$P = 3a \quad (C.9)$$

La porosité du bloc élémentaire est une fonction de S et A

$$\phi = \frac{SL}{Al} = \frac{S}{A} \tau \quad (C.10)$$

La surface spécifique du bloc :

$$S_{spé} = \frac{PL}{Al} = \frac{3 \frac{2\sqrt{S}}{\sqrt[4]{3}}}{A} \tau = \frac{6\sqrt{S}}{A \sqrt[4]{3}} \tau = \frac{6\phi}{\sqrt[4]{3}\sqrt{S}} \quad (C.11)$$

La conductivité hydraulique du bloc élémentaire (la conductivité du pore) :

$$K = \frac{1}{c} \frac{\phi^3}{S_{spé}^2 (1-\phi)^2 \tau^2} = \frac{1}{c} \frac{\phi^3}{\frac{6^2 \phi^2 (1-\phi)^2 \tau^2}{\sqrt{3} S}} = \frac{\phi}{c 12\sqrt{3} (1-\phi)^2 \tau^2} S \quad (C.12)$$

C.3. Section de forme Carrée :

L'aire de la section du pore :

$$S = a^2 \quad (C.13)$$

Le périmètre de la section du pore :

$$P = 4a \quad (C.14)$$

La porosité du bloc élémentaire est une fonction de S et A

$$\phi = \frac{SL}{Al} = \frac{S}{A} \tau \quad (C.15)$$

La surface spécifique du bloc :

$$S_{spé} = \frac{PL}{Al} = \frac{4\sqrt{S}}{A} \tau = \frac{4\phi}{\sqrt{S}} \quad (C.16)$$

La conductivité hydraulique du bloc élémentaire (la conductivité du pore) :

$$K = \frac{1}{c} \frac{\phi^3}{S_{spé}^2 (1-\phi)^2 \tau^2} = \frac{1}{c} \frac{\phi^3}{\frac{4^2 \phi^2 (1-\phi)^2 \tau^2}{S}} = \frac{\phi}{c 16 (1-\phi)^2 \tau^2} S \quad (C.17)$$

C.4. Section de forme rectangulaire :

L'aire de la section du pore :

$$S = ab \quad (C.18)$$

Le périmètre de la section du pore :

$$P = 2(a + b) \quad (C.19)$$

La porosité du bloc élémentaire est une fonction de S et A

$$\phi = \frac{SL}{Al} = \frac{S}{A} \tau \leftrightarrow A = \frac{S}{\phi} \tau \quad (C.20)$$

La surface spécifique du bloc :

$$S_{spé} = \frac{PL}{Al} = \frac{2(a+b)}{A} \tau = \frac{2(a+b)}{\frac{S}{\phi} \tau} \tau = \frac{2(a+b)\phi}{ab} \quad (C.21)$$

Le cas général : $a = nb$

L'aire de la section du pore :

$$S = ab = nb^2 \quad (C.22)$$

Le périmètre de la section du pore :

$$P = 2(nb + b) = 2(n + 1)b \quad (C.23)$$

La porosité du bloc élémentaire est une fonction de S et A

$$\phi = \frac{SL}{Al} = \frac{S}{A} \tau \leftrightarrow A = \frac{S}{\phi} \tau \quad (C.24)$$

La surface spécifique du bloc :

$$S_{spé} = \frac{PL}{Al} = \frac{2(n+1)b}{A} \tau = \frac{2(n+1)b}{\frac{S}{\phi} \tau} \tau = \frac{2(n+1)\phi}{nb} \quad (C.25)$$

La conductivité hydraulique du bloc élémentaire (la conductivité du pore) :

$$K = \frac{1}{c} \frac{\phi^3}{S_{spé}^2 (1-\phi)^2 \tau^2} = \frac{1}{c} \frac{\phi^3}{\frac{4(n+1)^2 \phi^2 (1-\phi)^2 \tau^2}{n^2 b^2}} = \frac{n\phi}{c 4(n+1)^2 (1-\phi)^2 \tau^2} S \quad (C.26)$$

C.5. Section de forme ellipse :

L'ellipse est une forme qui est similaire des pores dans la nature. Les constants a, b sont respectivement le demi grand axe et demi petit axe. On calcule la conductivité hydraulique du bloc élémentaire (la conductivité du pore) avec a en fonction de b.

+ *Cas général* : $a = nb$.

L'aire de la section du pore :

$$S = \pi ab = \pi n b^2 \leftrightarrow b = \sqrt{\frac{S}{n\pi}} \quad (C.27)$$

Le périmètre de la section du pore :

$$P = \pi \sqrt{2(a^2 + b^2)} = \pi \sqrt{2(n^2 + 1)b^2} = \pi b \sqrt{2(n^2 + 1)} \quad (C.28)$$

La porosité du bloc élémentaire est une fonction de S et A :

$$\phi = \frac{SL}{Al} = \frac{S}{A} \tau \quad (C.29)$$

La surface spécifique du bloc :

$$S_{spé} = \frac{PL}{Al} = \frac{\phi \pi \sqrt{2(n^2+1)} \sqrt{\frac{S}{n\pi}}}{S \tau} \tau = \phi \sqrt{\frac{2(n^2+1)\pi}{nS}} \quad (C.30)$$

La conductivité hydraulique du bloc élémentaire (la conductivité du pore) :

$$K = \frac{1}{c} \frac{\phi^3}{S_{spé}^2 (1-\phi)^2 \tau^2} = \frac{1}{c} \frac{\phi^3}{\frac{\phi^2 2(n^2+1)\pi(1-\phi)^2 \tau^2}{nS}} = \frac{n\phi}{2c(n^2+1)\pi(1-\phi)^2 \tau^2} S \quad (C.31)$$

Chapitre III. Modélisation de l'impact de l'endommagement sur les propriétés hydriques des milieux poreux en saturé et non saturé

III.1. Introduction

Si dans le chapitre précédent il était question des propriétés hydriques des matériaux poreux et la relation de ces propriétés avec la structure de l'espace poreux, on s'intéresse de plus près dans ce chapitre des couplages hydromécaniques dans le sens Mécanique→Hydrique.

La contrainte effective en saturé ou en non saturé [COU 04] (bien qu'un consensus sur sa définition dans le deuxième domaine reste à trouver) permet de prendre en compte l'effet de la pression de l'eau (positive ou négative) sur les déformations d'un matériau. Dans le cadre de la poromécanique en saturé les effets dans l'autre sens (les effets de la contrainte mécanique sur la pression fluide) font intervenir le module de Biot. En non saturé, bien que des expressions équivalentes au module de Biot et le tenseur de Biot en saturé peuvent être établies, à partir notamment de considérations microscopiques (voir par exemple [CAR 10]), les effets de la mécanique sur la pression fluide dans le cadre de la poromécanique restent négligeables et ils sont souvent ignorés.

Mais le couplage hydromécanique notamment dans le sens que l'on étudie ici ($M \rightarrow H$) s'étend au-delà de la poromécanique ne se reste que parce que le réseau poral est susceptible de changer sous le chargement mécanique. Le développement de micro-fractures implique de nombreuses conséquences sur les propriétés macroscopiques du matériau telles que la réduction du module élastique, l'anisotropie, la diminution de la vitesse des ondes ultrasoniques, et l'augmentation de la perméabilité, de la résistance électrique, etc [PAT 78]. En particulier, la variation de la perméabilité et la modification des modes d'écoulement dans le milieu, est d'une importance capitale dans de nombreuses applications telles que le stockage des déchets radioactifs, la durabilité des structures en génie civil, la séquestration du gaz ou la production pétrolière, etc.

Par exemple sous le chargement mécanique certaines fissures bien orientées peuvent se fermer en modifiant l'écoulement des fluides [SOU 01]. De même l'endommagement des géomatériaux, crée des nouvelles voies de circulation de fluides, améliore l'inter-connectivité des pores en amplifiant de façon spectaculaire la perméabilité. Ceci est déjà un fait théorique et expérimental établi [KAR 83, HAD 76, FRI 70, HOM 00, SOU 01].

Il est en revanche inconnu à l'heure actuelle quel est le rôle de cette évolution du réseau poral sur les caractéristiques d'écoulement en non-saturé : perméabilité relative, courbe de rétention etc. Les travaux sur ce point dans la littérature sont très rares voir inexistants et se limitent à

quelques rares mesures au laboratoire ou in situ, que selon les auteurs mêmes, restent entachés à de grandes incertitudes.

Dans ce chapitre nous nous adressons à la question des couplages hydromécaniques (dans le sens mécanique vers hydraulique). Les problèmes de l'origine et des mécanismes d'initiation et d'évolution de l'endommagement ne sont donc pas abordés. Néanmoins pour établir le lien entre l'évolution de l'endommagement/fissuration et l'évolution des propriétés hydriques certains résultats théoriques et expérimentaux connus seront rappelés au début du chapitre avant de passer à la modélisation proprement dite.

Cette modélisation est réalisée en utilisant le modèle de réseau de conduits développé dans le chapitre précédent dans le but d'étudier l'impact de l'endommagement sur la perméabilité intrinsèque, la courbe de rétention et la perméabilité relative d'un milieu poreux.

III.2. Résultats expérimentaux, observations et caractérisation de la fissuration

Les résultats des essais de laboratoire, d'observations directes en laboratoire et in situ sont consensuels sur le fait que deux types de création et d'évolution de fissures peuvent être observés : la propagation des fissures/fractures préexistantes et l'initiation (nucléation) de nouvelles fissures/fractures.

Théoriquement la propagation des fissures pourrait intervenir selon une des trois modes de propagation, mais en pratique les modes I et II (ou leur combinaison) sont les plus répandues [TAP 76, WON 85]. En particulier le développement de la fissuration dans des échantillons en compression est attribué, par une multitude d'études concordantes et d'observations, à la naissance et au développement des branches de fissures en traction suite au glissement de fissures existantes (sliding crack) [NEM 88, KAC 82, HOR 83, HOX 05]. Des tests sur des roches artificielles avec un nombre limité de fractures confirment ce mécanisme de propagation dont le résultat est une orientation finale des fissures branchées dans la direction de la contrainte maximale en compression [NEM 85, BOB 98, WON 98, TON 95].

Le développement progressif des fissures à l'échelle micro et mésoscopique et augmentation de leur densité conduisent à un moment donné à la coalescence des fissures et à la formation des macrofractures à l'échelle macroscopique [KAR 83, HOM 00, HOX 05]. La propagation

de fissures dans les conditions indiquées ici suppose l'existence d'une contrainte déviatorique qui conduirait dans ce cas à une fissuration orientée préférentiellement dans la direction de la contrainte maximale en compression. Les observations directes de la fissuration indiquent des statistiques avec des fissures majoritairement orientées à 30° de la direction de la contrainte maximale. L'application d'une contrainte déviatorique, dans les roches poreuses peut conduire également à la naissance de nouvelles fissures aux contacts des grains de composition et de propriétés différentes [HOX 05, ESL 12]. La quantité relative de fractures intra-granulaires et inter-granulaires dépend de la minéralogie, type de roche et l'état de contraintes. L'orientation des nouvelles fissures semble plus uniforme et moins orientée que les fissures propagées, sauf près de la rupture où la coalescence se fait par une localisation orientée de fissures [ESL 12, HOX 12].

Des conditions de chargement isotropes peuvent conduire également au développement d'une fissuration/endommagement plus ou moins isotrope : la variation de la température au sein d'un échantillon, même dans le cas où cette variation est uniforme, peut conduire à une fissuration par l'incompatibilité des déformations aux contacts entre les constituants minéralogiques avec des coefficients de dilatation thermiques différents [BEL 12].

Pour la quantification de la densité de fissuration différents paramètres ont été utilisés dans la littérature. Le paramètre de densité de fissuration introduit par [BRI 60], équivalent à une sorte de « porosité » de fissuration, bien qu'il ne s'agisse pas d'un volume, est exprimé sous la forme suivante :

$$\rho = \frac{\sum l_i^2}{A} \text{ (en 2D) et } \rho = \frac{\sum l_i^3}{V} \text{ (en 3D)} \quad (3.1)$$

avec l_i la demie-longueur de fracture i en 2D ou le rayon d'une fracture circulaire en 3D, et A et V respectivement la surface (en 2D) et le volume représentatifs (3D).

Plus généralement l'organisation directionnelle de la fissuration, ignorée dans la définition de la densité de fissuration ci-dessous, peut être prise en compte par les tenseurs de fabriques d'ordres variés. Si la fonction de distribution de tailles des fissures (rayon ou longueur) est $f(r)$ et que pour chaque fissure ou famille de fissures i on définit un vecteur d'orientation n_i on peut définir les tenseurs dits de fissuration d'ordres successifs [ODA 82, 86]:

-tenseur de fissuration d'ordre zéro :

$$F_0 = \frac{\pi\rho}{4} \int_0^{r_m} r^3 f(r) dr \quad (3.2)$$

- tenseur de fissuration de second ordre :

$$F_{ij} = \frac{\pi\rho}{4} \int_0^{r_m} \int_{\Omega} r^3 n_i n_j E(n, r) d\Omega dr \quad (3.3)$$

-tenseur de fissuration de quatrième ordre :

$$F_{ijkl} = \frac{\pi\rho}{4} \int_0^{r_m} \int_{\Omega} r^3 n_i n_j n_k n_l E(n, r) d\Omega dr \quad (3.4)$$

F_0 est équivalent à la porosité de fissuration puisqu'il donne le volume des fractures divisé par le volume total, tandis que le tenseur de second ordre F_{ij} est un tenseur symétrique donc à valeurs propres réelles permettant une présentation dans la base de ses trois axes principaux

III.3. Modélisation de l'impact de la fissuration sur le comportement hydrique

Afin de modéliser et quantifier le rôle de la fissuration dans l'évolution de la perméabilité on se place à l'échelle d'un échantillon au laboratoire, en considérant initialement un matériau isotrope hydrauliquement. De ce point de vue la configuration numérique que nous considérons est similaire aux mesures de la perméabilité en cours des essais de compression triaxiale reportées dans la littérature [SOU 01, SUZ 98, ODA 02]. A partir d'un état initial isotrope, en ignorant les mécanismes et l'origine d'évolution de fissuration on développe numériquement, selon la procédure expliquée ci-dessous une fissuration complémentaire et on utilise le matériau endommagé pour réaliser des tests hydriques (numériques) afin de déduire pour un état de fissuration donné ses propriétés hydriques effectives. L'état initial isotrope utilisé dans ces tests est celui obtenu dans le chapitre précédent par la procédure de génération d'un réseau de conduits isotropes équivalent au tuffeau blanc. L'échantillon testé est donc un block de dimensions $50 \times 50 \times 70 \text{ mm}^3$, comportant 14614 conduits composés (pipe-bundles) repartis de façon isotrope en 15 familles de conduits. N'ayant pas de données particulières de l'évolution de la fissuration de cette pierre, on utilisera (à titre purement qualitatif) des résultats d'observations d'évolution de fissures sur d'autres roches.

III.3.1. Génération numérique de fissures dans un échantillon poreux

On suppose un échantillon initialement isotrope soumis à un chargement mécanique de compression uniaxiale dirigé selon la direction verticale. D'après les résultats cités dans le

précédent paragraphe dans ce type de chargement, les fissures se propagent de façon préférentielle dans la direction verticale si bien que les fissures induites par le chargement se trouvent de façon quasi exclusive à l'intérieur d'un cône avec l'axe dans la direction de la contrainte maximale en compression et une ouverture de 60° . Sans s'éloigner de la réalité on peut raisonnablement supposer que chaque fissure dans sa propagation peut subir un arrêt chaque fois qu'elle atteigne les frontières d'un grain, soit parce qu'elle doit changer de direction pour suivre les plans de faiblesses et les zones de concentration de contraintes (qui sont les frontières entre les grains), soit parce qu'elle débouche sur un pore. Cela peut expliquer pourquoi dans un certain nombre d'observations on constate que la longueur moyenne des fissures n'évolue pratiquement pas alors que leur nombre augmente avec le niveau de la contrainte appliquée [HOM 00, ZHA 98] (figure 3.1). On opte donc pour la génération de fissures de longueurs constantes et égale à la longueur moyenne des conduits déjà existants dans le réseau initialement. Ce choix peut être remplacé sans difficultés avec une distribution statistique de longueurs de fissures si cette distribution était connue. La création d'une nouvelle fissure, du point de vue numérique consiste à ajouter un conduit de caractéristiques (position, longueur, rayon) données. Les fissures sont supposées avoir un rayon hydraulique plus important que les pores si bien qu'elles deviennent le vecteur principal de l'écoulement. Dans les simulations réalisées ici ce rayon est pris (arbitrairement) égal à $200\mu\text{m}$.

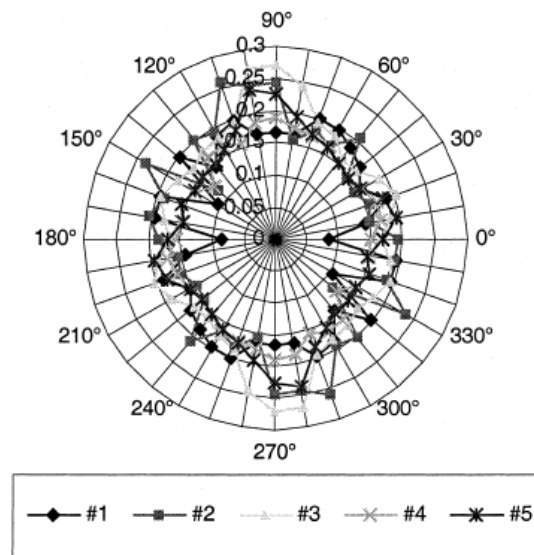


Figure 3.1: Evolution de la longueur moyenne des fissures en fonction de la contrainte.

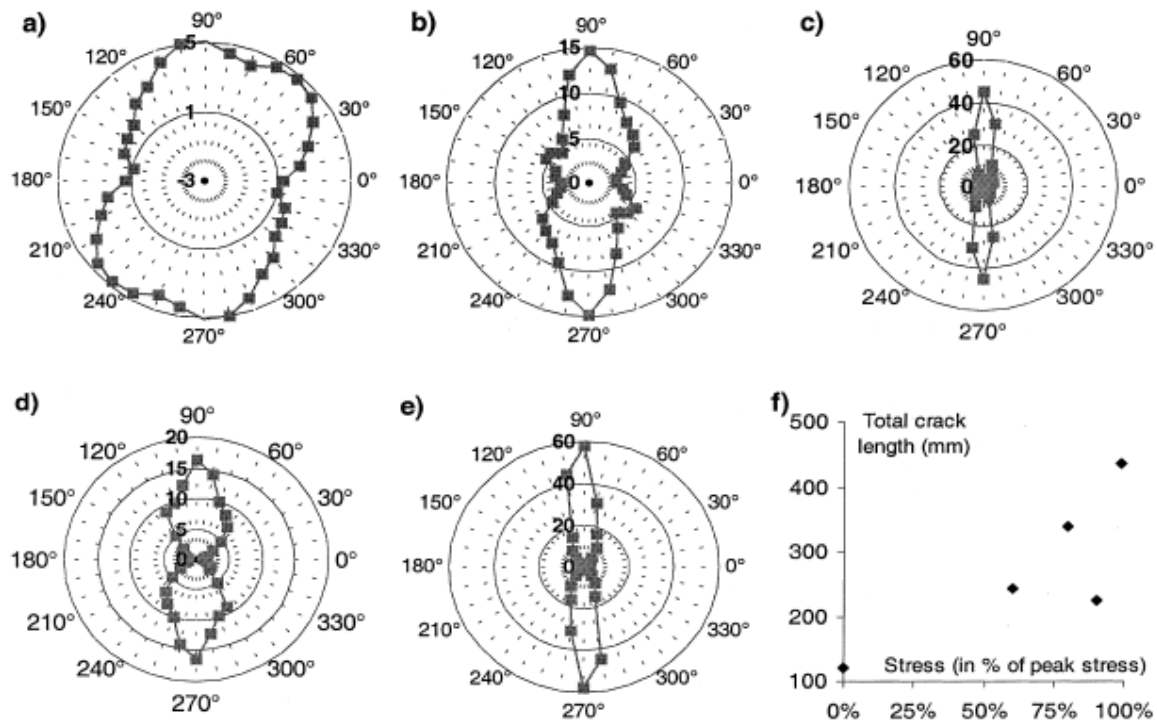


Figure 3.2: Evolution de géométrie et de la densité de fissures dans une roche granitique en fonction d'une contrainte déviatorique croissante de a) à e) et f) la longueur accumulée des fissures [HOM00].

Pour simuler l'évolution progressive de la fissuration on se fixe d'abord un nombre maximal de fissures à introduire et on distingue en suite 10 phases successives de fissuration pendant lesquelles on introduit un nombre de plus en plus grand de fissures. Afin de fixer un nombre maximal de fissures raisonnable, on fait appel aux résultats d'observations directes de fissures publiés dans la littérature. Sur certaines roches ces observations montrent que la densité de fissuration dans un échantillon qui subit un chargement mécanique et qui se trouve proche de la rupture est plus de deux fois plus grande que celle d'un échantillon à l'état naturel [HOM 00]. Dans la figure 3.2 par exemple on constate que la longueur cumulée des fissures pour un échantillon proche de la rupture est 4 fois supérieure à la longueur cumulée de fissures à l'état initial alors que la longueur moyenne de fissures proche de la rupture augmente moins de deux fois.

En gardant à l'esprit que le tuffeau blanc pris comme exemple ici est une pierre moins fragile et moins raide que celles citées dans les références bibliographiques en relations avec les observations des fissures, on peut considérer que le nombre de fissures proche de la rupture du tuffeau serait moins important que dans le cas par exemple du granite de la figure 3.2. On opte alors pour une densité finale de fissures (simulant un échantillon proche de la rupture)

égale à 1.5 fois la densité initiale de fissuration. Connaissant le nombre initial de fissures cela donne un nombre maximal de fissures induites dans le cas de notre échantillon de l'ordre de ~6500 (familles de) fissures.

Les 10 phases (arbitraires) de l'évolution de fissures se distinguent donc de leur densité de fissuration croissante sachant que chaque phase i contient toute les fissures générées par les phases précédentes j ($j < i$) plus celles introduites pendant la phase i . Une illustration de la création d'un arbre simple de fissures après plusieurs phases (générations) est présentée sur la figure 3.3.

Afin de créer une distribution aléatoire de fractures, de leur position, leur direction et leur sens de propagation, l'algorithme de génération de fissures développé comporte les étapes suivantes:

Première étape : les coordonnées d'une des extrémités de fissures (conduits) qui doivent être introduites pour une phase donnée sont générées de façon aléatoire. On obtient ainsi une des extrémités de chacune des fissures à venir qui servira pour définir en suite la position des fissures nucléées. Ces points sont distribués de façon uniforme dans le volume de l'échantillon. Si la distance entre un point ainsi généré et un nœud déjà existant du système poral (ces nœuds se trouvent à l'intersection de deux ou plusieurs conduits initiaux) est inférieure à un seuil contrôlé par l'utilisateur, alors c'est le nœud existant qui est considéré comme point de naissance d'une nouvelle fissure qui peut alors être considéré comme un branchement de fissures/pores existant(e)s.

Deuxième étape : pour chacun des points de nucléation de fissures générés dans la première étape on choisit de façon aléatoire une direction. Conformément aux observations citées dans les paragraphes précédents ces directions sont préférentiellement orientées vers la direction de la contrainte maximale en compression (supposée coïncidant avec la direction verticale dans notre simulation). La génération de la direction d'une fissure est alors équivalente à la génération d'un angle aléatoire comprise entre -30° et 30° et tiré d'une distribution uniforme. Il est clair que ce tirage aléatoire peut être remplacé par n'importe quelle autre procédure numérique équivalente. Autorisation des angles négatifs dans la procédure de génération des directions des conduits, signifie que, plus qu'une direction, on choisit un sens de la nucléation de fissures.

Troisième étape : A partir du couple (point de nucléation ; sens de nucléation) on génère une longueur de conduit et son rayon. On obtient ainsi, pour chaque conduit à générer les

coordonnées de l'autre extrémité. Si la distance de cette extrémité avec un nœud déjà existant du réseau poral est inférieure au seuil imposé dans l'étape 1 alors on confond cette extrémité avec le nœud existant.

Quatrième étape : Afin de simuler la propagation des fissures après leur nucléation, on définit les familles de fissures comme étant l'ensemble de fissures liées entre elles. La simulation de la propagation d'une fissure se fait alors en prolongeant par une fissure initiée dans une des extrémités choisie de façon aléatoire, l'arbre de la famille de fissures existante (figure 3.3).

Cinquième étape : la transformation de certains pores en fissures (en changeant uniquement le rayon) est introduite afin de simuler la naissance de fissures à partir des plans de faiblesse observée dans toutes les roches. L'algorithme autorise qu'environ 1% des pores verticaux (qui font un angle de $\pm 30^\circ$ avec l'axe vertical) soient transformés en fractures à chaque incrément (si bien que 10% des pores initiaux au maximum seront transformés en fissures à la fin de la dernière phase de simulation).

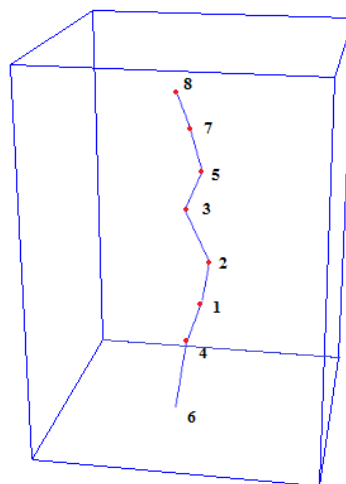


Figure 3.3: Illustration schématique de l'algorithme de propagation d'une fissure après plusieurs phases de propagation.

La génération de fissures selon l'algorithme indiqué permet d'aller vers un réseau poral (incluant aussi les fissures induites) de plus en plus complexe. Les familles de fissures nucléées même celles constituées de fissures générées par plusieurs phases peuvent aussi bien se trouver connectées avec le réseau des conduits existants qu'isolées vis-à-vis du réseau et/ou les frontières de l'échantillon. Dans le premier cas les fissures peuvent jouer un certain rôle

dans la modification des propriétés hydrauliques, tandis que les familles isolées n'ont aucune influence hydraulique. Ceci est une conséquence directe de l'hypothèse de départ de considérer que la matrice, hors conduits, est imperméable (voir chapitre 2).

Sur la figure 3.4 sont présentées les géométries du système poral et des fractures obtenues par utilisation de l'algorithme ci-dessus. L'état initial signifie un état sain et sans fissuration autre que la fissuration naturelle et pores. Les générations de 1 à 9 correspondent aux phases 1 à 9 simulant des états de fissuration croissante, la phase 9 étant celle qui est plus proche de la rupture et comportant un nombre de conduits ~ 1.5 plus grand que l'état initial.

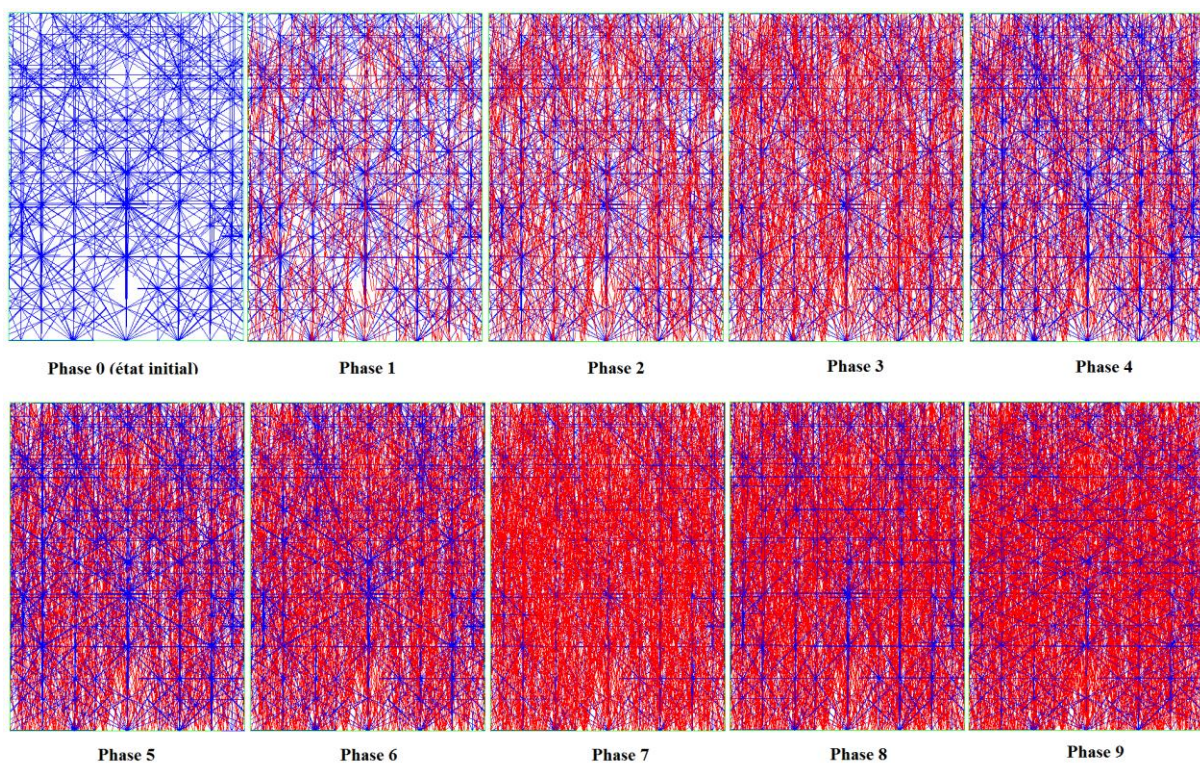


Figure 3.4: *Géométrie des fissures obtenue après chaque phase de simulation, tubes bleus-pores, tubes rouges fissures.*

III.3.2. Caractéristiques des fractures induites

Si l'on attribuait à chaque nouvelle fissure la même forme elliptique adoptée pour les pores dans le chapitre précédent, alors la porosité totale due à la fissuration évolue lentement pour passer de 49% à l'état sain à 52% à la dernière phase simulée ici (figure 3.5).

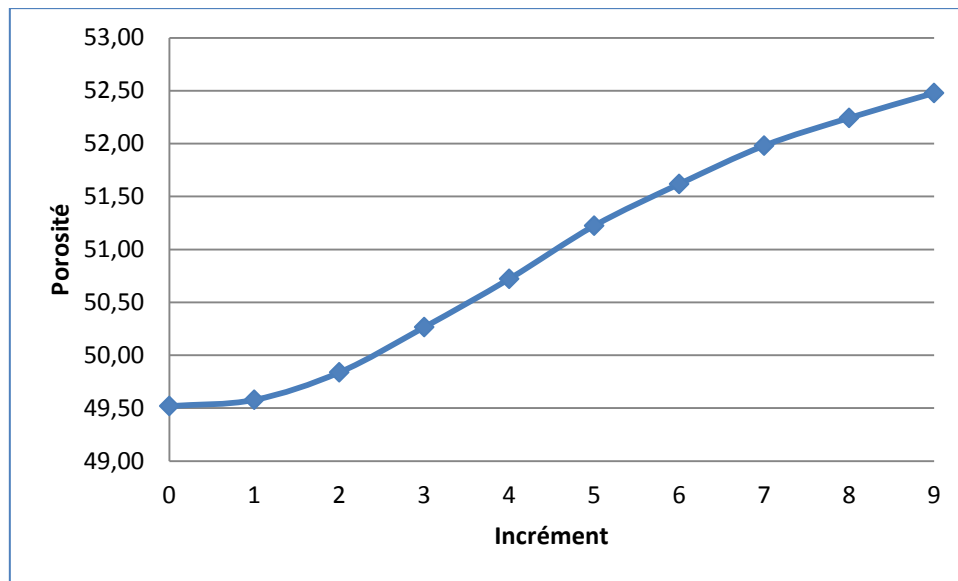


Figure 3.5: Evolution de la porosité de l'échantillon.

Le tableau 3.1 présente les informations sur les caractéristiques du système poral et les fissures pour chaque phase. Nous apercevons que le nombre de familles de pores qui sont converties en fractures augmente après chaque chargement de l'échantillon. Par conséquent, le volume des pores diminue légèrement, tandis que le volume total des pores et vides augmente de façon monotone.

Tableau 3.1: Informations générales des échantillons

Phase	Porosité	Nb de des familles de fissures	Nb de groupe de pores (conduits)	Nb de groupes de pores (conduits) convertis en fractures	Volume des pores (mm ³)	Volume des fissures (mm ³)
0	49.52	0	14594	0	8.66E+04	0.00E+00
1	49.58	177	14580	14	8.66E+04	6.37E+02
2	49.84	604	14566	28	8.66E+04	9.30E+02
3	50.27	1332	14556	38	8.65E+04	1.54E+03
4	50.72	2249	14547	47	8.65E+04	2.30E+03
5	51.22	3375	14535	59	8.64E+04	3.21E+03
6	51.62	4327	14523	71	8.64E+04	3.97E+03
7	51.98	5246	14512	82	8.63E+04	4.69E+03
8	52.24	5916	14503	91	8.62E+04	5.19E+03
9	52.48	6490	14492	102	8.62E+04	5.64E+03

Le caractère préférentiel de la nucléation et de propagation de fissures est mis en évidence par le calcul du tenseur de fissuration (fracturation) (équation 3.3 [ODA 84]) calculé uniquement pour les fissures induites. Ce tenseur est nul à l'état initial et évolue à chaque phase (la direction 3 coïncide avec la direction supposée direction d'application du chargement mécanique) :

- A la phase 1 :

$$F_{f1} = \begin{pmatrix} 6.66E-07 & 3.68E-08 & -1.42E-06 \\ 3.68E-08 & 4.84E-07 & -8.79E-07 \\ -1.42E-06 & -8.79E-07 & 1.61E-04 \end{pmatrix}$$

- A la phase 5 :

$$F_{f5} = \begin{pmatrix} 1.49E-05 & 2.29E-08 & -3.76E-06 \\ 2.29E-08 & 1.20E-05 & 5.36E-07 \\ -1.20E-05 & 5.36E-07 & 1.13E-03 \end{pmatrix}$$

- A la phase 9 :

$$F_{f9} = \begin{pmatrix} 2.96E-05 & 4.25E-07 & 5.99E-07 \\ 4.25E-07 & 2.37E-05 & 3.05E-07 \\ 5.99E-07 & 3.05E-07 & 2.37E-03 \end{pmatrix}$$

Comme la direction préférentielle de propagation des fissures est quasi verticale, les tenseurs de fissuration (qui sont des tenseurs de fabriques) mettent en évidence ce caractère anisotrope avec la valeur maximale dans la direction 33. Les termes hors diagonale du tenseur sont jusqu'à trois ordres de grandeurs plus petits que les termes de la diagonale suggérant que les directions principales ne changent pratiquement pas de direction au cours de la génération de fissures. Remarquons enfin le caractère transverse de l'anisotropie induite avec $F_{11} \cong F_{22}$.

III.3.3. Evolution de la conductivité hydraulique avec la fissuration

Pour chaque état de fissuration obtenue à une phase donnée de la simulation, on réalise un test numérique d'identification de la conductivité hydraulique selon la procédure indiquée dans §II.4.2. Pour chaque phase de fissuration 3 tests de conductivité ont été réalisés afin de déterminer la conductivité hydraulique selon chacune des directions.

III.3.3.1. Evolution de la conductivité hydraulique dans la direction d'évolution de la fissuration

Nous gardons pour toutes ces simulations la conductivité des pores régie par la loi de Kozeny-Carman avec une surface spécifique équivalente à la forme elliptique dont le rapport d'aspect des axes est de 40 (identique donc au réseau poral obtenu dans le chapitre 2). Quant aux fractures, plusieurs simulations sont réalisées en faisant varier la forme de la section : on teste notamment des ellipses à rapport du grand axe sur le petit axe égal à 3, 5 et 10 en prenant soin que malgré ces variations la porosité pour une phase donnée de fissuration, reste inchangée. Le tableau 3.2 indique les conductivités hydrauliques à l'eau à chaque incrément pour différentes formes supposées des fissures et des lois de conductivité.

Tableau 3.2: Evolution de conductivité hydraulique selon l'axe z à différentes phases de fissuration

Incrément	Porosité	Conductivité (m/s)			
		KC Ellipse10	KC Ellipse 5	KC Ellipse 3	Poiseuille
0	49.52	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06	1.00E-06
1	49.58	1.41E-06	1.44E-06	1.36E-06	1.47E-06
2	49.84	1.43E-06	1.52E-06	2.57E-06	1.61E-06
3	50.27	1.77E-06	2.53E-06	7.67E-06	6.16E-06
4	50.72	5.33E-06	9.20E-06	2.12E-05	2.86E-05
5	51.22	1.88E-05	3.51E-05	6.27E-05	1.17E-04
6	51.62	3.85E-05	7.27E-05	1.22E-04	2.45E-04
7	51.98	6.18E-05	1.18E-04	1.93E-04	4.00E-04
8	52.24	8.89E-05	1.70E-04	2.73E-04	5.79E-04
9	52.48	1.11E-04	2.13E-04	3.39E-04	7.30E-04

Les résultats montrent une forte évolution de la conductivité selon l'axe z au cours de l'évolution de la fissuration et ceci quelque soit la forme des conduits et/ou le type de la loi de conductivité choisie. Sur la figure 3.6, nous observons d'abord une première phase de l'évolution de la conductivité quasi invisible malgré l'évolution de la porosité. Entre la phase 0 et 5 par exemple bien que la porosité a évolué de 49% à 51% (soit ~50% de la variation de la porosité) la conductivité reste quasi inchangée. A la fin de la phase 5 quasi 50% des nouvelles fissures sont déjà générées (tableau 3.1). Néanmoins la connectivité globale des

familles de fissures et la connectivité de ces familles avec le réseau existant et les frontières est encore faible. Rappelons qu'une famille de fissures (le terme famille de fissures est utilisé dans le sens indiqué précédemment et signifie un chemin continu formé par des fissures générées successivement) contribue à la conductivité uniquement si ces deux fissures situées à ses extrêmes sont connectées avec le réseau ou les frontières. Entre la fin de la phase 5 et la fin de la phase 9 la porosité et le nombre des fissures générées augmentent autant qu'entre la phase 1 et la phase 5. En même temps la conductivité entre la phase 5 et la phase 9 augmente de façon spectaculaire et à la fin de la dernière phase la conductivité est entre 2 et 3 ordres de grandeurs supérieures à l'état initial. Cette augmentation s'explique d'abord par une augmentation de la connectivité des fissures. Avec l'augmentation du nombre de fissures la probabilité que l'ajout d'une nouvelle fissure conduise à la connectivité d'une famille de fissures développée précédemment mais non encore connectée, augmente de plus en plus. Cela explique pourquoi pour le même ajout de nombre de fissures ajoutées le nombre de familles devenues connectées est plus important pour les dernières phases de simulation (ce qui conduit à une augmentation plus importante de la conductivité). Dans les simulations présentées ici, à la fin de la phase 9 seule une partie infime de familles de fissures n'est pas encore connectée dans le réseau.

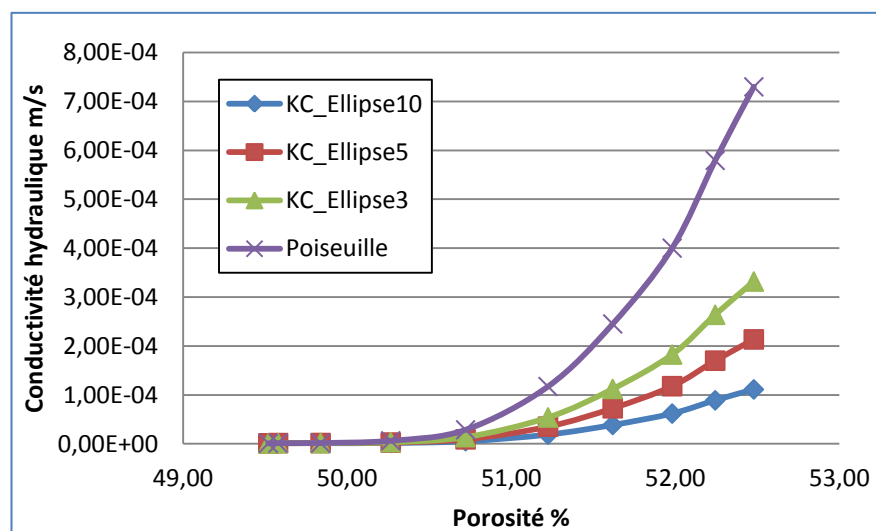


Figure 3.6: Conductivité hydraulique en fonction de la porosité.

Notons au passage le rôle de la forme des fissures et de la loi de conductivité des tubes. Comme attendu l'estimation de Poiseuille est celle qui suppose la surface spécifique du réseau minimale et donc la conductivité hydraulique maximale.

III.3.3.2. Evolution de la conductivité hydraulique dans la direction perpendiculaire avec la direction de l'évolution de la fissuration

Deux tests de conductivité hydraulique à l'état saturé suivant les directions horizontales x et y sont également simulés pour chaque phase de fissuration afin de quantifier l'impact de la fissuration sur l'évolution de la conductivité dans ces directions. La même procédure que dans le cas précédent a été utilisée. Une forme elliptique avec un rapport des axes égal à 3 a été gardée pour toutes les fissures. Les résultats de toutes les simulations sont résumés dans le tableau 3.3.

Tableau 3.3: *Conductivité hydraulique en saturé selon différentes directions*

Phase	Porosité	Conductivité m/s		
		x	y	z
0	49.52	9.42E-07	1.08E-06	1.00E-06
1	49.58	9.44E-07	1.08E-06	1.36E-06
2	49.84	9.54E-07	1.10E-06	2.57E-06
3	50.27	9.78E-07	1.13E-06	7.67E-06
4	50.72	9.75E-07	1.13E-06	2.12E-05
5	51.22	9.85E-07	1.26E-06	6.27E-05
6	51.62	1.08E-06	1.29E-06	1.22E-04
7	51.98	1.68E-06	2.22E-06	1.93E-04
8	52.24	2.74E-06	3.01E-06	2.73E-04
9	52.48	3.73E-06	4.04E-06	3.39E-04

On constate que la conductivité dans la direction x et y varie de façon très similaire (figure 3.7) : il n'y a presque pas de variation de la conductivité avant les trois dernières phases de fissuration. En sachant que les fissures générées sont principalement selon la direction z avec un écart de cette direction ne dépassant jamais 30°, cette variation de la conductivité dans les directions Ox et Oy est amputable principalement à l'augmentation de la connectivité des tubes orientés dans les directions horizontales par l'intersection avec les nouvelles fissures ajoutées qui servent alors de court-circuits facilitant l'écoulement. Cette explication est en

accord avec le fait que (plus que dans la direction z) la conductivité hydraulique évolue que dans les derniers instants d'évolution de la fissuration. La conductivité dans une direction perpendiculaire à la direction de l'évolution de la fissuration reste néanmoins modérée : à la fin de la phase 9 la conductivité dans la direction x (ou y) dans nos simulation a augmentée 4 fois alors qu'en même temps dans la direction z (direction d'évolution de fissuration) la conductivité hydraulique augmente 339 fois.

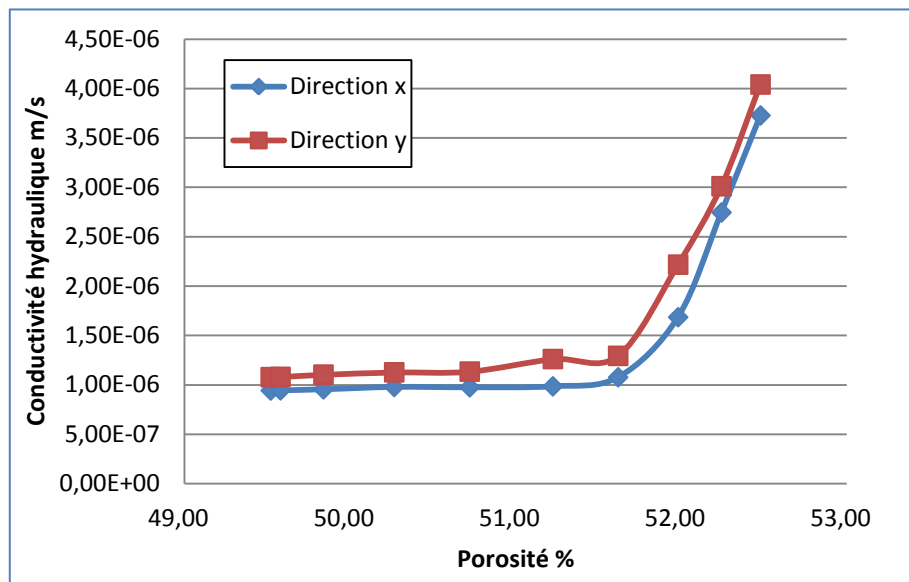


Figure 3.7: Conductivité hydraulique horizontales.

III.3.4. Evolution des propriétés hydriques avec la fissuration en non saturé

On s'intéresse dans cette section de la variation des propriétés hydriques et hygroscopiques en fonction de l'état de fissuration. Pour cela des tests numériques de sorption-désorptions et de perméabilité relative suivant la même procédure que dans le chapitre II sont utilisés.

III.3.4.1. Tests de sorption-désorption à différents niveaux de fissuration

Les simulations sont limitées à deux phases de fissuration les numéros 5 et 9. Ces deux phases sont importantes, parce que l'un est le point où une connectivité commence à être établie entre les fissures générées et le réseau initial et/ou les frontières, et l'autre représente la fissuration et la connectivité maximale. Pour ces deux états de fissuration on réalise un essai de sorption à partir d'un état initial sec, suivi par un essai de désorption. Le tableau 3.4 résume les résultats de l'état de saturation de ces échantillons fracturés en comparaison avec l'échantillon sain pour différentes succions imposées aux frontières de l'échantillon. Pour les

fortes suctions les états de saturation sont proches de zéro et on a gardé plusieurs chiffres après la virgule pour distinguer les différents états de saturation.

Les courbes de rétention sur un chemin d'imbibition (respectivement séchage) pour les trois états de fissuration étudiés sont présentées sur la figure 3.8.a (respectivement 3.9.a pour le chemin de séchage). A l'échelle de tout le graphe, il est difficile de distinguer des différences entre les courbes de sorption de l'échantillon sain et les échantillons fissurés, bien qu'on devine des différences qui semblent plus fortes pour les faibles suctions.

Tableau 3.4: Saturation des échantillons au cours des processus sorption-désorption

Suction MPa	Incrément 9		Incrément 5		Etat sain	
	Saturation	Désaturation	Saturation	Désaturation	Saturation	Désaturation
400	0.000033	0.003040	0.000025	0.003067	0.000027	0.000180
300	0.001062	0.019859	0.001020	0.020421	0.001115	0.016198
200	0.004851	0.059333	0.004958	0.061321	0.005237	0.061852
150	0.005953	0.065809	0.006114	0.068200	0.006404	0.068874
100	0.007391	0.075899	0.007397	0.078718	0.007927	0.079688
75	0.008138	0.082250	0.008294	0.085256	0.008719	0.086162
40	0.017157	0.108441	0.017620	0.112217	0.018272	0.113470
20	0.030292	0.161074	0.030812	0.166398	0.032187	0.167778
10	0.056689	0.195405	0.054586	0.201738	0.060381	0.203232
2.5	0.190023	0.243977	0.186616	0.251753	0.202191	0.254116
1.5	0.228665	0.262455	0.230924	0.270787	0.243169	0.272918
1	0.256562	0.280880	0.263037	0.289721	0.270837	0.292363
0.6	0.274993	0.294261	0.281987	0.303521	0.290602	0.306198
0.3	0.350612	0.342844	0.359311	0.353574	0.372955	0.355481
0.2	0.380342	0.371077	0.391614	0.383498	0.404960	0.387034
0.1	0.455796	0.444547	0.469720	0.459324	0.486154	0.463846
0.005	0.807331	0.759855	0.830768	0.784719	0.857183	0.793183
0.002	0.940751	0.940751	0.968058	0.968058	0.998890	0.998890

Une observation plus attentive des différences dans le domaine des faibles suctions (on se limitant dans les suctions entre 0 et 1MPa) est possible si l'on présente l'état de sous-saturation des échantillons fissurés par rapport à l'échantillon sain : pour une suction donnée on apporte sur les figures 3.8.b et 3.9.b la différence entre les saturations des échantillons

fissurés et la saturation de l'échantillon sain pour cette même succion. Il en sort que pour les succions faibles, proche de l'état de saturation les échantillons fissurés ont une saturation inférieure à l'échantillon sain. Cette sous-saturation est d'autant plus importante que la fissuration est développée. L'explication de cette sous saturation se trouve dans le fait que de part l'hypothèse de départ et de part la construction, les fissures ajoutées ont un rayon hydraulique plusieurs fois plus grand que les pores (conduits initiaux). Elles sont alors les premières à être vidées au cours d'une désorption et les dernières à être remplies si bien que même une succion très faible comme dans notre simulation empêcherait leur saturation. Mais ce n'est pas tout : on peut facilement remarquer que la différence des saturations avec l'échantillon sain dépasse la porosité de la fissuration : la porosité de fissuration est de l'ordre de 2% dans ces simulations alors que la différence des saturations atteint 6%. Une explication possible de ces différences est que l'ajout des fissures, une fois ces dernières connectées avec le réseau permettent d'évacuer pendant la désorption plus rapidement l'eau se trouvant dans les pores et servent comme des pièges pour une partie de pores se trouvant en contact avec ces fissures. En fait, les fissures sortant à la surface, de part leur diamètre plus grand que les pores ont une capacité absorbante plus faible. Lorsque une telle fissure connecte un pore alors un contact d'air s'établit entre le pore et l'extérieur via la fissure. La diffusion étant négligée et la remontée capillaire empêchée par le grand diamètre de la fissure, le pore est condamné à rester vide (ou à se vider rapidement au cours de la désorption).

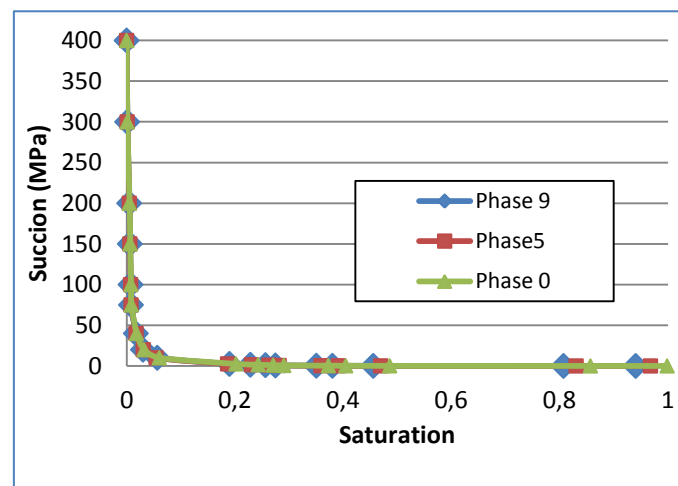


Figure 3.8.a: Courbes de rétention au cours d'imbibition pour des échantillons à différents niveaux de fissuration.

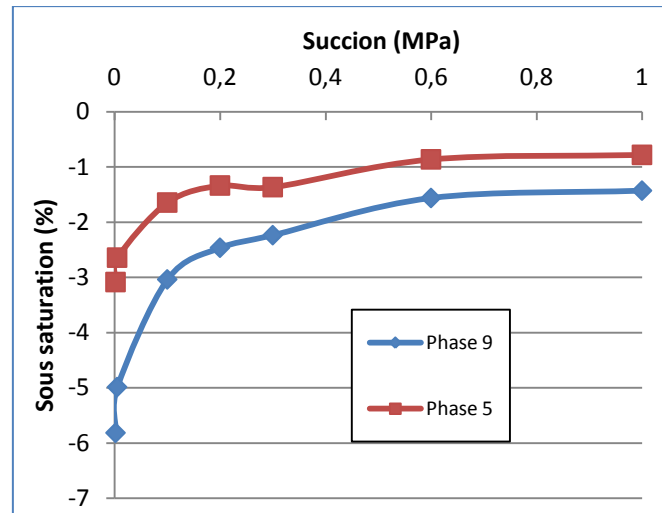


Figure 3.8.b: La sous-saturation au cours de la sorption pour la phase 5 et 9.

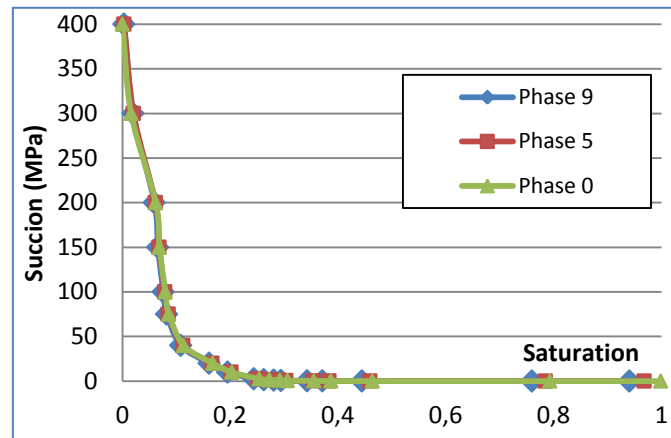


Figure 3.9a: Courbes de rétention au cours de séchage pour des échantillons à différents niveaux de fissuration.

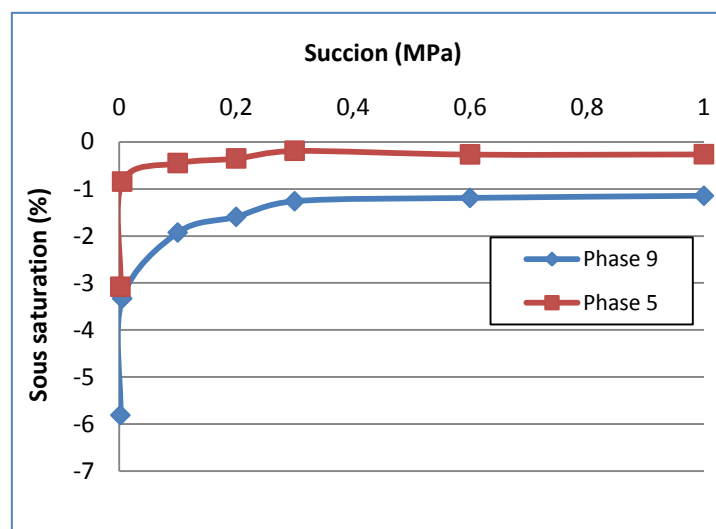


Figure 3.9.b: Evolution de la sous-saturation au cours de la désorption pour deux niveaux de fissuration.

III.3.4.2. Tests de perméabilité relative à différents niveaux de fissuration

Le schéma de calcul est identique à celui du chapitre II, et on se limite dans l'étude de l'écoulement suivant l'axe z qui est la direction de propagation préférentielle des fissures. Les simulations sont réalisées pour toutes les phases de fissuration (de 1 à 9).

Le tableau 3.5 présente les conductivités hydrauliques effectives à l'eau pour différents niveaux de fissuration, obtenus en régime permanent. A l'état non saturé, l'échantillon non fracturé favorise légèrement mieux l'écoulement, par exemple à une pression capillaire de 0.002MPa, la conductivité hydraulique effective est de $9.81E-07$ m/s à l'état sain contre $9.56E-07$ m/s à l'état endommagé de la phase 9. Bien que la conductivité à l'état saturé soit d'autant plus grande que l'état de fissuration soit avancé, la conductivité hydraulique effective sous faible succion est comparable pour tous les échantillons. Cela est à expliquer avec les mêmes arguments que le test de sorption : même sous faibles succions une grande partie des fissures seront vides si bien qu'elles ne participent pas dans l'écoulement. En plus en affectant l'état de saturation des pores directement connectés avec elles, les fissures enlèvent (par désaturation) un nombre de tubes du réseau conduisant finalement à une conductivité hydraulique effective plus faible en non-saturé des échantillons fissurés. Plus la désaturation devient forte plus les conductivités hydrauliques effectives deviennent comparables tout en se diminuant fortement.

Il est alors clair que la fissuration, telles que générée dans nos simulations conduit à une forte baisse de la perméabilité relative à l'eau (tableau 3.6 et figure 3.10). Cette chute est d'autant plus forte que l'état de fissuration est avancé.

Ce résultat peut être contre-intuitif mais se comprend très bien si on se rappelle que le seul mécanisme de transfert d'eau dans l'échantillon est supposé d'être l'advection capillaire. La prise en compte de la diffusion de vapeur d'eau pourrait avoir comme conséquence une augmentation de transfert d'eau vapeur par diffusion et conduire à une diminution moins importante, voir à une augmentation de la perméabilité relative avec la fissuration.

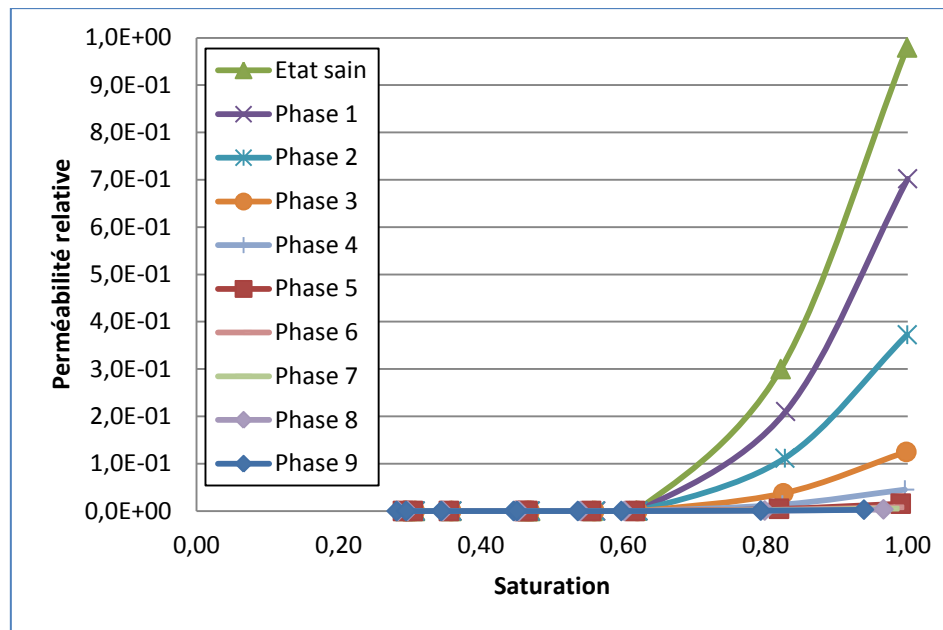


Figure 3.10: Perméabilité relative à l'eau.

Tableau 3.5: *Conductivité hydraulique effective des phases*

Succion (MPa)	K (m/s)									
	Etat sain	Phase 1	Phase 2	Phase 3	Phase 4	Phase 5	Phase 6	Phase 7	Phase 8	Phase 9
1	9.46E-16	1.12E-15	1.11E-15	1.10E-15	1.10E-15	1.04E-15	1.10E-15	1.10E-15	1.10E-15	1.10E-15
0.6	1.94E-15	2.10E-15	2.10E-15	2.10E-15	2.10E-15	2.04E-15	2.10E-15	2.10E-15	2.10E-15	2.10E-15
0.3	1.91E-14	1.86E-14	1.86E-14	1.86E-14	1.86E-14	1.87E-14	1.86E-14	1.86E-14	1.86E-14	1.86E-14
0.1	7.06E-13	7.03E-13	7.03E-13	7.03E-13	7.03E-13	7.05E-13	7.03E-13	7.03E-13	7.03E-13	7.03E-13
0.012	8.33E-13	9.09E-13	9.09E-13	9.09E-13	9.09E-13	8.56E-13	9.09E-13	9.09E-13	9.09E-13	9.09E-13
0.009	4.87E-11	4.96E-11	4.96E-11	4.96E-11	4.96E-11	4.96E-11	4.96E-11	4.96E-11	4.96E-11	4.96E-11
0.007	5.88E-10	5.91E-10	5.91E-10	5.91E-10	5.91E-10	6.01E-10	5.91E-10	5.91E-10	5.91E-10	5.91E-10
0.005	3.00E-07	2.87E-07	2.87E-07	2.87E-07	2.87E-07	2.96E-07	2.87E-07	2.87E-07	2.87E-07	2.87E-07
0.002	9.81E-07	9.58E-07	9.58E-07	9.58E-07	9.58E-07	9.74E-07	9.58E-07	9.58E-07	9.58E-07	9.56E-07
K_{sat} (m/s)	1.00E-06	1.36E-06	2.57E-06	7.67E-06	2.12E-05	6.27E-05	1.22E-04	1.93E-04	2.73E-04	3.39E-04

Tableau 3.6: *Perméabilité relative des phases*

Succion (MPa)	Perméabilité relative									
	Etat sain	Phase 1	Phase 2	Phase 3	Phase 4	Phase 5	Phase 6	Phase 7	Phase 8	Phase 9
1	9.45E-10	8.20E-10	4.31E-10	1.44E-10	5.20E-11	1.66E-11	9.02E-12	5.72E-12	4.05E-12	3.24E-12
0.6	1.94E-09	1.54E-09	8.17E-10	2.74E-10	9.91E-11	3.26E-11	1.72E-11	1.09E-11	7.71E-12	6.19E-12
0.3	1.91E-08	1.36E-08	7.22E-09	2.42E-09	8.75E-10	2.99E-10	1.52E-10	9.64E-11	6.81E-11	5.47E-11
0.1	7.05E-07	5.15E-07	2.73E-07	9.16E-08	3.32E-08	1.13E-08	5.76E-09	3.65E-09	2.58E-09	2.07E-09
0.012	8.32E-07	6.66E-07	3.53E-07	1.18E-07	4.29E-08	1.37E-08	7.44E-09	4.72E-09	3.33E-09	2.68E-09
0.009	4.86E-05	3.64E-05	1.93E-05	6.47E-06	2.34E-06	7.91E-07	4.07E-07	2.58E-07	1.82E-07	1.46E-07
0.007	5.87E-04	4.33E-04	2.30E-04	7.70E-05	2.79E-05	9.59E-06	4.84E-06	3.07E-06	2.17E-06	1.74E-06
0.005	3.00E-01	2.10E-01	1.12E-01	3.74E-02	1.35E-02	4.72E-03	2.35E-03	1.49E-03	1.05E-03	8.46E-04
0.002	9.79E-01	7.02E-01	3.73E-01	1.25E-01	4.52E-02	1.55E-02	7.84E-03	4.97E-03	3.51E-03	2.82E-03

III.4. Conclusion

L'impact de l'évolution de la fissuration sur les propriétés hydriques en saturé et non saturé a été étudié en utilisant un modèle équivalent du milieu poreux construit par un réseau de conduits. L'origine et les mécanismes de la fissuration n'étant pas l'objectif de l'étude, l'évolution de la fissuration a été modélisée par un algorithme numérique basé sur les observations et les résultats publiés par plusieurs auteurs [HOM 00, HOX 05, WON 98]. Ces observations montrent une fissuration préférentiellement orientée dans la direction de la contrainte principale et une densité de fissuration qui augmente presque deux fois à la rupture par rapport à un état naturel. L'algorithme mis en place pour la génération de fissures produit les principales caractéristiques de l'évolution des fissures sous contrainte en ignorant les raisons d'une telle évolution. Sur des échantillons fissurés des tests numériques de mesures de conductivité hydraulique en saturé et non saturé ainsi que des tests de sorption-désorption ont été réalisés. Les résultats des modélisations montrent un effet avéré de la fissuration sur les propriétés hydriques du matériau.

A l'état saturé en eau, les échantillons fracturés montrent une augmentation de deux à trois ordres de grandeurs de la conductivité hydraulique dans la direction de propagation de fissures alors que dans les deux autres directions la conductivité hydraulique augmente de façon modérée. Il en sort que la connectivité du réseau poral est le principal facteur de l'évolution de la conductivité.

En non saturé, les effets de la fissuration se manifestent par une sous-saturation des échantillons fissurés en comparaison avec les échantillons sains pour un même état de succion imposée. Cette sous saturation s'explique d'une part par les rayons plus grands des fissures comparés avec les rayons des pores initiaux et d'autre part par une influence de ces fissures sur l'état de saturation des pores avoisinants qui sont connectés directement avec ces fissures.

Les essais de perméabilité en partiellement saturé montrent que pour les mêmes raisons que dans le cas de la courbe de rétention, la perméabilité relative diminue fortement avec la fissuration. L'ensemble de ces résultats met en évidence l'impact de la fissuration sur la réponse hydraulique d'un matériau poreux qui tout en confirmant les observations d'évolution de la perméabilité en non saturé, demande une attention particulière en non saturé notamment vis-à-vis des hypothèses simplificatrices qu'on utilise souvent en pratique sur l'invariance de la courbe de rétention et la perméabilité relative.

Chapitre IV. Modélisation hydro-mécano-chimique en saturé et partiellement saturé par couplage des codes de calculs

IV.1. Introduction

Si les couplages hydromécaniques jouent un rôle indéniable et souvent déterminant dans le comportement des matériaux poreux, ils sont toujours accompagnés par les interactions chimiques du fluide et ions qu'il contient avec la matrice du milieu poreux. Ces interactions peuvent être, selon la problématique étudiée, si importantes qu'elles ne peuvent plus être négligées et les outils de modélisation doivent être adaptés et élargis pour les tenir en compte. Dans la majorité des cas, le liquide joue un rôle indispensable car d'une part il constitue l'environnement où ont lieu les réactions chimiques et d'autre part il participe dans le transport des solutés par advection, dispersion et diffusion [ROS 03]. Certaines interactions de la matrice du matériau poreux avec les solutés (dissolution, précipitation, ...) se produisent aussi dans la surface de contact du fluide avec la matrice. Les conséquences de ces interactions sont diverses telles que la détérioration de l'environnement (transport de pollution), le vieillissement de matériau [PRI 03, ZAK 05,07], l'érosion par l'effet chimique [CLI 04, MAU 05], la réduction de la résistance du matériau par la dissolution de la matrice [HAX 09] ou par endommagement dû à la pression de précipitation dans les pores, la modification du caractère ductile des matériaux [KAR 07, XIA 10], la modification du potentiel de gonflement des matériaux gonflants, etc.

La modélisation de ces couplages en saturé et non saturé font objet de ce chapitre. En différence des chapitres précédents on se place cette fois ci au niveau mésoscopique et on adopte une approche macroscopique de modélisation. En fait on peut se rendre compte facilement que les couplages hydro-chimiques, surtout lorsqu'on s'intéresse à leur cinétique n'ont pas de sens que sur un volume (plus précisément sur une masse définie sur un certain support). Ceci explique que les approches macroscopiques se prêtent mieux à la modélisation de ces phénomènes et sont plus largement utilisées en pratique.

Une première approche de modélisation macroscopique de ces interactions est l'extension de la poromécanique classique comme proposée par plusieurs auteurs (voir par exemple [COU 04] ou [GHA 06]). Les équations de la poromécanique et les équations de la géochimie se trouvent couplées via les coefficients de couplages et sont résolues simultanément.

Une autre approche pour résoudre le problème serait de traiter les équations de la mécanique, hydrique et chimique séparément en utilisant des couplages externes. Dans ce cas chaque

problème (mécanique, hydrique, chimique) est paramétré par les champs de solutions obtenus par les autres problèmes.

Dans ce chapitre nous adoptons cette deuxième approche pour aborder deux problèmes qui font intervenir les couplages HMC : le problème du vieillissement de la pierre de tuffeau blanc par dissolution-précipitation et formation du gypse et celui de la modification du potentiel de gonflement et de la consolidation chimique d'une argile gonflante par l'infiltration d'une solution alcaline. Les outils utilisés pour ces modélisations comprennent d'une part le logiciel HP1 (un couplage entre deux logiciels PHREEQC et HYDRUS 1D qui sont respectivement un logiciel d'écoulement et de transport de particule en 1D et un code de géochimie) et d'autre part un code de calcul maison développé sur Matlab pour les calculs mécaniques paramétrés par les champs externes.

A ce stade nous nous supposons que le lecteur est suffisamment familier avec le vocabulaire et les équations de la géochimie *per se*. L'attention est donc concentrée sur la modélisation des couplages. Néanmoins pour rendre ce travail autoporteur on présente dans l'annexe D quelques notions de base et d'autres informations utiles sur la géochimie.

On commence par la description du principe de couplage HMC par des passerelles avant de présenter les applications citées ci-dessus.

IV.2. Couplages H-M-C par codes passerelles : principes et problèmes

La résolution des équations multiphysiques par couplage externe (ou passerelles de communications) n'est pas une idée nouvelle. Le fait qu'un problème multiphysique implique souvent des équations aux dérivées partielles (EDP) de natures différentes (par exemple une équation parabolique et une équation elliptique) pose souvent des problèmes de convergence et/ou de stabilité du schéma numérique choisi pour leur résolution [EYM 93, EYM 06, AST 12]. Le couplage de deux méthodes numériques, chacune adaptée pour un type d'EDP permet alors de résoudre le problème avec une utilisation optimale des outils numériques existants, normalement utilisés pour résoudre un problème non couplé dans un domaine donné [CAR 09].

Ce couplage ne se fait pourtant pas sans peine : non seulement des outils de « dialogue » entre les codes sont à construire, mais des techniques numériques spécifiques sont nécessaires pour

assurer les conditions de compatibilité entre deux méthodes. A titre d'exemples un schéma d'intégration sélective est adapté pour les problèmes comprenant une équation parabolique et une équation elliptique [AST 12], alors qu'un code de volumes finis combiné à un code aux éléments finis est une solution confortable lorsqu'une des équations est une équation hyperbolique [GHA 06]. Des exemples de tels couplages externes des équations via des codes spécialisés sur un type d'équation existent déjà dans les calculs hydromécaniques où des itérations et un pas de temps approprié sont nécessaires pour mener à bien les calculs [FLA 06, CAR 09].

Bien qu'en principe ces couplages par codes-passerelles puissent être adaptés pour tout type de phénomènes couplés, ils sont particulièrement attractifs lorsque les phénomènes sont faiblement couplés ou du moins lorsque le couplage est faible dans un des sens. Les exemples les plus souvent rencontrés en pratique sont ceux des transferts réactifs où un code fluide cohabite avec un code de géochimie. Notons également que les temps caractéristiques différents des phénomènes physiques n'est pas forcément une difficulté pour ces couplages, où il est possible de faire plusieurs pas de calcul sur un des codes avant de passer sur l'autre. Néanmoins lorsque ces temps caractéristiques sont de même ordre les itérations entre les codes sont alors limitées voir inexistantes.

Au regard des conditions de nos applications pour lesquelles on négligera l'apport de chaleur des réactions chimiques ainsi que les effets directs de la mécanique sur la vitesse des réactions chimiques, un schéma de calcul découplant les équations (T)HM des équations H-C semble particulièrement attirant et économique en termes de développements numériques et informatiques. Cela permet de pouvoir faire des analyses HM-C en modifiant marginalement des outils existants qui peuvent alors être couplés de façon externe via des « passerelles de communication ».

En plus de la commodité de pouvoir résoudre un problème HM-C avec (beaucoup) moins de développements informatiques qu'une implantation de l'ensemble des équations dans un seul code de calcul demande, cette approche offre également une robustesse accrue de la solution en évitant des matrices mal-conditionnées résultantes de l'approche de couplage complet. En fait, la résolution du problème HMC entièrement couplé en utilisant un code aux éléments finis classique conduit à des oscillations et à l'instabilité de la solution due à la présence dans le système d'une équation hyperbolique. Alors que la méthode aux volumes finis est bien adaptée à la résolution des équations hyperboliques, la résolution du problème HM-C avec

une telle méthode sera compliquée notamment à cause du problème mécanique, en particulier dans des domaines à géométrie irrégulière. Ces difficultés à la résolution du problème HM-C entièrement couplé a conduit au développement de nombreuses méthodes numériques dont un bilan exhaustif n'est pas l'objet de cette thèse. On se limite à signaler qu'il s'agit d'un domaine toujours en développement et une solution optimale est encore à trouver [BRE 11].

Selon l'approche de résolution des équations HM-C par couplage chimique externe on résout le problème d'écoulement et de transport réactif par un code spécialisé dans le domaine. En vue de l'indépendance de la solution du problème géochimique de la mécanique, il est possible alors de voir les champs de concentration à tout moment et pour toute la période d'étude concernée comme étant des paramètres du problème mécanique. Ces paramètres introduits dans le code mécanique peuvent modifier le comportement mécanique (d'une façon à définir et qui dépend du type d'action chimique étudié) : la seule concentration ionique dans l'eau peut suffire à modifier le potentiel de gonflement d'une argile gonflante alors que la précipitation d'un néo-minéral dans l'espace poreux d'une pierre peut conduire à l'endommagement de celle ci [DOR 03].

Le schéma de principe du couplage HM-C en couplant un code H-M avec un code H-C est indiqué sur la figure 4.1. Un code de calcul géochimique est initialement couplé avec un code « fluide ».

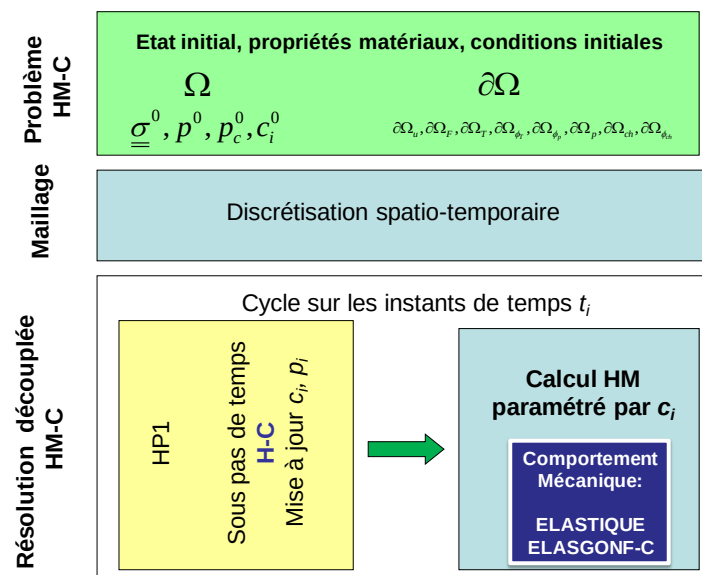


Figure 4.1: Schéma de principe du couplage HM-C par passerelles de communications.

Le code HP1 [DIE 05] qu'on utilise pour ce le couplage H-C comporte deux modules de calcul :

Le premier module est le code HYDRUS 1D pour le problème d'écoulement en saturé et non-saturé et le transport de particules de soluté. Dans sa forme classique ce module permet de tenir en compte des conditions aux limites complexes, suffisantes pour simuler la précipitation de la pluie, l'évaporation et la transpiration d'un matériau poreux due à la météorologie ou à la variation de sa saturation, etc.

L'autre module est la bibliothèque PHREEQ-C, un modèle géochimique qui permet de tenir compte de la cinétique et de l'équilibre des réactions chimiques que l'utilisateur peut définir et qui est une référence dans le domaine [DAV 03].

Le couplage entre les deux modules permet de tenir en compte l'écoulement et le transport réactif (transformations chimiques et minéralogiques, dissolution et précipitation comprise).

HP1 est un couplage faible où les équations sont résolues de manière séquentielle. L'ordre de résolution des équations est le suivant : l'équation de l'écoulement, l'équation du transport de chaleur (sans objet dans nos calculs) et l'équation de transport de soluté. Cet ordre suppose que l'effet de la température sur les réactions chimiques est important et que la mise à jour des informations de la température peut être utilisée par le module de calculs géochimiques (notamment en ce qui concerne la mise à jour de la cinétique des réactions). De même, l'effet de l'advection de soluté (et de la chaleur) est considéré plus important que l'effet que la concentration et la température peuvent avoir sur l'équation d'écoulement [SIM 98]. Un aperçu des couplages au sein de HP1 est montré sur la figure 4.2. Les symboles utilisés dans la figure sont : n l'instant du temps, H variables d'état du problème d'écoulement (pression, saturation, ...), T variables d'état thermique (non relevant dans nos calculs), C variables géochimiques (concentrations des composants et espèces dans le système), G variables concernant la phase solide (composition minéralogique), p^w vecteur de paramètres nécessaires à résoudre l'équation de l'écoulement, p^h vecteur de paramètres nécessaires à résoudre l'équation du transport de chaleur, p^s vecteur de paramètres nécessaires à résoudre l'équation du transport de soluté, p^{gc} vecteur de paramètres nécessaires à résoudre les réactions géochimiques.

Le problème de la stabilité numérique et de la convergence de la solution des équations H-C a été discuté dans plusieurs références (voir par exemple [CAR 09] et [PAR 99]). Dans le cadre

des couplages H-C deux techniques numériques sont souvent utilisées : la technique GIMRT (General Implicit Multi Resolution Time) qui est globalement équivalente à la résolution implicite avec couplage complet des équations de transport et chimiques, et la méthode OS3D (Operator Splitting Diffusion Dispersion Dumping) qui utilise soit une séparation du temps hydrique et chimique soit carrément un séquençage de ces calculs [CAR 09].

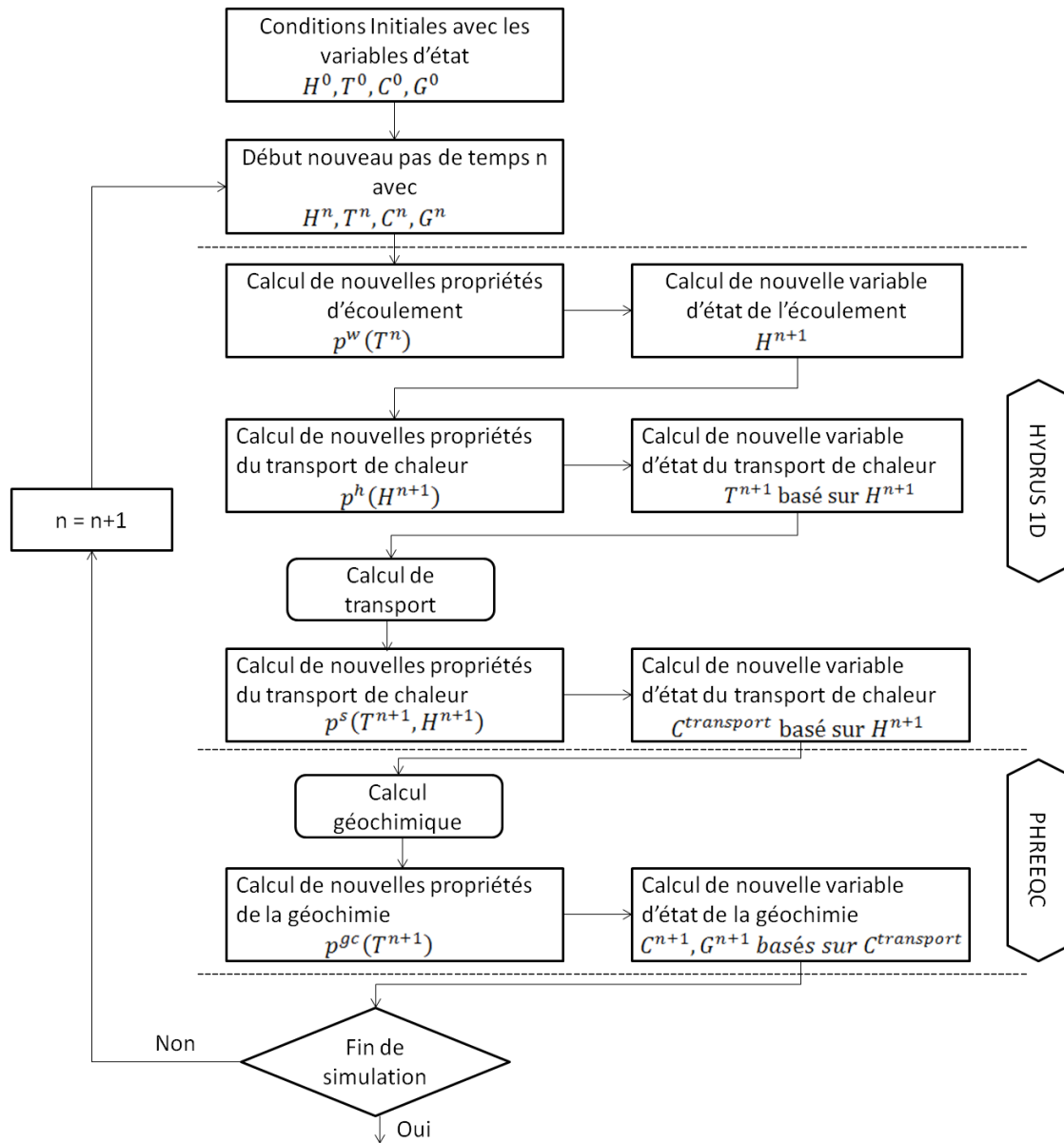


Figure 4.2: Schéma de l'approche de modélisation du couplage HP1.

Au-delà de l'avantage d'utilisation économe de la mémoire machine, la deuxième approche a aussi un avantage numérique lorsqu'il s'agit de traiter des problèmes avec un numéro de Peclet important (lorsque l'advection est dominante par rapport à la diffusion et à la

dispersion). Dans ces cas GIMRT conduit à une dispersion numérique et un séquençage des calculs est souhaitable. En revanche, pour des études comprenant des échelles de temps géologiques et des réactions très lentes la GIMRT serait plus avantageuse, puisque la méthode OS3D demande quant à elle un pas de temps suffisamment petit pour maintenir des numéros de Courant très petits.

A la sortie d'un pas de calcul du problème H-C, le code HP1 renvoie la solution en forme des champs de saturation et des concentrations au code de calcul H-M. Ce dernier utilise ces champs pour paramétrer la solution du problème mécanique défini sur la même géométrie avec des conditions aux limites appropriées. Idéalement, les maillages utilisés par le problème H-C et H-M sont basés sur des grilles duals : pour une grille régulière d'un problème H-M les concentrations sont connues aux centres des éléments alors que les déplacements et la pression aux nœuds de ces éléments.

Un calcul mécanique (M) ou hydromécanique (HM) paramétré par un champ de concentrations se base sur une extension de la poromécanique adaptée aux fluides réactifs. Dans le cas des petites perturbations et transformation, on suppose l'additivité des déformations mécaniques, hydriques, thermiques et chimiques sous la forme :

$$\underline{\underline{d\varepsilon}} = \underline{\underline{d\varepsilon}}^m + \underline{\underline{d\varepsilon}}^h + \underline{\underline{d\varepsilon}}^{th} + \underline{\underline{d\varepsilon}}^{ch} = \underline{\underline{d\varepsilon}}^{THM} + \underline{\underline{d\varepsilon}}^{ch} \quad (4.1)$$

On distingue dans cette dernière équation en plus des déformations traditionnelles de la poromécanique un dernier terme qui traduit les effets de l'ensemble des phénomènes chimiques sur les déformations. En explicitant les déformations THM dans le cadre poromécanique classique [COU 04], on obtient, pour les conditions saturées d'un matériau poreux la forme suivante des contraintes (on remarque la prise en compte d'un comportement mécanique non réversible via les déformations plastiques et l'hypothèse de l'isotropie du comportement hydrique et thermique sans que cela soit restrictif):

$$\underline{\underline{d\sigma}} = \underline{\underline{C}}(c_i) : (\underline{\underline{d\varepsilon}} - \underline{\underline{d\varepsilon}}^p - \underline{\underline{d\varepsilon}}^{ch}) - b(c_i) \underline{\underline{\delta}} dp - 3\alpha_t(c_i) dT \underline{\underline{K}} \underline{\underline{\delta}} \quad (4.2)$$

Les termes $\underline{\underline{C}}(c_i)$, $b(c_i)$, et $\alpha_t(c_i)$ indiquent respectivement le tenseur de rigidité élastique, le coefficient de Biot et le coefficient de dilatation thermique de la matrice, tous supposés dans le cas général des fonctions des champs de concentrations c_i des espèces chimiques.

L'équation (4.2) indique qu'un calcul H-M paramétré par des champs de concentrations peut être réalisé en utilisant les mêmes formalismes hydromécaniques (non) linéaires à un champs

de précontrainte près (le terme $\underline{\underline{C}}(c_i): \underline{\underline{d\varepsilon}}^{ch}$) et avec les paramètres étant des fonctions de concentrations. Sans expliciter les équations proprement dites, en vue de ce qui vient d'être dit, réaliser un calcul H-M paramétré par les concentrations revient à calculer un champ des déformations chimiques et d'identifier les fonctions de la variation des propriétés (élastiques et des couplages) avec la concentration.

IV.3. Modélisation HMC de l'infiltration alcaline d'une argile gonflante

IV.3.1. Contexte de l'étude

L'utilisation en pratique de l'argile gonflante comme matériau de scellement est courant en géotechnique et souvent liée avec la problématique des réservoirs ou de stockage. On illustre son utilisation comme matériau de scellement dans les stockages des déchets radioactifs. Dans ce contexte l'argile gonflante est utilisée entre autre comme le matériel de base pour sceller les galeries d'accès [AND 05, 08]. Le principe de scellement est basé sur la capacité des minéraux stratifiés de type de smectite à augmenter leur volume lorsqu'ils se saturent. Les mécanismes de ce gonflement sont d'origine chimique et peuvent être expliqués au niveau microscopique par la théorie dite de double couche [CHR 02, DOR 06]. Le scellement de la galerie consiste alors à créer un bouchon de plusieurs mètres en longueur en argile gonflante (MX80+30% de sable) à un état désaturé. On compte alors que l'eau arrivée du massif ou apportée de l'extérieur, sature le bouchon et développe une pression de gonflement suffisante, pour combler les vides éventuels et exercer une pression sur le revêtement des galeries et le massif rocheux lui même. Les galeries après creusement sont revêtues d'une couche de béton (B40) d'une épaisseur de 20cm suivi par une couche de soutènement d'environ 30cm. La fermeture des galeries (donc la pose du bouchon en argile gonflante) intervient après une période d'exploitation d'une centaine d'année pendant laquelle la galerie est ventilée. Suite au creusement et à la ventilation, une zone endommagée (connue comme EDZ) et une zone désaturée se développent autour des ouvrages de stockages. La resaturation de ces zones et l'arrivée d'eau dans le bouchon en argile gonflante est estimée de se produire autour de 1200 ans après la fermeture de la galerie. Le béton du revêtement et du soutènement à cette période serait dégradé partiellement ou totalement et les produits de cette dégradation introduits dans l'eau arriveront dans le bouchon sous forme de solutions de forte alcalinité [AND 05]. Le

transport d'une plume alcaline du béton dégradé vers l'argile gonflante peut d'une part provoquer la dissolution des minéraux argileux dans le béton et d'autre part changer tout simplement la population ionique de l'espace poreux autour des minéraux argileux en modifiant ainsi profondément le potentiel du matériau de scellement à se gonfler.

Afin de mieux comprendre ce phénomène, plusieurs équipes de recherche travaillent avec des outils expérimentaux, théoriques et numériques [AND 12]. Nous proposons ici d'effectuer la modélisation H-M-C d'un essai type réalisé au laboratoire sur une argile gonflante modèle afin de quantifier l'impact de l'infiltration alcaline sur le potentiel de gonflement des argiles gonflantes.

IV.3.2. Caractéristiques du test : matériau, modèle numérique et chronologie de simulation

On trouve dans la littérature des descriptions plus ou moins complètes des tests de type infiltration réalisés sur des matériaux de gonflement. Les données utilisées ici sont principalement issues de [KAR 07] et complétées des données de [MON 05]. On considère donc un échantillon cylindrique de hauteur de 74mm de bentonite (MX-80) compacté à une teneur en eau donnée est placé dans une cellule oedométrique. La bentonite MX-80 contient 5 minéraux principaux. La composition minéralogique de la bentonite considérée dans la modélisation est indiquée dans le tableau 4.1 :

Tableau 4.1 : Composition minéralogique d'un litre de bentonite MX-80 sec [GAU 04].

Minéral	MX-80	
	Masse (g)	mol/l
Cristobalite	157.1541	2.6192
Gypsum	9.4292	0.0548
Na-Montmorillonite	1178.6560	3.2151
Calcite	22.0016	0.2200
Pyrite	0.0025	2.095E-5
Autre	204.2979	-
Somme	1571.5414	0.0000
CEC cmol	81 meq/100g	1.27251

Parmi les composants de la bentonite MX-80, la pyrite est un minéral mineur, la cinétique de ce minéral n'est donc pas tenue en compte (nous considérons donc que ce minéral est à l'état d'équilibre).

On considère que l'échantillon a les mêmes propriétés que celles décrites dans [GAU 04] à savoir une porosité de 43%, une conductivité hydraulique à l'état saturé de $2,403.10^{-9} m/s$ et une densité sèche de $1570 kg/m^3$.

Une première phase (préliminaire) du test consiste à réaliser un gonflement à volume constant en saturant l'échantillon tout en empêchant ses déformations et en enregistrant l'évolution de la pression de gonflement avec le temps. Cette phase de saturation peut être faite avec de l'eau de composition différente. L'eau pure est considérée ici.

Une fois l'équilibre atteint, le test d'infiltration proprement dit peut commencer : au cours de ce test on injecte, dans les mêmes conditions de déformations empêchées, une solution alcaline dans une des bases du cylindre. Une pression hydraulique de $5.10^{-3} MPa$ est maintenue à la base supérieure de l'échantillon et nulle à la base inférieure.

Du point de vue de la modélisation, il s'agit d'un problème 1D d'infiltration avec géométrie et conditions aux limites décrites schématiquement sur la figure 4.3.

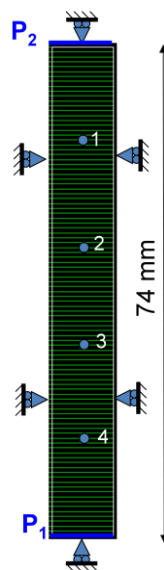


Figure 4.3: Géométrie et conditions aux limites du problème traité.

Le maillage utilisé dans le calcul comporte 100 éléments identiques (chacun de taille de 7.4mm). On utilisera par la suite le terme cellule pour désigner un élément conformément à l'appellation HP1. Le problème étant 1D (selon la direction verticale), l'extension dans la direction horizontale du domaine est arbitraire et n'a pas de conséquence sur la solution. Par simplification des calculs on suppose alors que le volume de chaque cellule est d'un litre.

Un flux hydrique nul est maintenu sur les frontières latérales de l'échantillon. Les conditions mécaniques aux limites sont simples : les déplacements sont bloqués sur toutes les frontières.

La phase préliminaire de saturation à l'eau pure et de rééquilibrage de l'eau porale n'est pas simulée dans notre calcul, l'objectif étant de simuler l'infiltration alcaline qui commence une fois l'équilibre géochimique dans l'espace poral établie. La composition chimique de l'eau porale à cet instant d'équilibre est décrite dans le tableau 4.2 [GAU04] et servira comme état initial pour notre calcul géochimique.

Tableau 4.2 : *Caractéristiques de l'eau dans les pores de la bentonite avant l'infiltration [GAU04].*

Element	Eau de pores de bentonite	Unité
pH	7.39	
Eh	-192	mV
Na	3.21E-01	mol/kg eau
K	3.31E-03	mol/kg eau
Mg	5.35E-03	mol/kg eau
Ca	1.40E-02	mol/kg eau
Al	8.26E-10	mol/kg eau
Si	3.43E-04	mol/kg eau
S	1.48E-01	mol/kg eau
Cl	6.46E-02	mol/kg eau

Afin de simplifier le problème, la solution alcaline arrivant au bouchon en argile gonflante est supposée être constituée par de l'hydroxyde NaOH à une concentration donnée (0.3M et 1M dans l'essai de [KAR 07]). La simulation d'infiltration est poursuivie sur 1000 jours à température constante de 25°C.

On adopte le modèle géochimique proposé par [GAU 04] dont les équations et les constantes des réactions sont données dans l'annexe E.

IV.3.3. Calcul H-C

Concernant le contrôle numérique du calcul, le pas de temps initial est de 5 secondes, le pas de temps peut varier entre 1 et 50000 secondes. Le facteur de multiplication du pas de temps est entre 0.7 et 1.3. Le nombre maximal d'itération est de 20. La tolérance de teneur en eau est égale à 0.001 et la tolérance de pression est de 0.01.

IV.3.3.1. Principaux résultats du calcul H-C

L'évolution en fonction du temps du pH aux trois nœuds (#1 surface d'injection, #50 mi-hauteur de l'échantillon et #101 à la base inférieure de l'échantillon) pour l'essai d'infiltration par solution de NaOH à 1M est présentée sur la figure 4.4.

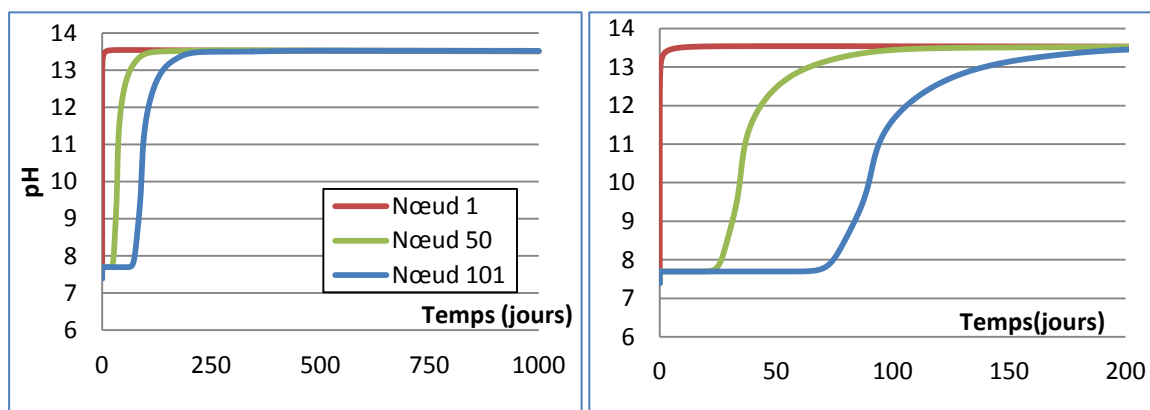


Figure 4.4: Evolution du pH en fonction du temps aux nœuds #1, #50 et #101.

Au début, le pH de la solution est de 7.39 (tableau 4.2). Après le contact avec la solution alcaline, il y a une forte augmentation de l'alcalinité sur la première cellule alors que cela prend un certain temps avant d'évoluer à l'intérieur de l'échantillon (figure 4.4). Le pH de la cellule se stabilise rapidement à 12.5 (pour la solution NaOH 0.3M) et 13.6 (pour la solution NaOH 1M).

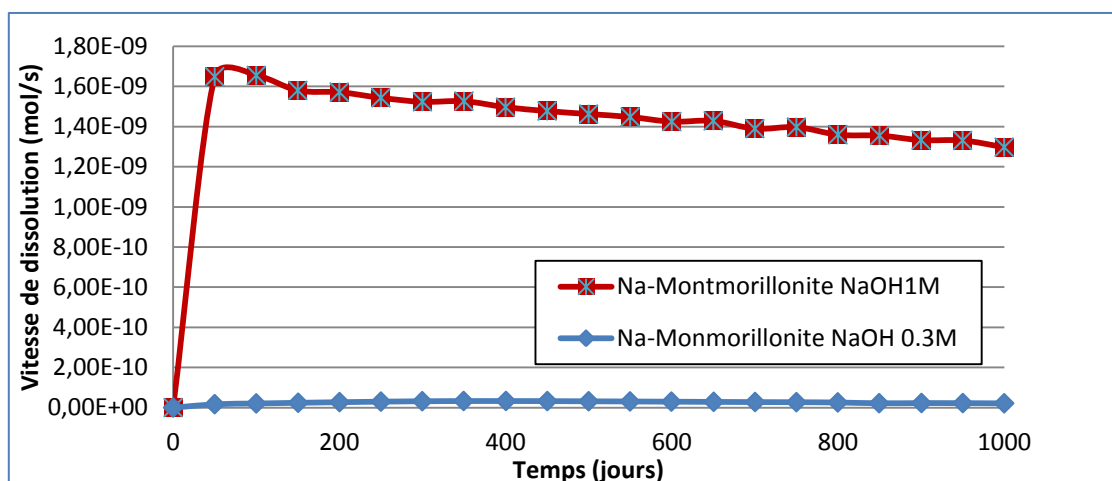


Figure 4.5: Vitesse de dissolution du Na-Montmorillonite.

Dans un environnement alcalin, la dissolution de plusieurs minéraux tels que cristobalite, montmorillonite, gypse et calcite peut avoir lieu. La vitesse de dissolution de ces minéraux

varie avec le temps car la dissolution est fonction de la composition de l'eau porale qui évolue par l'arrivée de la solution alcaline, par la dissolution des minéraux et par leur transport. La vitesse de dissolution de Na-Montmorillonite (le principal minéral qui se dissout dans notre cas) pour une solution NaOH 1M est environ 100 fois plus grande que pour une solution NaOH 0.3M (figure 4.5). La baisse de la vitesse de dissolution de Montmorillonite avec le temps s'explique par la saturation de Montmorillonite dans la solution.

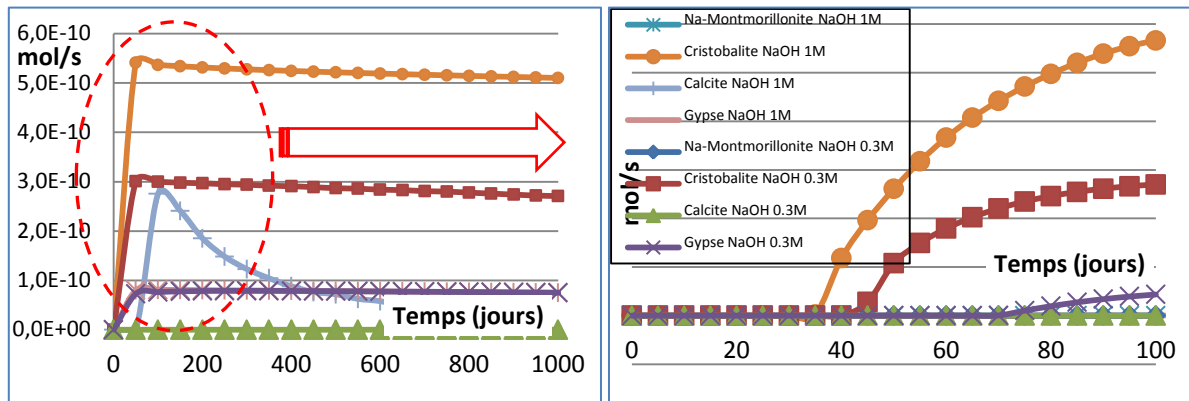


Figure 4.6: Vitesse de dissolution des autres minéraux à la cellule #50.

Sur la figure 4.6 sont présentées les vitesses de la dissolution des autres minéraux comme la cristobalite, la calcite, et le gypse. La cristobalite dissout plus vite que le gypse et la calcite. La vitesse a tendance à diminuer légèrement en fonction du temps. La même tendance d'une vitesse supérieure de dissolution pour la solution NaOH 1M est observée aussi pour ces minéraux.

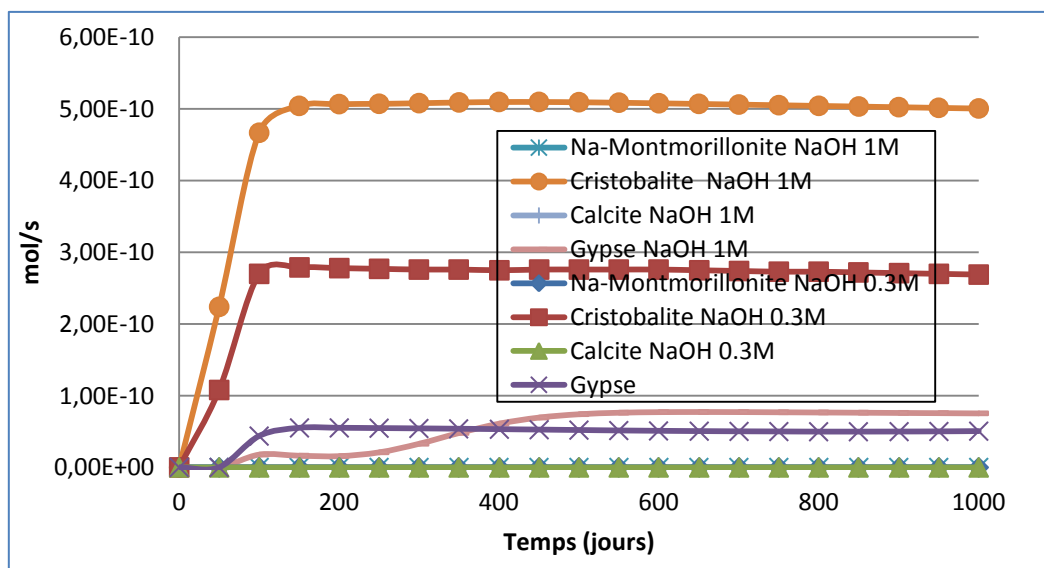


Figure 4.7: Vitesse de dissolution des autres minéraux à la cellule #101.

Dans la cellule se trouvant à mi-hauteur de l'échantillon la dissolution de cristobalite démarre vers le 35^{ème} jour et le 40^{ème} jour après le début d'infiltration NaOH 1M et NaOH 0.3M respectivement.

La dissolution du gypse commence plus tardivement (vers 70^{ème} jour pour la solution NaOH 0.3M et encore plus tard pour la solution NaOH 1M). Au début, la concentration de Ca^{+2} et SO_4^{-2} dans la solution est assez élevée, le gypse est équilibré, la dissolution ne peut pas avoir lieu.

En fait la dissolution de la calcite des cellules en surface est responsable de la hausse dans un premier temps de concentration de Ca^{+2} (le cas de solution alcaline NaOH 1M). Les deux solutions sont en fait sursaturées en calcite au delà de la première cellule notamment en raison du transport des produits de dissolution vers l'intérieur de l'échantillon. Ce qui explique le retard de la dissolution du gypse à l'intérieur de l'échantillon, retard qui est plus prononcé pour la solution NaOH 1M et pour les cellules plus éloignées de la surface d'infiltration (figure 4.7).

Les profiles du pH et des vitesses de dissolution des minéraux à différents instants de calculs sont présentés sur la les figures 4.8 et 4.9. Notons la stabilisation du pH le long de tout l'échantillon dès 500 jours.

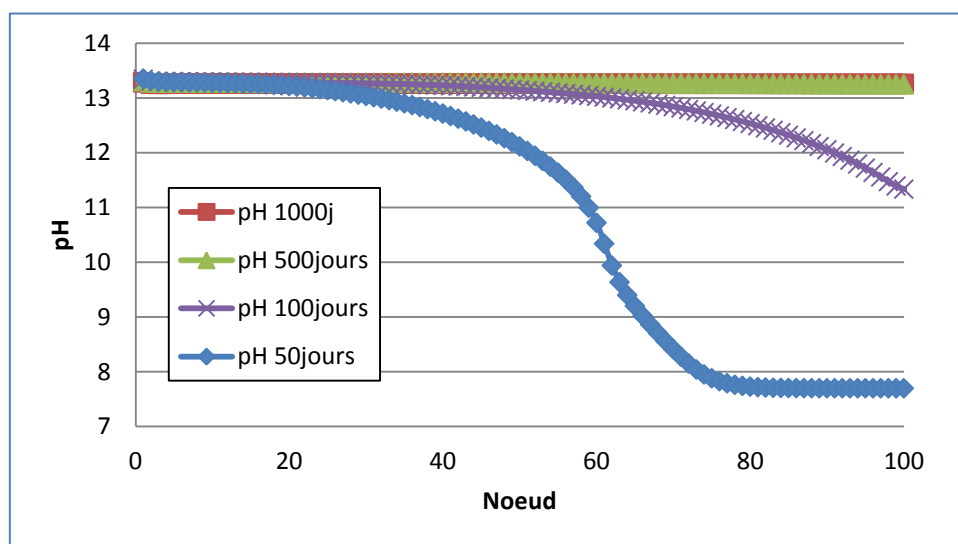


Figure 4.8: Profiles du pH le long de l'échantillon à différents instants de simulation pour l'infiltration avec la solution NaOH 1M.

Si le profile de la vitesse de dissolution de cristobalite coïncide grossièrement avec le profile du pH, les vitesses de dissolution des autres minéraux semblent moins corrélées directement

avec le pH. Notons également que la dissolution de Na-montmorillonite ne se poursuit pas en profondeur de l'échantillon mais est limitée aux deux premiers nœuds (figure 4.9).

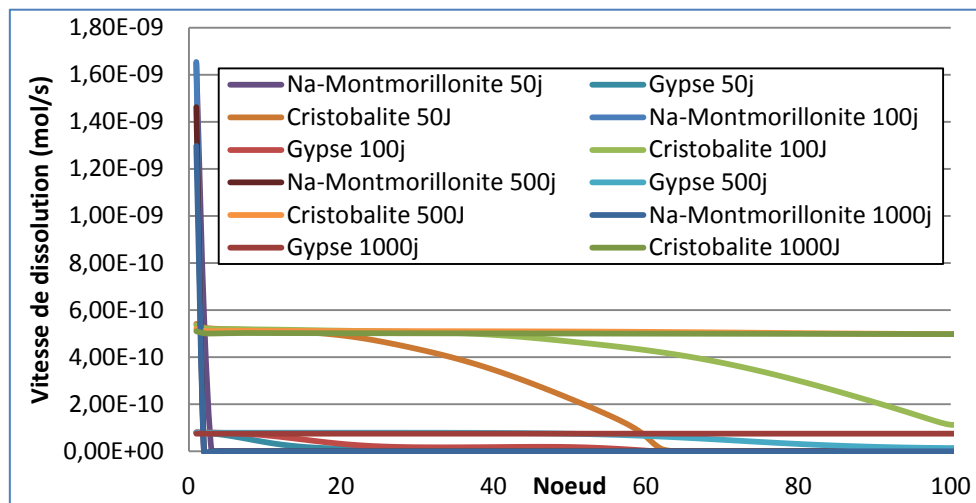


Figure 4.9: Vitesse de dissolution des minéraux en fonction des cellules (NaOH 1M).

La figure 4.10 résume les quantités dissoutes des principaux minéraux dans la première cellule. Pour la période simulée les quantités dissoutes restent modérées. Même pour le Na-Montmorillonite, le minéral le plus dissout (figure 4.10) les quantités dissoutes restent inférieures à 3% (voir le tableau 4.1).

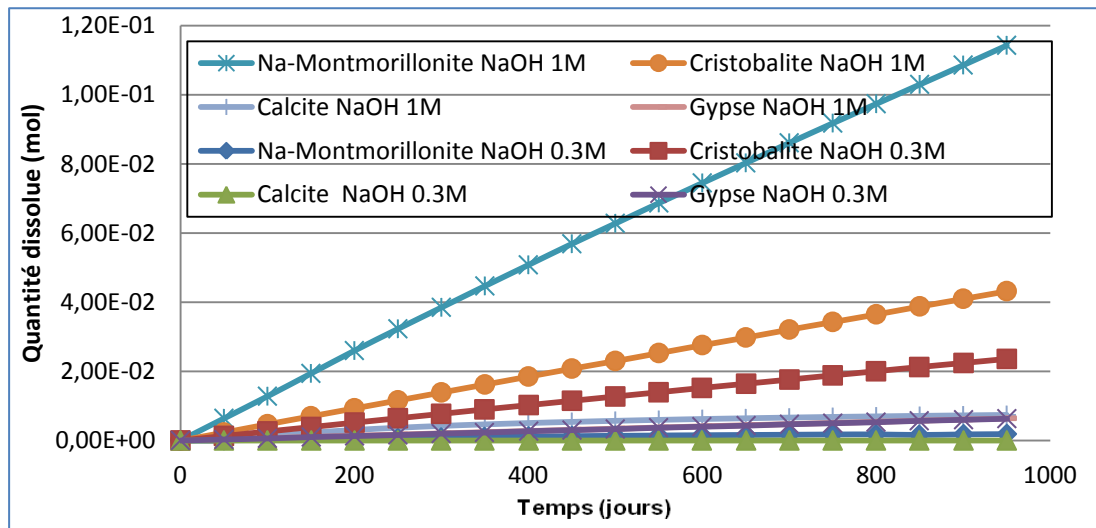


Figure 4.10: Les quantités des minéraux dissous en fonction du temps dans la première cellule.

Le potentiel de gonflement des argiles gonflantes dépend de la teneur en minéraux gonflants et de la composition chimique de l'eau porale saturante. Dans cette composition la concentration des ions $[Ca^{++}]$ et $[Na^+]$ et du rapport de ces concentration avec le $[CeC]$.

Nous présentons de façon détaillé les profiles de la concentration des ions $[Na^+]$ et $[Ca^{++}]$ à différents instants de simulation (figures 4.10 et 4.11).

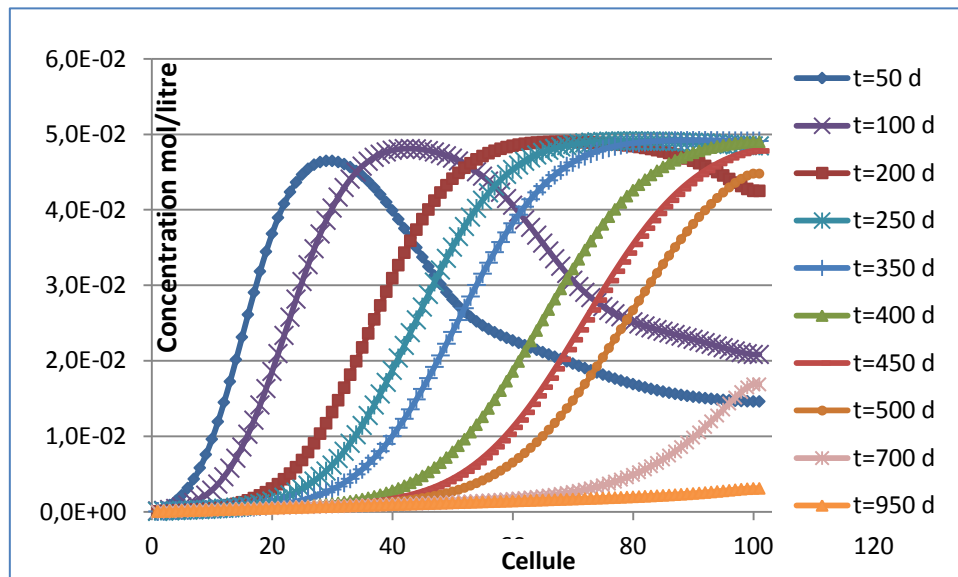


Figure 4.11: Profiles de concentration de Ca^{++} à différents instant de calcul pour l'infiltration avec NaOH 1M.

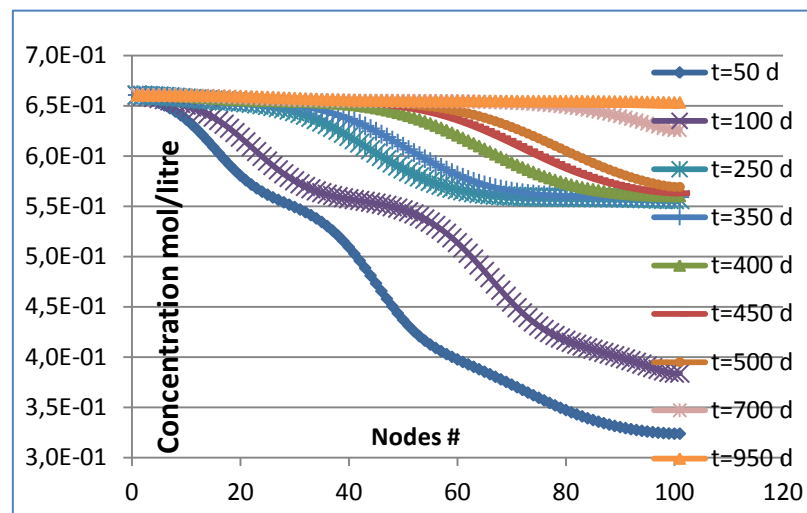


Figure 4.12: Profiles de concentration de Na^+ à différents instant de calcul pour l'infiltration avec NaOH 1M.

Notons l'augmentation progressive de $[Na^+]$ en commençant par la surface d'infiltration vers la profondeur alors que les profiles de $[Ca^{++}]$ ne sont pas monotones. Dans un premier temps

la concentration de Ca^{++} diminue dans les cellules proche de la surface d'injection et la concentration augmente dans les cellules à l'intérieure de l'échantillon par le transport des produits de dissolution. Au fur et à mesure que la dissolution avance la diminution de la concentration Ca^{++} avance dans l'intérieur de l'échantillon ; à 950 jours il n'y a pratiquement pas de Ca^{++} dans l'eau porale, remplacées par Na^+ . Ce changement de la composition de l'eau porale a des conséquences sur le potentiel de gonflement de cette argile. Notons que par rapport à la dissolution du Na-Montmorillonite la cinétique de remplacement des ions Ca^{++} par Na^+ dans l'espace poral est bien plus rapide et le potentiel de gonflement est d'abord lié à ce remplacement.

IV.3.3.2 Conclusions sur le calcul H-C

Les résultats de la simulation d'un essai d'infiltration d'un échantillon d'argile gonflante par une solution hyperalcaline traduisent les principales transformations géochimiques observées aussi dans les essais de laboratoire : la dissolution lente et limitée des Na-Montmorillonite et de la calcite suivie par la dissolution des autres minéraux. C'est bien évidemment l'alcalinité de la solution d'infiltration est le facteur de déclenchement de ces transformations et d'une variation rapide du pH dans l'échantillon. En particulier, l'alcalinité de la solution infiltrée joue un rôle important sur la vitesse de dissolution des minéraux qui sont plus fortes pour la solution NaOH 1M que pour la solution NaOH 0.3M. En particulier, la calcite ne dissout que dans le cas de NaOH 1M.

Seule la dissolution de cristobalite semble directement corrélée avec la cinétique de variation du pH. Les quantités dissoutes des minéraux pour la période simulée, restent modérées et le fait le plus remarquable des transformations géochimiques est l'augmentation dans la solution porale de la concentration Na^+ et la diminution progressive des ions Ca^{++} . Ces changements de la composition de l'eau porale a des implications importantes sur le potentiel de gonflement de l'argile.

IV.3.4. Modélisation du comportement mécanique de l'argile gonflante paramétrée par champs de concentrations

En suivant le paradigme de couplage H-M-C par des passerelles de communications entre codes spécialisés on aborde le problème du comportement mécanique des argiles gonflantes en se basant sur un modèle mécanique (hydromécanique) initialement utilisé sans prendre en

compte la réactivité du fluide. Ce modèle est en suite adapté à la marge notamment en ajoutant une fonction permettant de calculer les déformations chimiques et décrire la variation des paramètres élastiques avec la concentration (équation 4.2).

A l'heure actuelle de nombreux modèles sont capables de décrire le comportement mécanique des argiles gonflantes avec un niveau de finesse choisi et adopté au problème traité ([ALO 91, HOX 08]). De part sa simplicité nous choisissons d'utiliser comme modèle de base mécanique le modèle simplifié de gonflement élastique ELASGONF [HOX 05, AST 12]. Les hypothèses principales et les équations de base sont présentées dans l'annexe G alors que la version prenant en compte la composition chimique du fluide saturant est décrit brièvement ci-dessous.

IV.3.4.1. Modèle mécanique des argiles gonflantes

En suivant les mêmes hypothèses de base que le modèle ELASGONF, les déformations du matériau sous sollicitations simultanées mécaniques, hydriques et chimiques sont écrites :

$$d\varepsilon_v = \frac{d(\sigma_m + p_a) - b(s, c^*)ds}{K_s(s, c^*)} + \underline{\underline{d\varepsilon^{ch}}} = \frac{d(\sigma_m + p_a) - b(s, c^*)ds}{K_s(s, c^*)} + \underline{\underline{\beta}}(c^*)dc^* \quad (4.3)$$

Le premier terme dans cette équation est identique à celle utilisée dans le modèle ELASGONF et exprime la contribution de la contrainte mécanique dans la déformation totale. Le deuxième terme du numérateur exprime la contribution de la succion (à concentration équivalente constante) dans la déformation. Le terme $b(s, c^*)$ peut être vu d'une part comme un coefficient de Biot qui évolue avec la succion et avec la concentration équivalente, et d'autre part comme une sorte de coefficient de dilatation hydrique qui varie avec la concentration chimique équivalente (définie plus loin).

Ce terme est alors écrit sous la forme :

$$b(s, c^*) = \frac{b}{\Gamma(s)} \cdot \beta(c^*) \quad (4.4)$$

avec b étant le coefficient de Biot classique et $\Gamma(s)$ une fonction qui exprime la variation de ce coefficient avec la succion s lorsque le fluide mouillant est de l'eau pure:

$$\Gamma(s) = \frac{\text{Exp}(\beta_m \cdot \xi^2)}{(1 + \xi)} \quad (4.5)$$

où $\xi = \frac{s}{\sigma_0}$, et σ_0 est une valeur de référence égale à 1MPa utilisée pour rendre l'équation adimensionnelle. Comme attendue $\Gamma(0)=1$ et $\lim_{s \rightarrow \infty} \Gamma(s) = \infty$.

Quant à la fonction $\mathfrak{g}(c^*)$ cela exprime la variation du coefficient de dilatation hydrique avec la concentration chimique équivalente. Pour l'eau pure cette fonction serait alors égale à 1 $\mathfrak{g}(c^* = c_{ep}^*) = 1$.

Le dénominateur de l'équation (4.3) est le module d'incompressibilité, variable avec la succion et la concentration équivalente. Par une extension de l'équation respective du modèle ELASGONF on adopte l'expression suivante :

$$K(s) = K_0 \cdot ((1-r) \cdot \text{Exp}(-\beta \cdot s) + r) \cdot \mathfrak{K}(c^*) \quad (4.6)$$

A l'instar de $\mathfrak{g}(c^*)$, la fonction $\mathfrak{K}(c^*)$ représente une fonction inconnue qui doit être déterminée expérimentalement et exprimant la variation du module d'incompressibilité avec la concentration. Pour les mêmes raisons la concentration équivalente est égale à celle de l'eau pure c_{ep}^* , $\mathfrak{K}(c^* = c_{ep}^*) = 1$

Le dernier terme de l'équation (4.3) représente les déformations chimiques à saturation et contrainte constante comme :

$$\underline{\underline{d\varepsilon^{ch}}} = \underline{\underline{\mathfrak{B}}}(c^*) dc^* \quad (4.7a)$$

Pour un matériau isotrope cette équation s'écrit:

$$\underline{\underline{d\varepsilon^{ch}}} = \underline{\underline{\mathfrak{B}}}(c^*) dc^* = \underline{\underline{\mathfrak{B}}}(c^*) \underline{\underline{\delta}} dc^* \quad (4.7b)$$

Pour le cas des fluides homoioniques certains auteurs [LIU 05] ont proposé l'équation suivante que nous adoptons par la suite :

$$\underline{\underline{\mathfrak{B}}}(c^*) = -F_0 \gamma_0 \exp(\gamma_0 (1 - c^* + \ln c^*)) \left(\frac{1}{c^*} - 1 \right) \quad (4.8)$$

Pour la définition de la concentration équivalente normalisée on introduit le concept d'un fluide de référence dans lequel, les concentrations des ions sont telles qu'aucun effet chimique ne se produit dans le matériau. La concentration de l'espèce i dans ce fluide est c_i^{ref} alors que la concentration de cet même espèce dans l'eau pure est c_i^{ep} . Si la concentration de l'espèce

dans le fluide étudié est actuellement c_i^a ($c_i^a = \frac{m_i}{m_i^{ref}}$ avec m_i^{ref} étant la masse de l'espèce dans une configuration de référence d'une solution saturée) alors la concentration normalisée est définie comme :

$$c_i = \frac{c_i^a - c_i^{ref}}{c_i^{ref} - c_i^{ep}} \quad (4.9)$$

Dans le cadre des argiles gonflantes une telle concentration équivalente pourrait être la différence entre la concentration ionique (anions ou cations) à l'intérieur de la bicouche des feuillets et cette même concentration dans le fluide saturant. Notons par c^{int} la concentration ionique initiale dans le matériau argileux (qui constitue une donnée initiale du problème) et c^{ext} la concentration ionique à un moment donné. On peut définir la concentration équivalente de façon similaire :

$$c^* = \frac{c^{int} - c^{ext}}{c^{int} - c_{ep}} \quad (4.10)$$

En prenant comme concentration de référence la concentration c_{ep} de l'espèce choisie dans l'eau pure, on constate facilement que selon cette définition lorsque le fluide poral est l'eau pure alors :

$$c^* = c_{ep}^* = 1 \quad (4.11)$$

Le choix des espèces à considérer dans la concentration équivalente c^* est crucial et dépendra du type de problème. Cette concentration est une mesure de la concentration de tous les ions susceptibles d'avoir une influence sur le comportement mécanique du matériau étudié.

Pour les matériaux de scellement que nous nous intéressons ici (ainsi que pour l'interaction de ces matériaux avec les fluides alcalines) une telle concentration serait par exemple un des indices $ESP = \frac{[Na^+]}{CEC}$ ou $L_c = \frac{[Ca_{L}^{++}]}{[Ca_0^{++}]}$ proposés dans [SAH] ou alors directement le CEC.

Dans le [MON 05] et [GAU 08] les auteurs proposent d'utiliser à cette fin le taux de changement des minéraux gonflants en comptant aussi les minéraux secondaires :

$$D = \left(1 - \frac{V_{mgt}}{V_{i-s}}\right) + \frac{\sum V_{mgs}}{V_{i-s}} \quad (4.12)$$

Par un principe de parcimonie on adopte les fonctions suivantes :

$$\begin{aligned}\mathfrak{K}(c^*) &= (1 + \kappa c^*) \\ \mathfrak{S}(c^*) &= (1 + \kappa_g c^*)\end{aligned}\tag{4.13}$$

En vue de la cinétique lente de dissolution des minéraux argileux dans une solution alcaline, en tous cas plusieurs fois plus lente que la cinétique de changement de la composition d'eau porale on adopte pour la suite comme concentration équivalente le rapport de la concentration des ions de Na^+ à l'état actuel avec cette même concentration après la saturation avec de l'eau pure.

IV.3.4.2. Résultats de la simulation numérique d'un essai d'infiltration par une solution hyperalcaline d'un échantillon MX80

Comme indiqué précédemment on utilise pour ces simulations les résultats des essais et les données de [KAR 07] qui ne sont pas complètes en ce qui concerne les propriétés mécaniques des échantillons testés : seule la masse volumique des échantillons est indiquée mais des données telles que le module de Young, coefficient de Poisson ou le paramètre du potentiel de gonflement à l'eau pure b , ne sont pas accessibles dans cette référence. On prend alors pour ces paramètres des valeurs typiques de ce type de matériau sachant que leur plage de variation est assez large et dépendant de l'état de compactage des échantillons et de la teneur en eau initiale. On anticipe alors plus une comparaison qualitative que quantitative entre nos simulations et les résultats des essais proprement dits (figure 4.13).

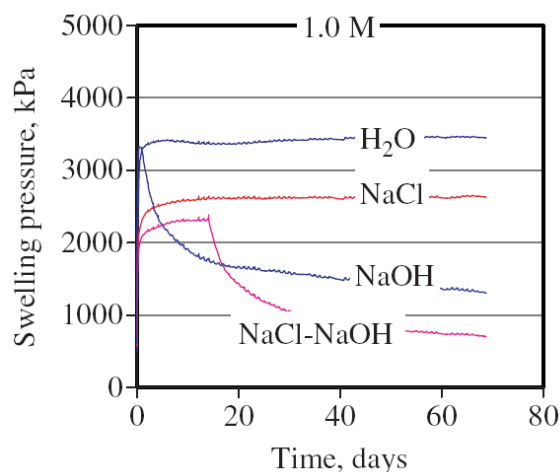


Figure 4.13: Evolution de la pression de gonflement en cour d'un essai d'infiltration par des solutions à composition chimique variée (D'après [KAR 07]).

La valeur de β_m est ajustée de sorte à ce que la pression de gonflement à l'eau pure coïncide avec la pression de gonflement observée en cours de l'essai (figure 4.13) soit 3.5MPa. En fait, il existe la relation suivante entre ce paramètre et la pression de gonflement à l'eau pure:

$$\beta_m = \left(\frac{\sigma_0}{P_{gf}^{\max}} \frac{\sqrt{\pi} + \sqrt{\pi + 8 \frac{P_{gf}}{\sigma_0}}}{4} \right)^2 \quad (4.14)$$

Les propriétés mécaniques utilisées dans le calcul sont données dans le tableau 4.3.

Tableau 4.3 : Les propriétés mécaniques de la bentonite MX-80 utilisées dans la simulation

Symbole		Nom	Unité	Valeur
Paramètres du comportement mécanique pur	E_o	Module de Young drainé	MPa	1.5
	ν_o	Coefficient de Poisson drainé	[-]	0.4
	r	Ratio du module d'incompressibilité entre l'état sec et saturé	[-]	2
	$\beta_m^{(*)}$	Coefficient contrôlant gonflement hydrique à l'eau pure	[-]	0,27584
	b	Coefficient de Biot	[-]	0.8
	M	Module de Biot	MPa	2813
Couplage Mécanique-Chimique	γ_o	$\mathfrak{B}(c^*) = -F_o \gamma_o \exp(\gamma_o (1 - c^* + \ln c^*)) \left(\frac{1}{c^*} - 1 \right)$	[-]	0.043
	F_o		[-]	0.008
	κ_k		[-]	0

La simulation de la pression de gonflement à volume constant, développée en cours de saturation pour les paramètres choisis est présentée sur la figure 4.13. Notons que la pression maximale de gonflement est entièrement défini par le paramètre β_m et la simulation ici ne constitue pas une validation des autres paramètres mécaniques. Le but de la simulation est de démontrer le comportement du modèle lorsque le fluide saturant est de l'eau pure.

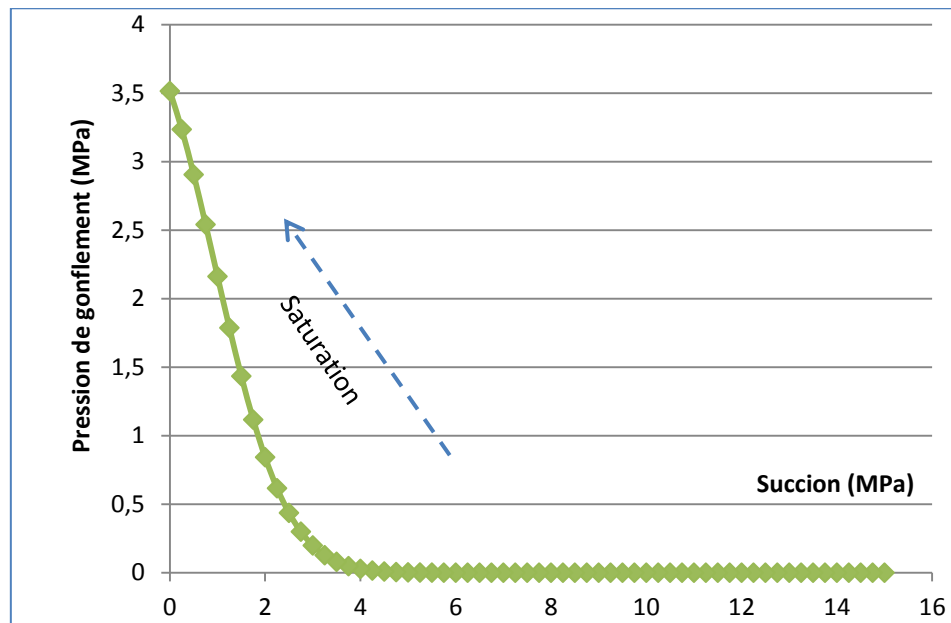


Figure 4.14: Simulation numérique de l'évolution de la pression de gonflement en fonction de la saturation.

Pour les calculs avec la chimie les données d'entrée pour le modèle mécanique sont les profils des concentrations à différents instants de calculs (figure 4.11).

Sur la figure 4.14 on présente les déformations chimiques en fonction du temps à différentes hauteurs de l'échantillon. On constate que les déformations chimiques (assimilables aux déformations thermiques) ne sont pas uniformes et traduisent les champs de concentrations non-uniformes.

Les isovaleurs de la contrainte verticale à différents instants sont présentés sur la figure 4.15.

On constate que l'état de contrainte est bien uniforme et est induit par l'évolution de la composition du fluide poral.

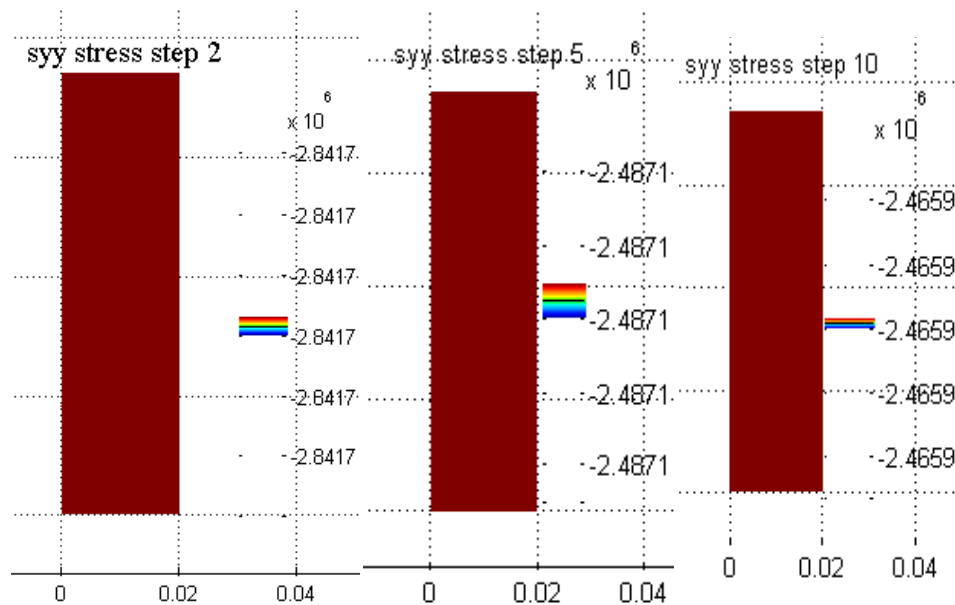


Figure 4.15: Isovaleurs des contraintes à différents instants de calculs.

La figure 4.16 présente l'évolution de la pression de gonflement en fonction du temps au cours de l'essai d'infiltration. Comme indiqué par plusieurs auteurs les réactions géochimiques influencent de plusieurs façon la réponse mécanique des argiles gonflante [GAU 04] : d'abord par modification de la population des cations adsorbés sur les feuillets, la nature des ions, leurs charges électriques et leurs dimensions, en suite par la dissolution des minéraux argileux (smectites, illites, kaolinite) et accessoires, et enfin par la formation des minéraux secondaires.

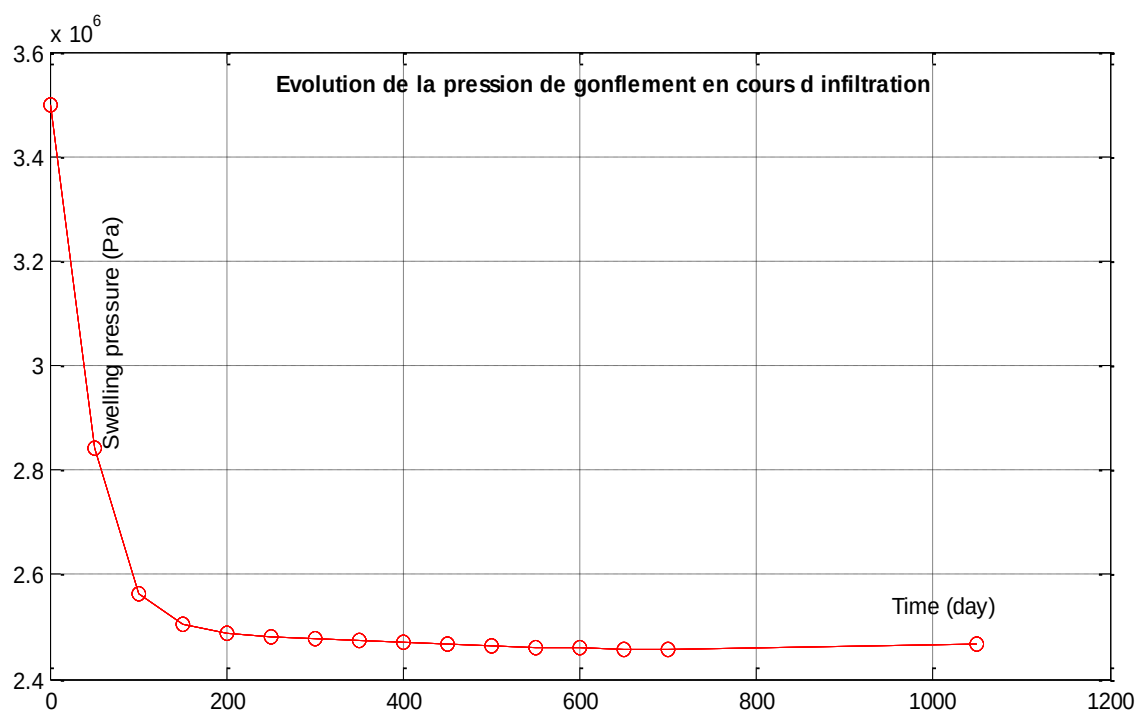


Figure 4.16: Prédiction de l'évolution de la pression de gonflement en fonction du temps.

Dans les simulations présentées ici seule l'évolution de la composition ionique de l'eau porale est prise en compte. Les résultats de la simulation traduisent assez bien qualitativement les résultats des essais de laboratoire ou une diminution de la pression de gonflement suite à l'infiltration avec NaOH 1M a été observée. Une comparaison quantitative de la simulation avec les essais est cependant impossible faute de données notamment sur les propriétés mécaniques.

IV.4. Modélisation hydro-chimique du tuffeau blanc

IV.4.1. Contexte de l'étude et travaux antérieurs

Dans le domaine de la durabilité des matériaux, la conservation et la restauration du patrimoine, notamment le patrimoine bâti constitue sans doute un domaine de recherches intensives théoriques, expérimentales et numériques. Dans la région Centre, riche en histoire et traditions, mais aussi en bâtiments historiques, dont les célèbres châteaux de la Loire, la conservation et la restauration des bâtiments historiques a fait objet de nombreuses études

pour comprendre les mécanismes de dégradation, les caractériser et modéliser [MUK 06, BEC 07, ROS 05].

Le projet SACRE (**S**uivi des **A**ltérations, **C**aractérisation et **R**estauration des monuments en pierre calcaire [SAC 12] est né de l'ambition des équipes de recherche y participant à caractériser la dégradation des bâtiments historiques en pierres calcaires, comprendre les mécanismes de cette dégradation et prédire les cinétiques de l'évolution de ces dégradations et donc à aider à prédire les travaux de restauration nécessaires. En plus des observations in situ et la modélisation géométrique du châteaux de Chambord [BRU 09, BAD 11] le projet comprend aussi un volet expérimental et de modélisation dont le but est d'élucider l'impact de l'environnement sur les mécanismes de dégradation du tuffeau blanc qui est la pierre la plus utilisée dans la construction des châteaux de la Loire. La durée de vie de ces monuments englobant celle de plusieurs générations de la vie humaine, les conditions environnementales et climatiques (pollution atmosphériques, modifications anthropiques) durant leur vie sont susceptibles d'évoluer et de se traduire sur une même pierre par une modification de l'altération et des mécanismes d'altération mis en jeu.

Des résultats expérimentaux au laboratoire et les études numériques réalisés entre autre dans le cadre du projet SACRE mettent en évidence le rôle des variations quotidiennes des conditions météorologiques (température, hygrométrie, pluviométrie, etc) dans l'initiation et l'évolution de l'endommagement du tuffeau [BEL 12].

Bien que la pollution atmosphérique soit souvent citée comme étant un facteur initiateur ou aggravant de l'accélération de la dégradation des pierres par l'apparition notamment à leur surface d'une couche noircie riche en gypse, ils n'existent pas de preuves directes ou indirectes que cette pollution soit à l'origine du gypse trouvé dans les observations des dégradations du tuffeau blanc de Chambord.

En fait la cristallisation des sels dans un volume restreint conduit au développement d'une pression de cristallisation susceptible d'engendrer sur les parois du volume une contrainte de traction suffisamment importante pour initier une fissuration ou la faire évoluer [VAN 07]. Les profils DRX sur des fragments de la pierre de tuffeau dégradée montrent une présence significativement plus importante de gypse à la surface (figure 4.17 [BEC 06]). De même des quantités significatives de gypse se trouvent souvent dans les fissures de dégradation à l'abri d'un lessivage par la pluie.

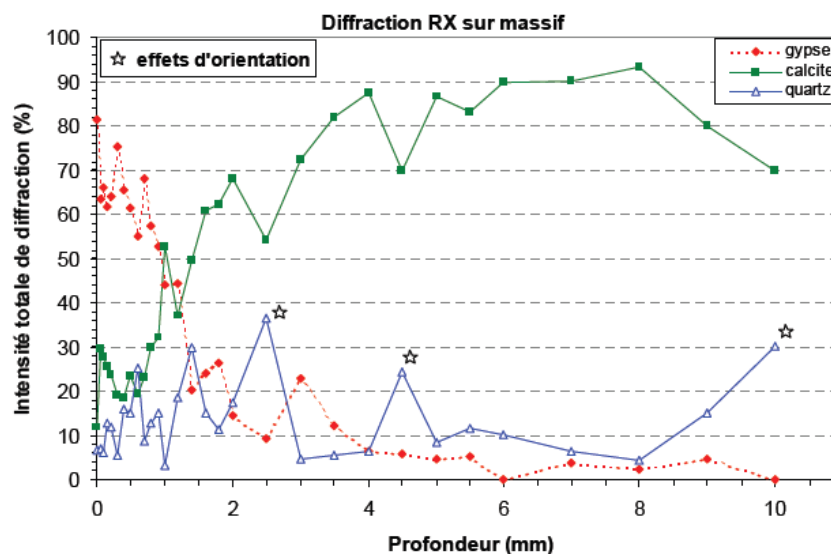


Figure 4.17: Profils de présence des principaux minéraux le long d'un fragment de pierre de tuffeau dégradée à la surface. D'après [BEC 06].

Il n'est cependant pas clair quel est l'origine de ce gypse. Les hypothèses de provenance des ions sulfate soit via l'air pollué (en forme de SO_2 qui se dissout par la suite dans l'eau porale, ou en forme de pluie acide) soit via la dissolution d'une partie des mortiers, sont celles les plus souventes dans la littérature [JEA 92, RAU 01, THO 02, VAN 08].

En fait dans l'air ambiant non pollué, outre que le diazote N_2 et le dioxygène O_2 qui occupent plus de 99% de la fraction molaire on trouve en particulier deux gaz qui peuvent influencer la cinétique et les mécanismes de dégradation des pierres calcaires : le dioxyde de carbone CO_2 (fraction molaire dans l'air 0.033%) et le dioxyde de soufre SO_2 ou anhydride sulfureux (fraction molaire dans l'air $201 \cdot 10^{-9}$) [SUR 00]. La présence de ces deux gaz et celle des oxydes nitrogènes NO_x et leur dissolution dans l'eau de l'atmosphère, est considérée comme étant la cause principale de la pluie acide [SHU 12].

L'objectif des tests numériques réalisés ici est de vérifier les hypothèses de formation, dans un mur de tuffeau, du gypse à partir de la pollution d'air (en forme de concentrations élevées de gaz ou de pluie acide) par un calcul H-C en prenant en compte les variations des conditions hydriques et le cas échéant la modélisation de l'impact mécanique de la précipitation du gypse dans l'espace poral du tuffeau.

Les équations de la géochimie décrivant le processus ainsi que les constantes des équilibres chimiques et de la cinétique de dissolution sont présentés dans l'annexe F à la fin de ce chapitre.

IV.4.2. Géométrie, conditions initiales et aux limites et propriétés considérées dans les simulations

On considère un mur de tuffeau avec surface extérieure en contact avec l'air subissant les variations météorologiques (humidité et pluie dans ce cas) et en contact avec une atmosphère polluée (fortes concentrations de gaz nocifs) ou de pluie acide. En négligeant les variations verticales d'humidité et de concentration le problème peut être simplifié en un problème 1D. La géométrie du problème devient alors celle d'une colonne de tuffeau dans lequel l'eau peut circuler selon l'axe de la colonne. Afin de garder une description fine des phénomènes qui se passent à la surface du mur on se limite aux 10 premiers centimètres du mur à partir de l'extérieur. En fait, les analyses thermo- hydromécaniques antérieures [BEL 12] ont montré que les variations hydriques dans le mur, dues aux variations hydriques dans l'air, restent limitées aux premiers centimètres du mur. Un modèle de 10cm semble donc suffisant pour imposer sur la frontière interne du modèle des conditions hydriques constantes.

Par commodité de calcul, on adoptera en suite cette même géométrie pour la simulation des essais de dissolution des gaz polluants dans un échantillon saturé, un test réalisable au laboratoire.

Le maillage comporte 100 éléments 1D de tailles égales de 1 mm (figure 4.18) allant de la surface extérieure ayant un contact avec l'air ambiant (nœud #1) vers l'intérieur du mur. Le problème étant 1D, l'extension du module dans la direction perpendiculaire à l'axe de la colonne peut être arbitraire et pour le confort des calculs géochimiques on suppose que cette extension est telle que chaque élément ait un volume de 1 litre.

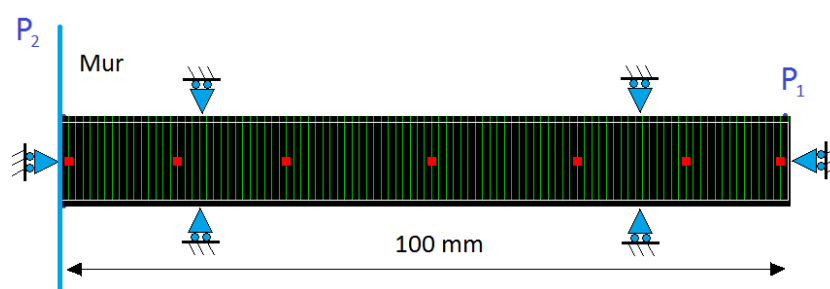


Figure 4.18: Géométrie et conditions aux limites du problème H-C d'interaction du tuffeau blanc avec l'atmosphère polluée.

On réalisera deux simulations : la première reproduit les conditions d'un test de laboratoire où on injecte du gaz SO₂ dans un échantillon saturé, alors que la deuxième simulation coïncide

avec les conditions d'un mur in situ subissant les variations de H_r et la pluie acide. Dans les deux cas les conditions dans une des bases sont maintenues constantes alors que celles de l'autre base imitent les conditions imposées. Les propriétés hydriques de cette pierre étudiée déjà dans le chapitre 2 dans un cadre microscopique, sont par ailleurs connues par des caractérisations macroscopiques au laboratoire [BEC 06]. Le modèle hydrique en non saturé utilisé dans le calcul est celui de van Genuchten–Mualem, et les paramètres du modèle ont été identifiés à partir des résultats expérimentaux (tableau 4.4).

Tableau 4.4: *Propriétés hydriques et mécaniques du tuffeau blanc.*

Propriétés	Unité	
$\theta_{saturée}$		0.49
$\theta_{résidue}$		0
α		9
n		1.506
K_{sat}	m/s	1.00E-06
Tortuosité I		0.5
R_c saturée	MPa	4.83
R_c sec	MPa	11.67
R_t saturée	Mpa	0.38
R_t sec	MPa	1.3
E saturé	MPa	988
E sec	MPa	2037

A l'état sain, le tuffeau contient les principales phases cristallines telles la calcite, le quartz et des autres phases cristallines comme l'opale cristobalite-trydimite (CT), des phyllosilicates comme des micas (biotite, muscovite) et des minérales argileux (illite, glauconite) [BEC 06]. Dans ce travail, on ne tient compte que les phases cristallines principales qui sont la calcite et le quartz. La composition relative des phases cristallines est d'environ 90% de calcite et 10% de quartz. Par rapport à la composition réelle, ce fait simplifie le calcul, la vitesse des réactions peut être légèrement plus rapide mais cela ne change pas le résultat final de la précipitation du gypse.

IV.4.3. Simulation d'un essai de dissolution des gaz polluants dans un échantillon saturé de tuffeau blanc

IV.4.3.1. Conditions du test et contrôle numérique de la simulation

A l'état initial l'échantillon est supposé complètement saturé en eau pure et au cours de la simulation un gradient de pression constant est maintenu en imposant sur une des bases de l'échantillon une charge hydraulique de $5 \cdot 10^{-3} \text{ MPa}$ et sur l'autre extrémité une charge hydraulique nulle. Pour les propriétés considérées ici cela donne une vitesse effective de circulation d'eau égale à $5 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$.

La base supérieure de l'échantillon, équivalente à la surface extérieure d'un mur est maintenue en contact avec l'air ambiant dans lequel la pression partielle du dioxyde de carbone CO_2 , de l'oxygène O_2 et du dioxyde de soufre SO_2 sont respectivement $10^{-3.5}$, $10^{-0.68}$ et $10^{-6.69}$ atm. Les concentrations des gaz correspondantes aux pressions partielles indiquées étant initialement supérieures aux concentrations de ces espèces dans l'eau porale, selon la loi de Henry, une dissolution de ces phases dans l'eau porale a lieu à la surface de l'échantillon. Le calcul est effectué jusqu'à 100 jours. Le pas de temps initial est de 10^{-5} jours, le pas de temps peut varier entre 10^{-5} et $1.5 \cdot 10^{-1}$ secondes. Le facteur de multiplication du pas de temps est entre 0.7 et 1.3.

Le nombre maximal d'itération est de 20. La tolérance de teneur en eau est à 0.001 et la tolérance de pression est de 0.01.

IV.4.3.2. Résultats et discussion

L'évolution de l'état hydro-chimique est suivie aux 5 nœuds (#2, #15, #50, #70 et #100) qui coïncident aux profondeurs (mesurées de la surface externe du mur) de 0.2cm, 1.5 cm, 5cm, 7cm et 10cm.

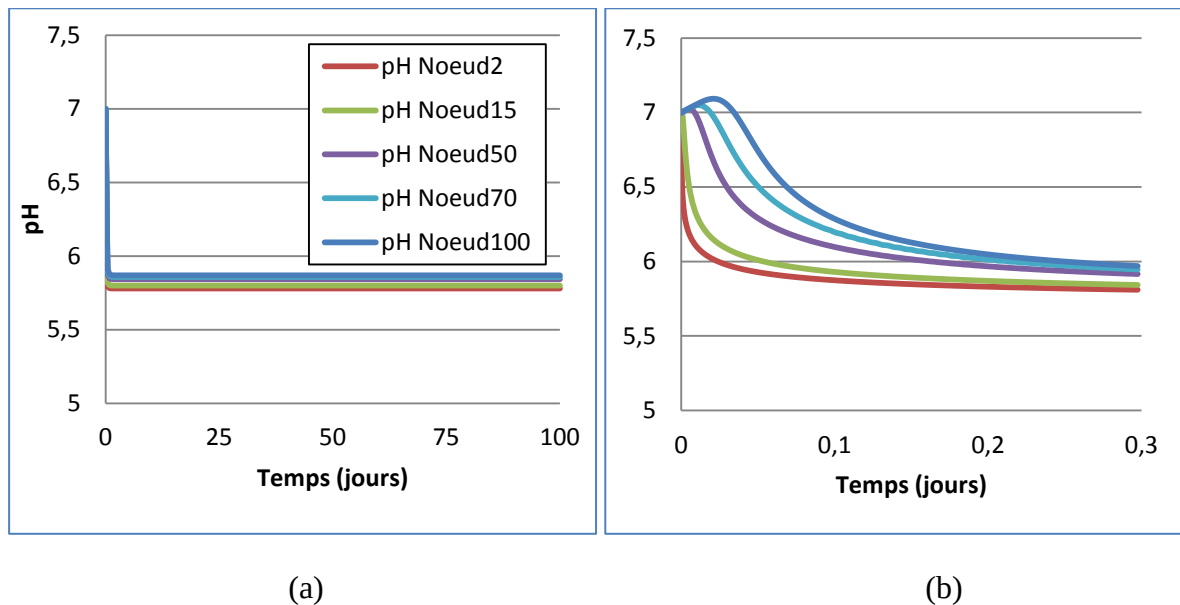


Figure 4.19: a) Evolution de pH aux nœuds d'observation ; b) Zoom de l'évolution de pH aux nœuds d'observation.

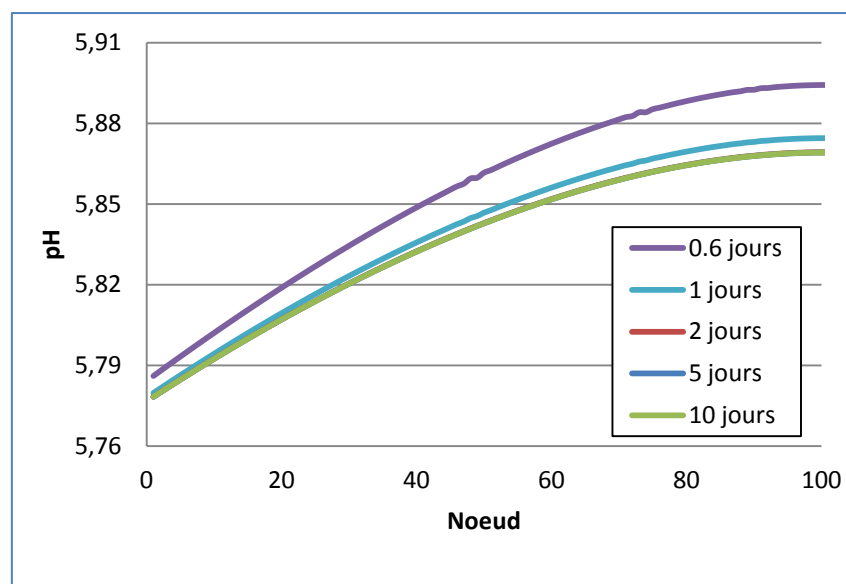


Figure 4.20: Profile du pH à différents instants de calcul.

Les courbes de l'évolution du pH dans la solution porale aux nœuds d'observation (figure 4.19) et les profiles de pH à différents instants montrent une acidification (résultats attendu) de l'eau porale due à la dissolution exclusive des gaz à la surface de l'échantillon et leur transport vers l'intérieur. De ce fait, l'acidification est plus rapide et plus intense à la surface et démarre plus rapidement. Globalement on remarque une acidification assez rapide si bien qu'au bout de 0.3 jours le pH devient inférieur à 6 dans tout l'échantillon. Notons que dans les premiers instants, seule une petite quantité des solutés est transportée à la profondeur de

l'échantillon si bien que la dissolution de la calcite à la paroi conduit à une (légère) augmentation du pH par rapport à l'état initial. Les figures 4.21-4.28 présentent la concentration totale de Ca^{+2} , C^{+4} , S^{+6} et Si^{+4} dans les nœuds en fonction du temps. La concentration de Ca^{+2} dans la solution vient de la dissolution de la calcite et on constate qu'on arrive assez rapidement à un état d'équilibre caractérisé par une solution plus riche de Ca^{++} dans l'eau porale vers l'intérieur du mur, la raison en est, que aux nœuds internes on a l'accumulation de la calcite dissolue sur place en plus de celle transportée par advection. Cette explication restera, dans nos conditions, valable pour tous les ions issus de la dissolution des minéraux primaires (calcite et quartz).

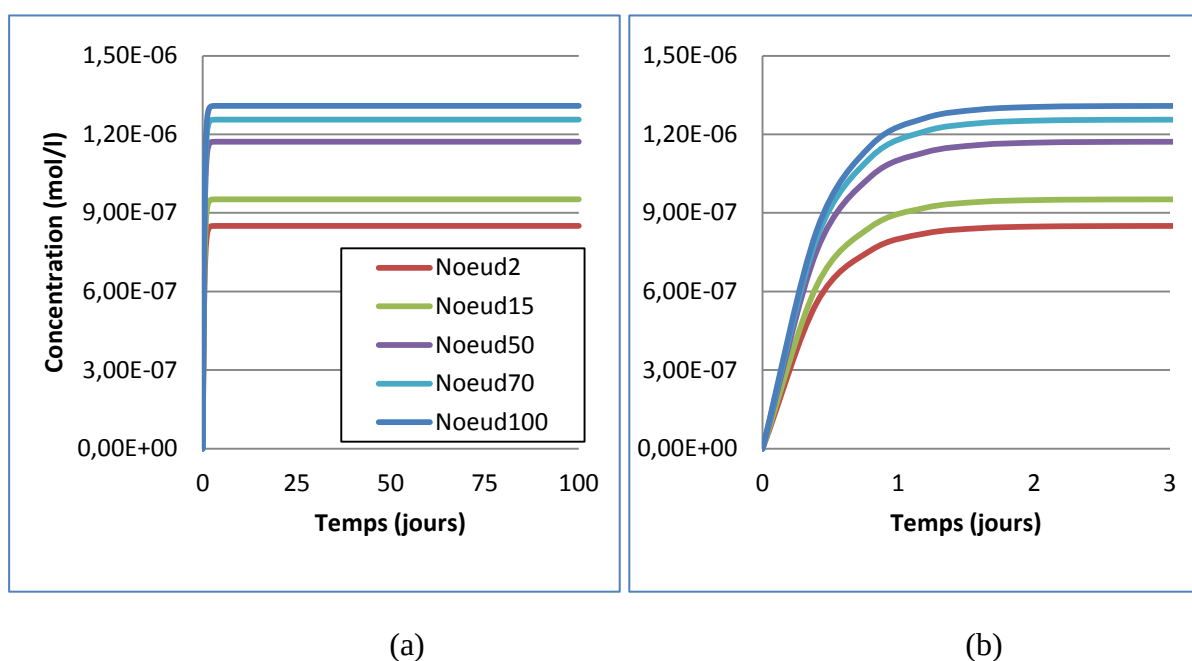


Figure 4.21: L'évolution de la concentration de Ca^{+2} (figure 4.21a) aux nœuds observés et son extrait pour 3 jours (figure 4.21b).

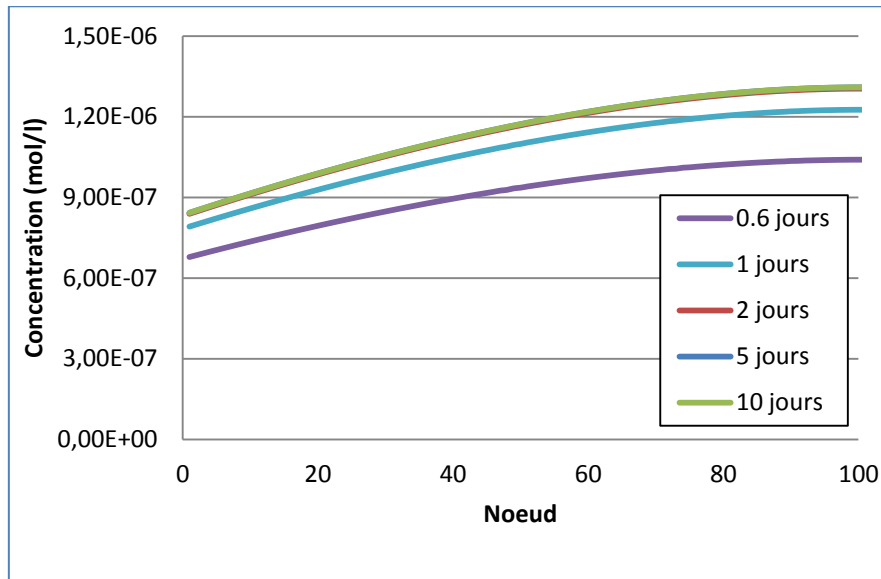


Figure 4.22: La concentration de Ca^{+2} de tous les nœuds de l'échantillon à temps différents.

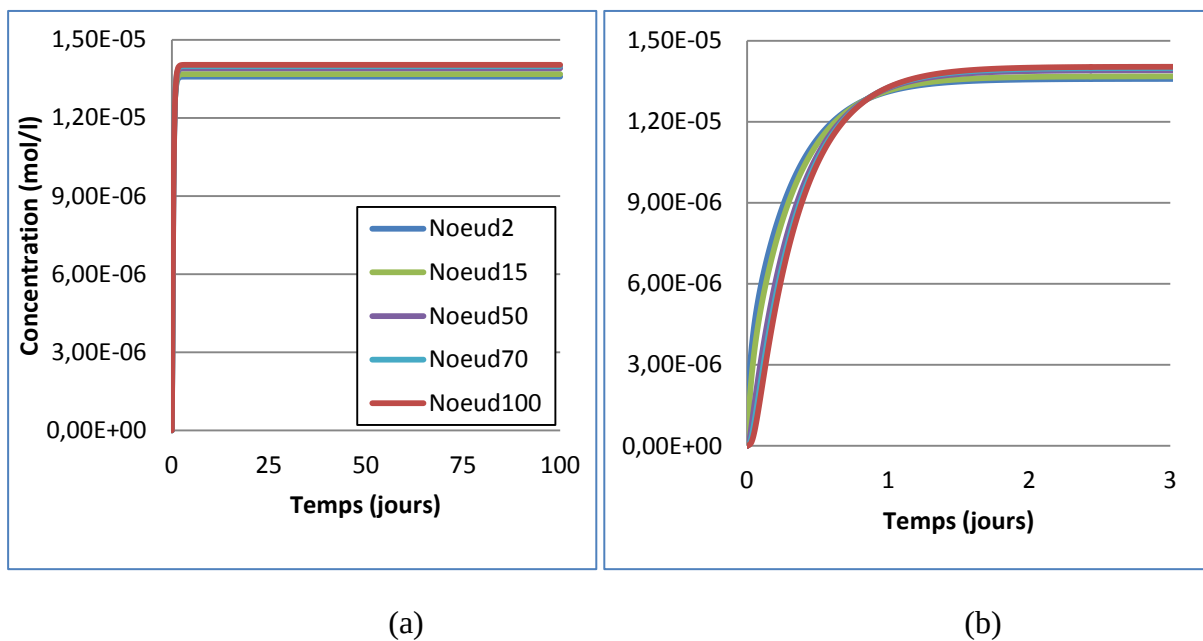


Figure 4.23: L'évolution de la concentration de C^{+4} (figure 4.23a) aux nœuds observés et son extrait (figure 4.23b).

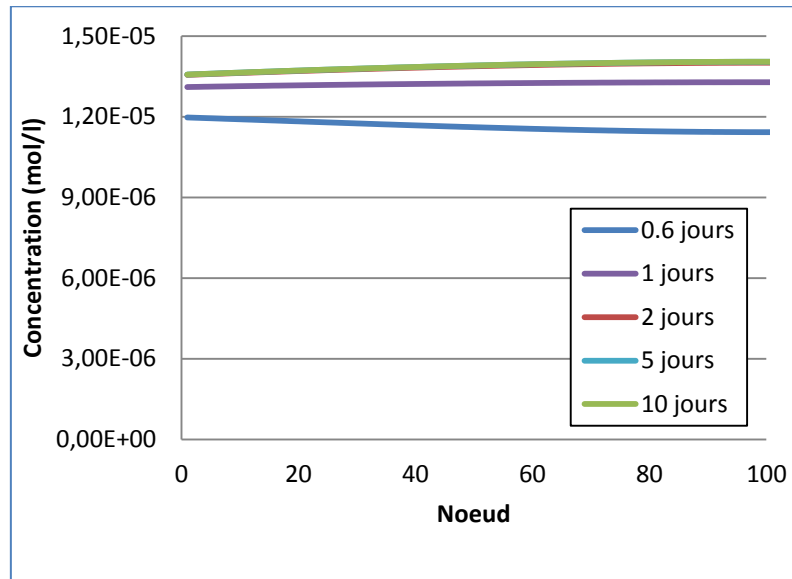
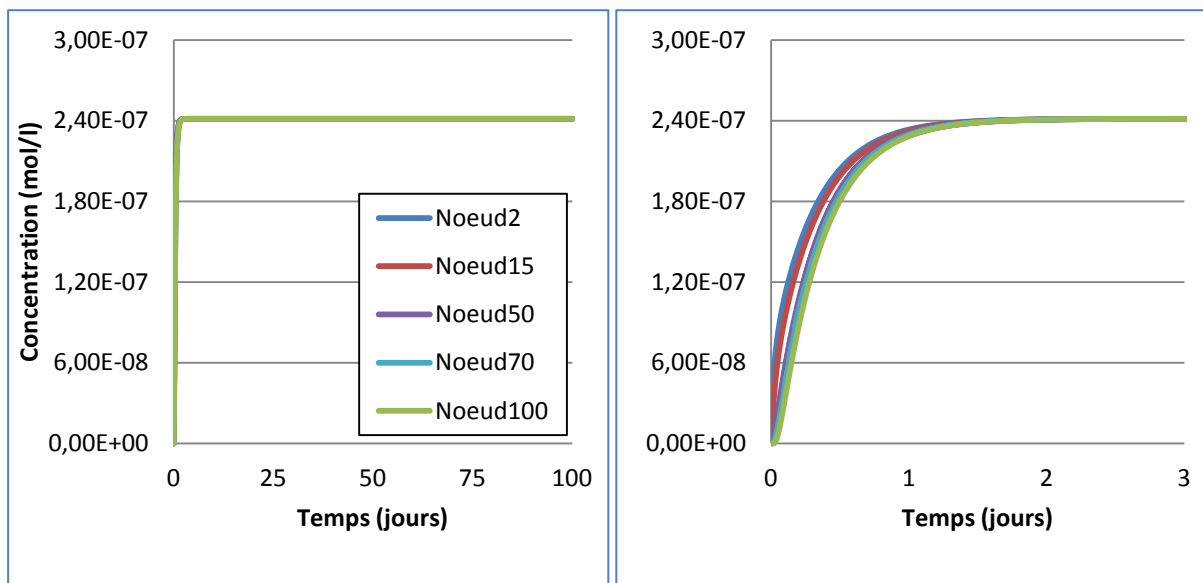


Figure 4.24: La concentration de C^{+4} de tous les nœuds de l'échantillon à temps différents.

Le cas de la concentration de C^{+4} est assez similaire au cas de Ca^{+2} où les nœuds plus profonds ont une concentration plus élevée ce qui est expliqué par l'accumulation des produits de dissolution de la calcite (figure 4.23 et 4.24).



(a)

(b)

Figure 4.25: L'évolution de la concentration de S^{+6} (figure 4.25a) aux nœuds observés et son extrait (figure 4.25b).

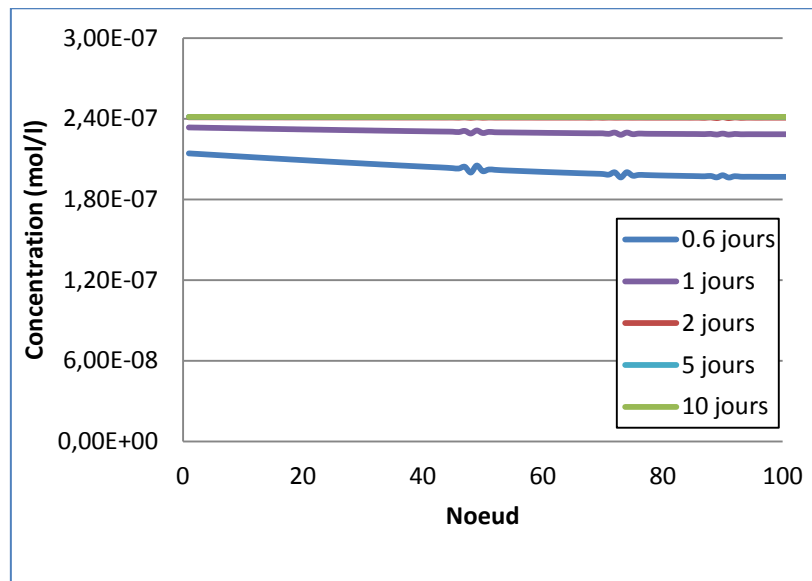


Figure 4.26: La concentration de S^{+6} de tous les nœuds de l'échantillon à temps différents.

On n'observe pas de réactions demandant la consommation du soluté S^{+6} , il est simplement transporté de la surface (ou il est créé suite à la dissolution du dioxyde de soufre) vers la profondeur. A l'état transitoire, nous observons que la concentration des solutés qui existent dans la solution infiltrée (C^{+2} et S^{+6}) est plus élevée dans la solution des nœuds superficiels (figure 4.24 et 4.26). Les figures 4.25 a et b montre que la concentration de S^{+6} est stable dans tout l'échantillon à l'état permanent.

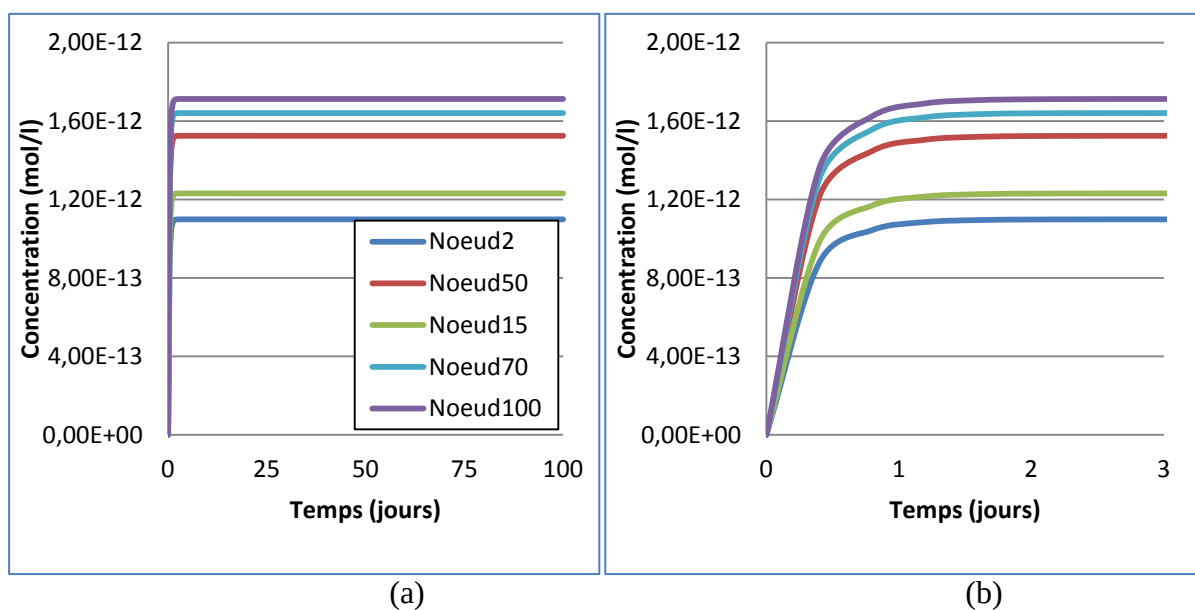


Figure 4.27: L'évolution de la concentration de Si^{+4} (figure 4.27a) aux nœuds observés et son extrait (figure 4.27b).

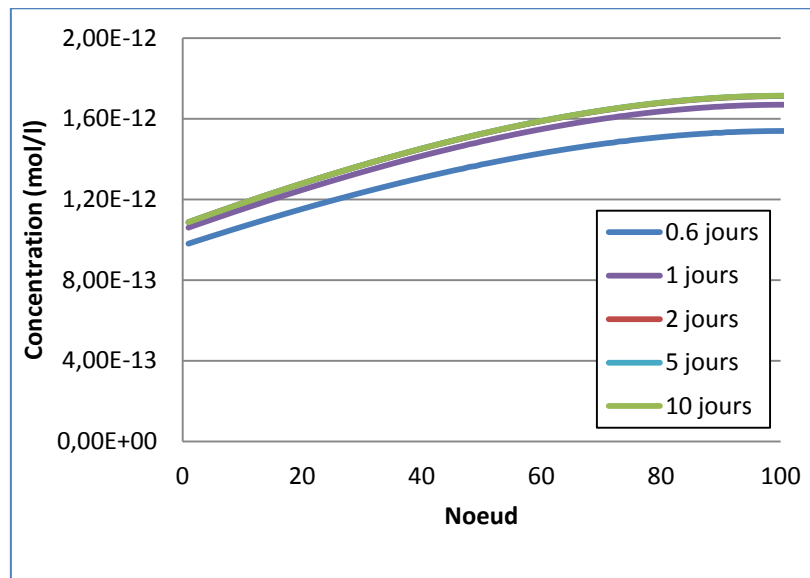


Figure 4.28: La concentration de Si^{+4} de tous les nœuds de l'échantillon à temps différents.

La concentration de Si^{+4} est la conséquence de la dissolution du quartz et l'évolution des concentrations aux nœuds ainsi que les profiles de ces concentrations présentent les caractéristiques des ions dissouts à savoir une concentration plus importante aux nœuds internes qu'à la surface (figure 4.27). La vitesse de dissolution de quartz dépend de l'activité de OH^- [DIE 05] et de sa surface spécifique.

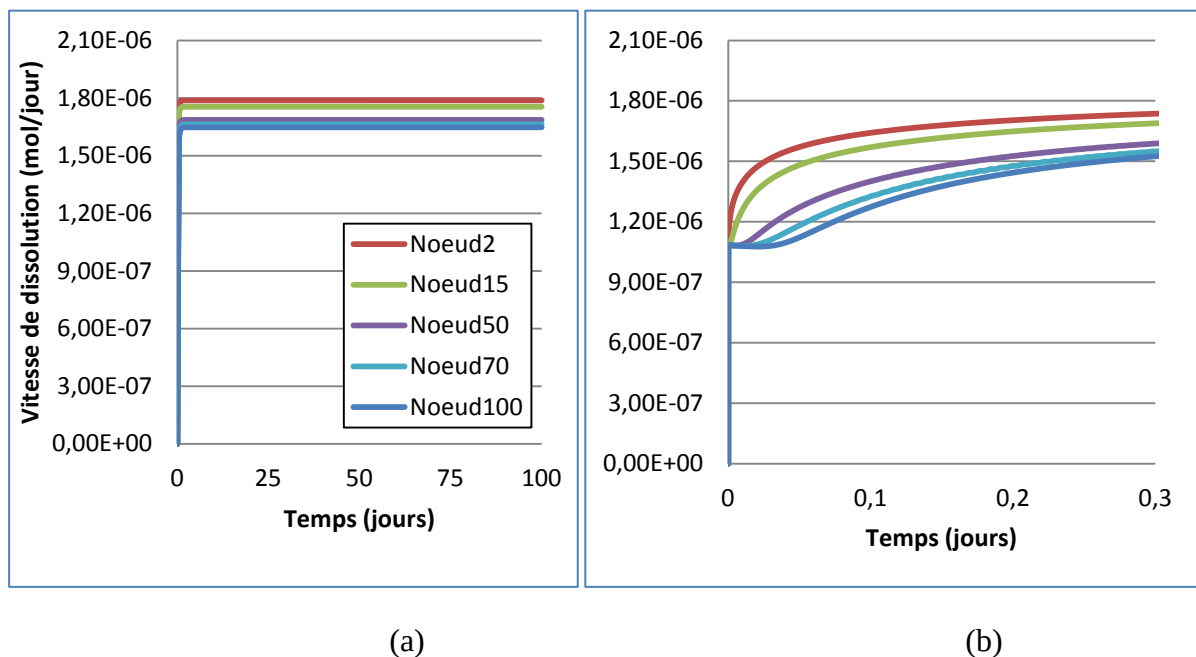


Figure 4.29: L'évolution de la cinétique de la calcite (figure 4.29a) aux nœuds observés et son extrait (figure 4.29b).

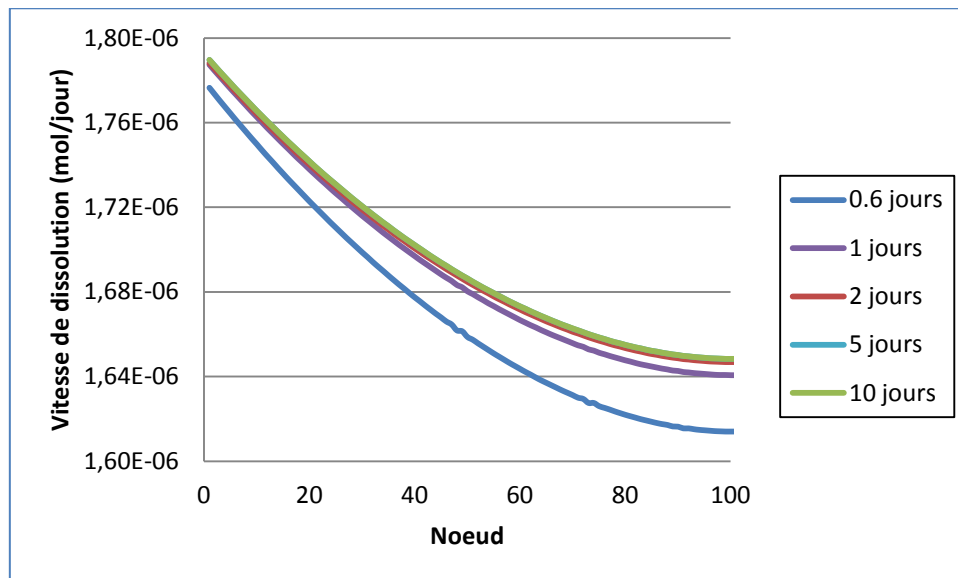


Figure 4.30: La cinétique de dissolution de la calcite de tous les nœuds de l'échantillon à temps différents.

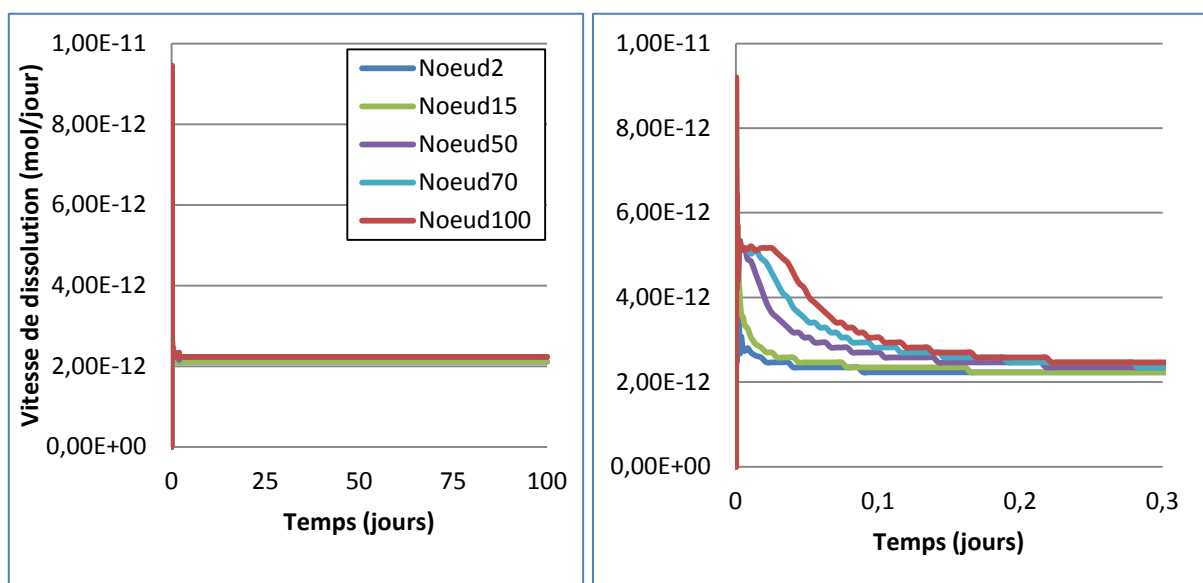


Figure 4.31: a. L'évolution de la cinétique de dissolution du quartz en fonction du temps aux nœuds d'observation b) un zoom de la figure 4.31.a.

Comme la solution aux nœuds superficiels est plus acide (figure 4.29 et 4.30), la vitesse de dissolution de la calcite est plus élevée à ces nœuds. Au contraire de la calcite, le quartz se dissout plus vite dans la solution plus alcaline (figure 4.31)).

IV.4.3.3 Conclusions

La simulation de l'essai de dissolution de gaz polluants dans un échantillon saturé de tuffeau, permet de saisir les principaux mécanismes liés à la dissolution et le transport de ces gaz dans l'eau porale du tuffeau. Les conséquences de l'introduction de ces gaz dans l'eau porale est une dissolution accélérée de la calcite et un transport de celle-ci vers l'intérieure de l'échantillon augmentant ainsi la concentration de Ca^{++} en profondeur. On remarque bien la présence des ions sulfates dans la solution, avec une concentration plus importante à la surface qu'en profondeur, mais bien évidemment dans les conditions saturées de ce test la concentration de ces ions reste très faible et on ne peut pas observer la précipitation du gypse.

En revanche ces résultats rendent inutile le prolongement de ces simulations avec un calcul HM.

IV.4.4 Modélisation H-C d'un mur de tuffeau soumis à une pluie acide.

IV.4.4.1. Conditions de la simulation

Afin de tenir compte des variations hydriques qu'un mur d'un bâtiment historique subit et afin de se mettre dans les conditions favorables pour former le gypse, on opte pour un scénario fictif de cycles de pluie-évaporation où après un épisode pluvial de durée d'un jour suit une période d'évaporation de 10 jours. Le mur au début de la simulation est supposé partiellement saturé et une succion uniforme de 1MPa (pression d'eau de égale à -1 MPa) règne dans tous l'échantillon. Cette condition est en suite maintenue sur la frontière interne du mur.

Dans le cas des jours de pluie, la première cellule est en contact avec la pluie acide (les jours de pluie sont 1, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90 et 100) dont la composition est donnée dans le tableau 4.5 [PHREEQC]:

Tableau 4.5 : *Caractéristiques de la pluie*

Elément	Eau de pluie	Unité
pH	4.23	
Ca	9.60E-06	mol/l
Mg	1.79E-06	mol/l
Na	6.13E-06	mol/l
K	9.23E-07	mol/l
Cl	6.65E-06	mol/l
C(4)	Equilibre phase de CO ₂	
S(6)	4.05E-05	mol/l
N(-3)	1.49E-05	mol/l
N(5)	1.69E-05	mol/l

Dans les jours sans pluie, la surface extérieure de la première cellule est en contact avec l'air ambiant contenant du dioxyde de carbone CO_2 et du dioxyde de soufre SO_2 dans les mêmes conditions que dans le calcul précédent. On utilise la même géométrie et les mêmes conditions de contrôle numérique de la convergence que dans le calcul précédent.

IV.4.4.2. Résultats et discussion

Sur la figure 4.32 sont présentées les évolutions du pH aux nœuds d'observations qui sont les nœuds 2, 6, 13, 20, 30, 48, 71, 86, 98 (correspondants à des profondeurs mesurées de la surface du mur de 0.2cm, 0.6cm, 1.3cm, 2cm, 3cm, 4.8cm, 7.1cm, 8.6cm et 9.8cm respectivement). On observe une variation cyclique du pH calculée sur la variation des conditions hydriques à la surface, avec une diminution du pH aux jours de pluie (la pluie acide dans les conditions présentées dans le tableau 4.5a un pH de 4.23). L'amplitude de ces variations de pH diminue avec le nombre des cycles et sans surprise on trouve que le nœud à la surface a un pH toujours le plus faible.

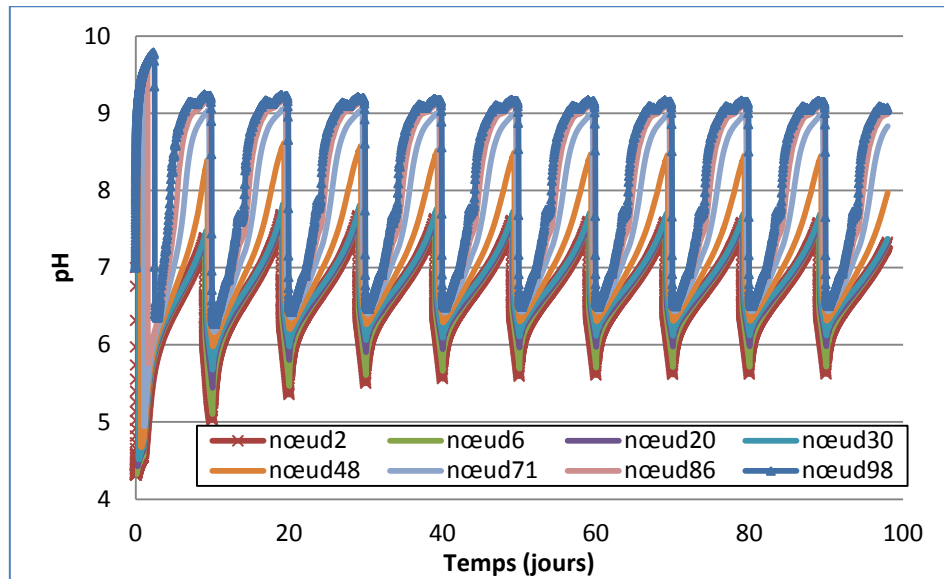


Figure 4.32: L'évolution de pH dans les nœuds.

Les cycles de pluie-évaporation provoquent la variation de la teneur en eau de l'échantillon (figure 4.33). La teneur en eau augmente tous les 10 jours (le jour de pluie),

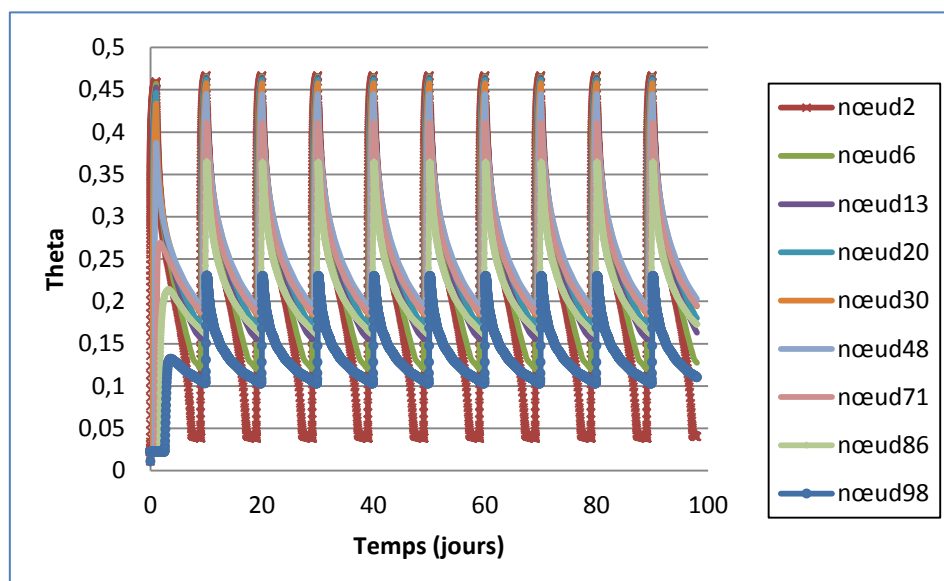


Figure 4.33: La variation de la teneur en eau aux nœuds d'observation.

Sur les figures 4.34 et 4.35 nous présentons la cinétique de dissolution de calcite et du quartz en fonction du temps aux points d'observations. Outre qu'une intensité de dissolution qui diminue avec le temps et le nombre de cycles, on retrouve les tendances opposées d'évolution des vitesses de dissolution de la calcite et du quartz aux jours de pluie.

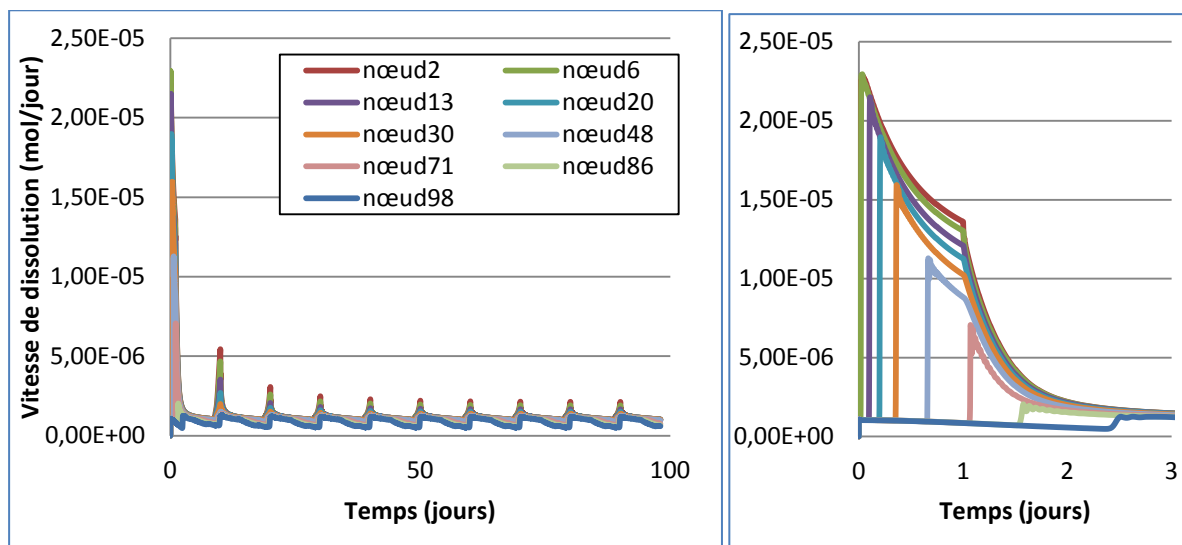


Figure 4.34: La cinétique de dissolution de calcite aux nœuds d'observation.

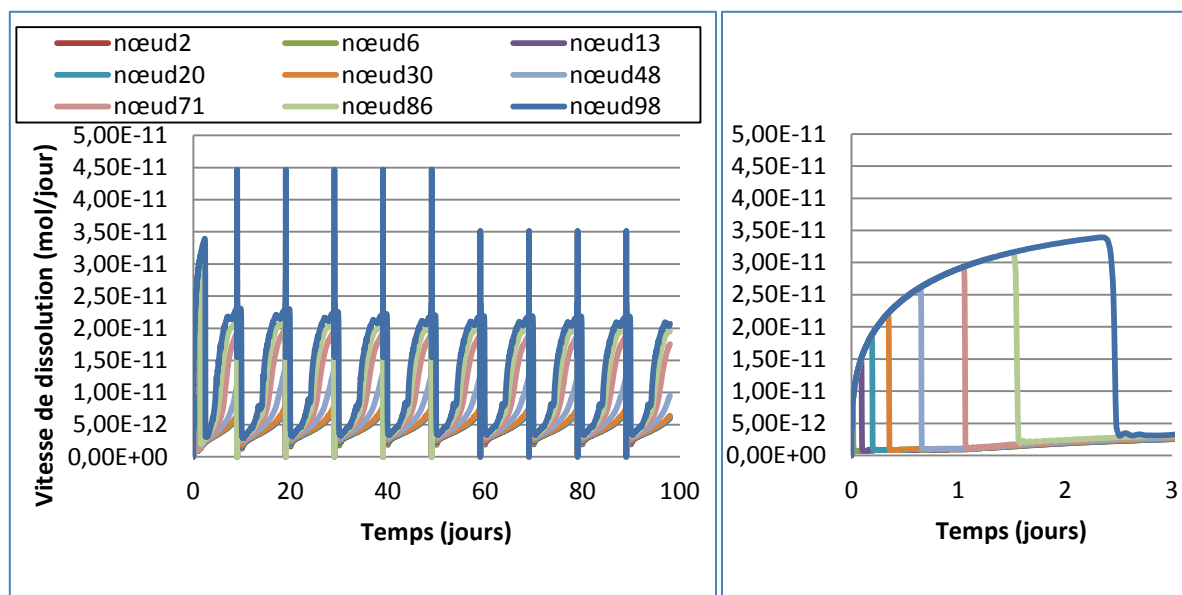


Figure 4.35: La cinétique de dissolution de quartz dans les nœuds.

La dissolution de calcite existe dans tout l'échantillon et cette dissolution est plus forte dans les jours de pluie. Dans les premiers épisodes pluviaux la vitesse de la dissolution est plus importante car la saturation en calcite dissoute dans l'eau porale est à ces moments la plus faible. A l'inverse, la vitesse de dissolution de quartz diminue aux jours de pluie car la pluie acide diminue le pH aussi en défavorisant la dissolution du quartz.

La concentration des solutés fluctue aussi au cours des cycles pluie-évaporation. On obtient les pics des concentrations à la fin de la période d'évaporation (avec des amplitudes plus fortes pour les nœuds superficiels (nœud #6 dans les graphiques présentés). Si l'on observe

bien une présence significative du soluté S^{+6} (indiquant donc la présence des ions SO_4^{-2}) la concentration reste relativement faible.

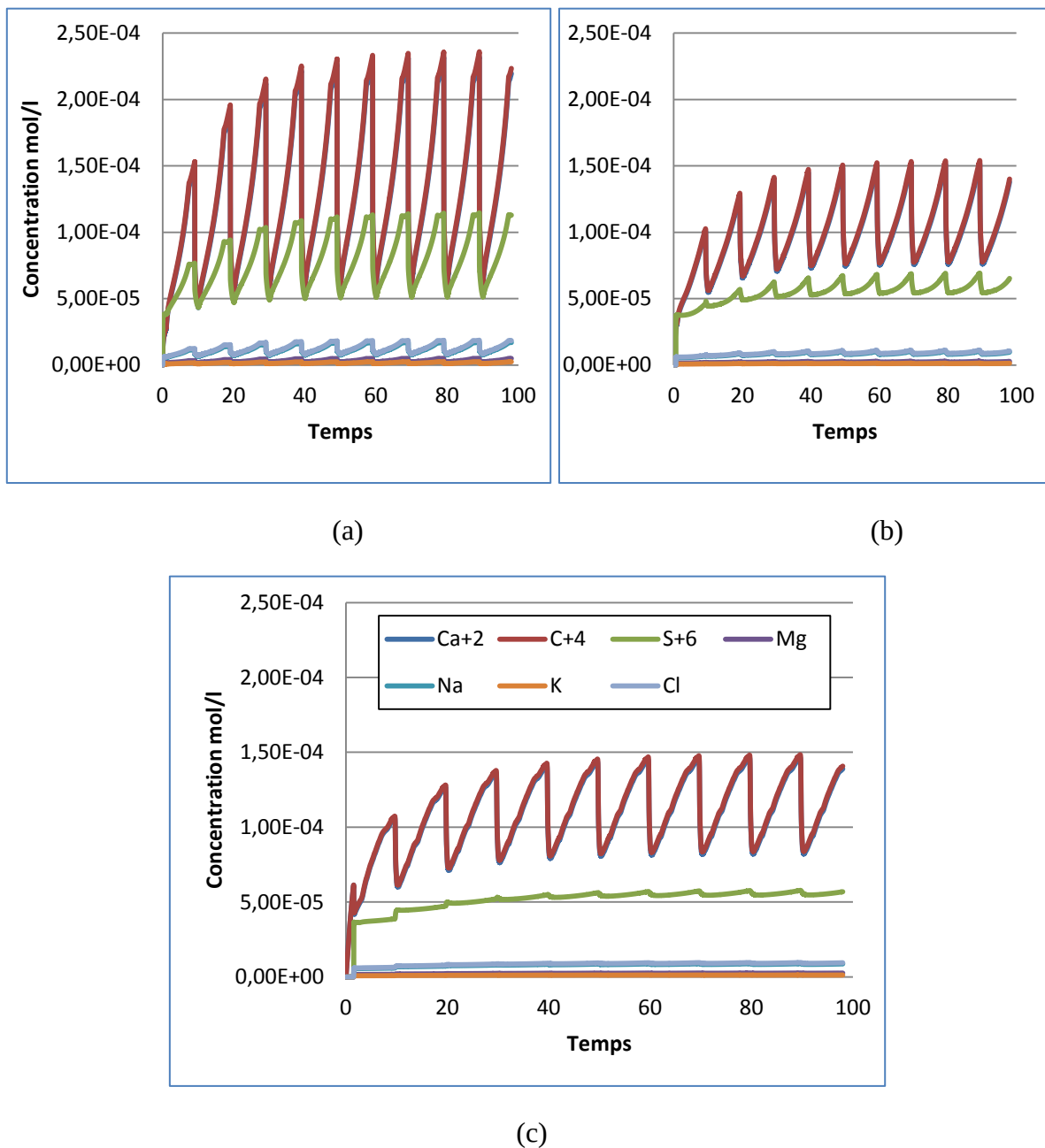


Figure 4.36: La concentration des solutés dans les nœuds 6(a), 48(b) et 86(c).

On remarque qu'aux nœuds 48 et 86, la concentration S^{+6} est sensiblement la même indiquant donc que l'augmentation de la concentration de cette soluté est limitée aux quelques centimètres de la surface (au-delà de 4.8cm cette concentration est donc constante).

Les profiles de la teneur en eau sont fonctions (à ne pas en douter) de l'état hydrique à la surface. Pour illustrer cette évolution on présente sur la figure 4.37 les profiles de la teneur en eau avant, pendant et après un épisode pluvial. Pendant la phase d'évaporation la teneur en eau diminue progressivement de la surface vers la profondeur. Dans les conditions de simulations le cœur du mur est celui qui reste le plus humide à la fin de la période d'évaporation. Pendant la pluie le front de saturation se propage de la surface vers la profondeur mais reste limitée dans les 4 à 5 premiers centimètres du mur.

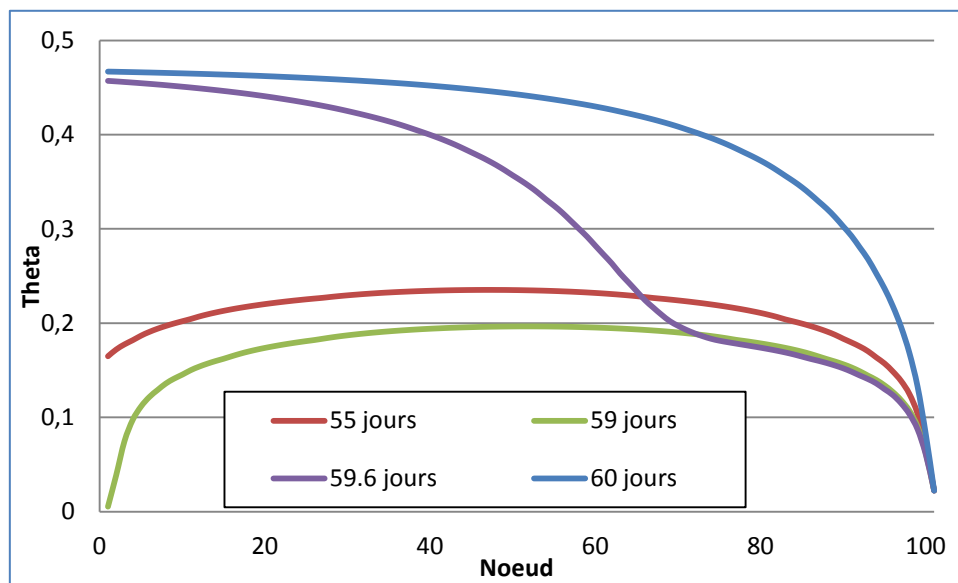


Figure 4.37: L'évolution de la teneur en eau dans l'échantillon à des moments successifs de calculs avant, pendant et après une pluie.

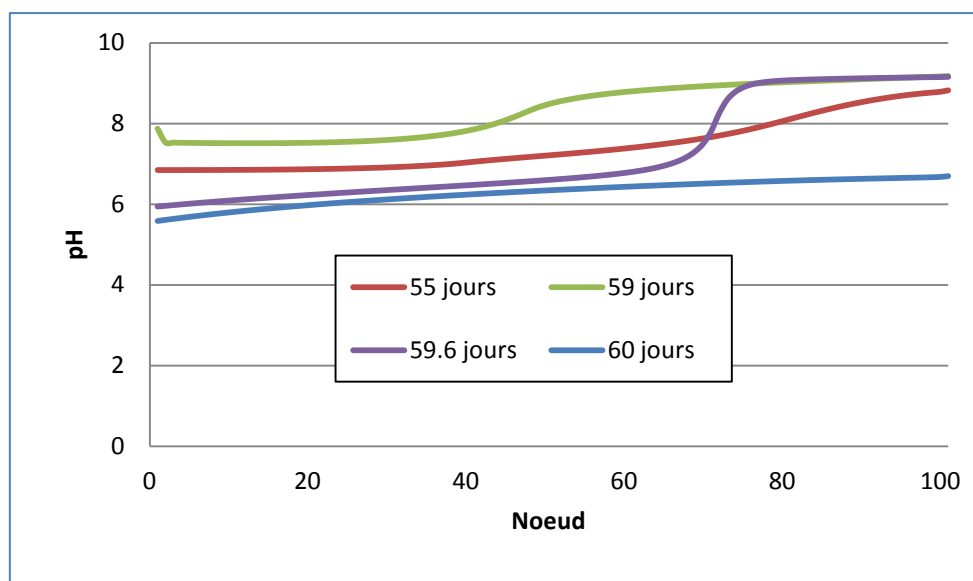


Figure 4.38: L'évolution de pH dans l'échantillon à des moments successifs de calculs avant, pendant et après une pluie.

Les profiles de pH et des vitesses de dissolution se déterminent en grosse partie par les profiles de la teneur en eau (fig. 4.38 et 4.39). Remarquons la confirmation des tendances opposées de l'évolution des cinétiques de dissolution de la calcite et du quartz.

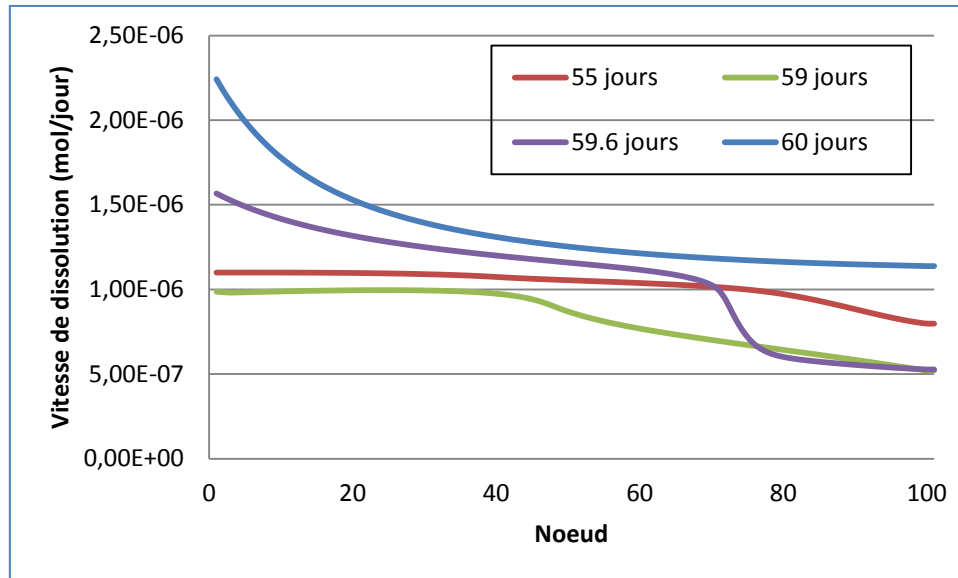


Figure 4.39: La vitesse de dissolution de la calcite dans l'échantillon

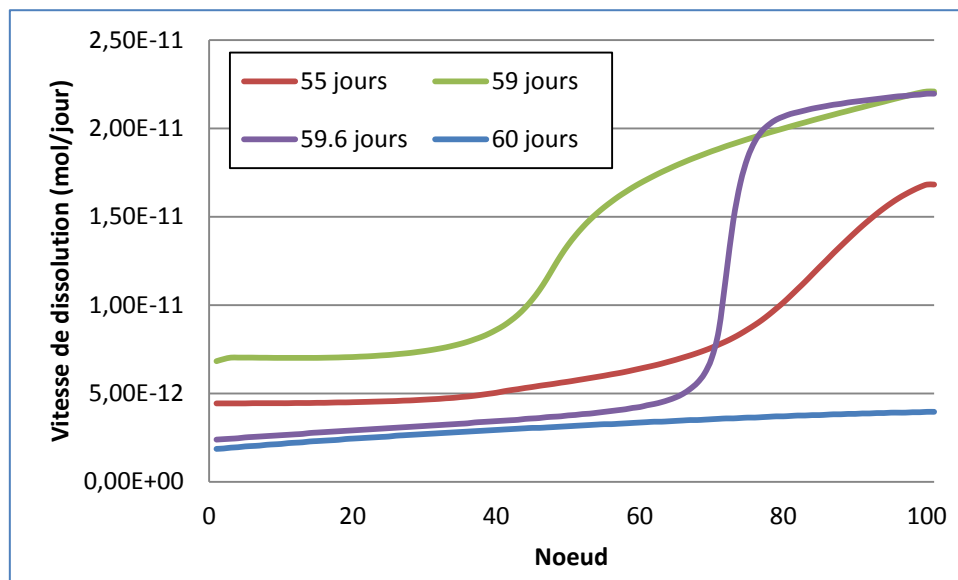


Figure 4.40: La vitesse de dissolution du quartz dans l'échantillon

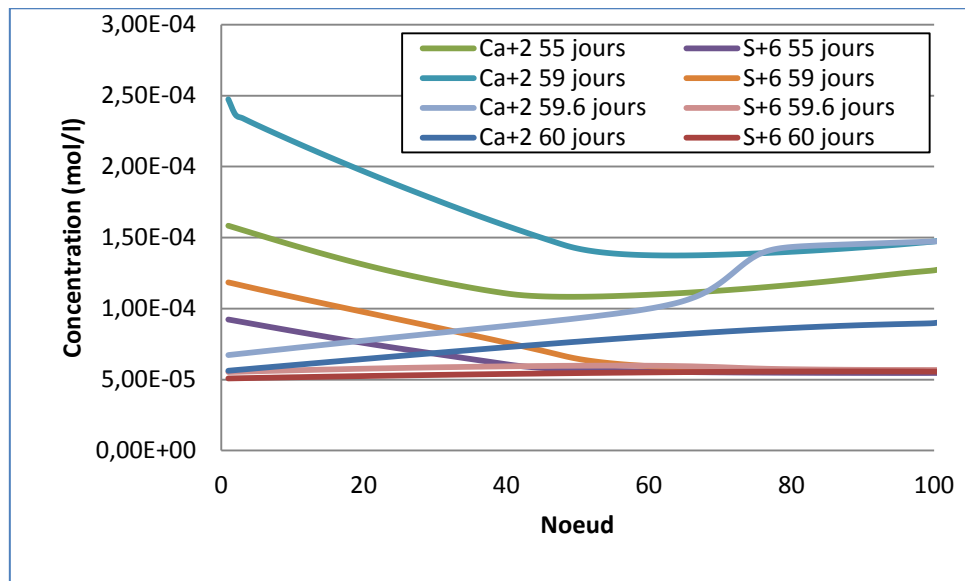


Figure 4.41: La concentration de Ca^{+2} et S^{+6} dans l'échantillon

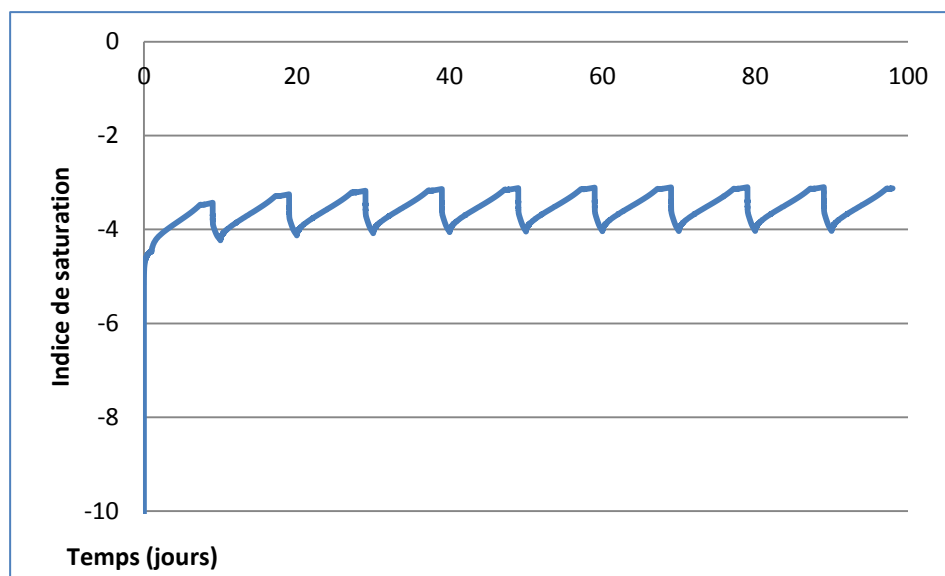


Figure 4.42: L'index de saturation du gypse au nœud 2.

La figure 4.39 présente l'indice de saturation de gypse (Annexe C). Dans nos simulations cet indice reste suffisamment négatif même à 2 mm de la surface ce qui signifie que la concentration du gypse dans la solution, même lorsque la surface est pratiquement sèche, reste faible et sa précipitation dans l'espace poral n'intervient pas.

Les tentatives d'aller plus loin dans le séchage (de façon à ce qu'on puisse obtenir une solution super saturée à la surface) conduisent à une divergence des calculs car on arrive aux

limites de la saturation (saturation quasiment nulle) où la courbe de saturation est la perméabilité relative sont mal définies.

IV.4.4.3. Conclusions

Les conditions hydro-chimiques simulées dans ce calcul bien que fictives sont censées conduire à la formation du gypse et sa précipitation dans l'espace poreux du tuffeau. Pour cela on a considéré une pluie acide périodique avec forte contenu en ions sulfates. La dissolution de calcite et du quartz a bien lieu au cours de la pluie et en période d'évaporation (avec des cinétiques différentes). Les solutés S+6 sont présents aussi dans les solutions porales, avec une plus forte concentration dans les premiers centimètres (à partir de la surface extérieure) du mur. L'indice de saturation en gypse de la solution porale augmente à la fin des périodes d'évaporation, mais il reste négatif et la précipitation du gypse dans l'espace poreux du tuffeau n'est pas observée faute d'une concentration insuffisante du gypse.

On peut se demander si un scénario plus réaliste en termes de conditions hydriques pourrait changer significativement ces résultats. Si en réalité des séchages plus intenses peuvent avoir lieu, les pluies acides de l'intensité proposée ici sont peu probables d'avoir lieu. Les résultats obtenus ici pourraient alors indiquer que le mécanisme de formation du gypse dans le tuffeau par la voie des pollutions aérienne (sous forme de concentration élevée de SO₂ ou d'une pluie acide) est peu probable. Notons que dans notre étude les variations de la température ont été écartées comme non-significatives dans les réactions et la dissolution. L'impact d'une telle hypothèse sur les résultats obtenus est difficilement estimable à l'heure actuelle.

Sans écarter définitivement une étude plus fine de cette possibilité, d'autres pistes de l'arrivée des sulfates dans les solutions porales sont à étudier.

IV.5. Conclusions

On a présenté dans ce chapitre un cadre macroscopique de modélisation du comportement hydro-mécano-chimique des matériaux poreux. L'idée de base de ce cadre de modélisation est le couplage des phénomènes multiphysiques par des passerelles de communications.

Outre que la facilité pratique de traiter les problèmes multiphysiques de façon découplée, cette approche de couplage par des passerelles de communications entre les différents codes offre souvent des avantages de stabilité numérique de la solution.

Nous avons proposé le couplage d'un code hydro-chimique (HP1) capable de résoudre le problème hydro-chimique, avec un code mécanique aux éléments finis, où différents modèles de comportement mécanique paramétré par des champs de concentration peuvent être greffés.

Par deux applications dans deux contextes différents nous avons montré l'efficacité d'une telle approche.

Dans le cas de l'infiltration de la bentonite par une solution alcaline on a pu modéliser d'une part la dissolution des minéraux primaires et la formation des néo-minéraux et d'autre part l'impact du changement de la composition ionique de l'eau porale et de la minéralogie sur le potentiel de gonflement des argiles gonflantes. Pour cela, un modèle de comportement mécanique pour les argiles gonflantes a été étendu pour prendre en compte le couplage avec la chimie.

Dans la seconde application concernant les interactions hydro-chimiques de l'environnement avec la pierre de tuffeau, les différentes simulations ont eu pour but de vérifier les hypothèses de formation du gypse par une voie aérienne et éventuellement de modéliser l'impact mécanique de cette formation sur le tuffeau. Les résultats des calculs H-C montrent que dans les conditions considérées ici bien que les solutés S+6 sont présents aux premiers centimètres d'un mur de tuffeau soumis aux concentrations de SO₂ et/ou à la pluie acide, leur concentration est faible et ne conduit pas à la précipitation du gypse lors de l'évaporation de l'eau. Cependant à cause des différentes approximations faites en cours des calculs notamment en termes de conditions hydriques réelles, de la durée du test et de la négligence des variations de la température, ces résultats ne permettent pas de définitivement écarter l'hypothèse de création du gypse par voie aérienne bien qu'ils suggèrent que d'autres pistes doivent être explorées en parallèle.

Annexes du chapitre IV

Annexe D. Equilibre et solubilité des minéraux

Une réaction chimique peut s'écrire sous la forme de l'équation suivante :



Où v_i , v_j représentent les coefficients stœchiométriques des réactifs A_i et A_j . Un déplacement de l'équilibre chimique se traduit par la variation du nombre de moles dn_i , dn_j de réactifs A_i et produit A_j .

La variation quantitative dn_i , dn_j dépend des coefficients stœchiométriques de la réaction :

$$\frac{-dn_i}{dn_j} = \frac{v_i}{v_j} \text{ ou } \frac{-dn_i}{v_i} = \frac{dn_j}{v_j} \quad (D.2)$$

La fraction $dN = \frac{-dn_i}{v_i}$ est l'avancement de réaction $d\xi$. $d\xi$ est positif si le sens de réaction consomme des réactifs et forme des produits.

Il existe des espèces chimiques peu ou pas solubles, qui sont probablement des produits des réactions formant des hydroxydes métalliques non chargées, des carbonates, sulfures, sulfates, chlorures... Ces espèces peuvent également résider dans les minéraux ou sont des produits des réactions d'altération des minéraux.

En principe, les métaux en solution ne sont jamais libres, mais au moins complexés par des molécules d'eau dans des complexes « aquo ». Dans le but de simplifier l'écriture, ces complexes sont souvent écrits en omettant des molécules d'eau, soit Cu^{2+} au lieu de $Cu(H_2O)_4^{2+}$.

La description de l'équilibre en solution est régie par la loi d'action de masse. Pour le cas général de réaction :



La réaction évolue jusqu'à l'état d'équilibre, c.-à-d. l'état où la fraction du produit des activités des espèces formées avec le produit des activités des espèces réactifs reste constante. Chaque réaction possède une telle constante appelée « constante d'équilibre » ou « produit de solubilité » :

$$K = \frac{\prod[A_j]^{v_j}}{\prod[A_i]^{v_i}} = \text{const} \quad (\text{D.4})$$

Où le crochet veut dire l'activité de l'espèce. L'activité d'une phase pure est l'unité, par définition, puisque sa fraction molaire est elle-même de 1 tout comme le coefficient d'activité.

Une fois nous avons l'activité des espèces dans la solution, nous pouvons calculer le produit d'activité ionique (Ion Activity Product IAP):

$$IAP = \frac{\prod[A_j]^{v_j}}{\prod[A_i]^{v_i}} \quad (\text{D.5})$$

Ce produit d'activité ionique nous permet d'estimer la saturation de réaction en comparant avec la constante d'équilibre :

$$\Omega = \frac{IAP}{K} \quad (\text{D.6})$$

Si cette fraction $\Omega = 1$, l'équilibre est établi, si par contre $\Omega > 1$ l'état est sursaturé et $\Omega < 1$ l'état est sous saturé. Pour les grandes déviations de l'équilibre, le logarithme de cette fraction est nécessaire et dit l'indice de saturation :

$$I_s = \log\left(\frac{IAP}{K}\right) \quad (\text{D.7})$$

Pour $I_s = 0$ on a un état d'équilibre entre la phase minérale et la solution ; dans le cas $I_s > 0$ on a une sursaturation et $I_s < 0$ sous saturation.

Annexe E. Cinétique des réactions hydro-chimique du test d'infiltration d'alcaline dans la bentonite MX-80

La composition minéralogique ainsi que les conditions d'essais de la bentonite ont été présenté dans le paragraphe (IV.3.2) de ce chapitre. Ici sera présentée la cinétique de réactions chimiques adoptées dans les simulations. La Na-Montmorillonite représente le minéral le plus important de la bentonite (75 %). La vitesse de dissolution de Montmorillonite dépend du pH et s'écrit sous la forme suivante selon une étude sur un matériau similaire [ROZ 08]:

$$R(\text{mol}.m^{-2}.s^{-1}) = 10^{-12.3}a_{H^+}^{0.4} + 10^{-14.37} + 10^{-13.05}a_{OH^-}^{0.27} \quad (\text{E.1})$$

Les informations de la vitesse de réaction pour les autres minéraux se trouvent dans [Die 05]. La vitesse de dissolution de ces minéraux peut s'écrire de la forme :

$$R_m = A_{m,0} \left(\frac{M_m}{M_{m,0}} \right)^{2/3} \{OH^-\}^n k_{0,m} [1 - Q_m/K_m] \quad (E.2)$$

Où R_m est la vitesse de dissolution du minéral m (mol/sec), $A_{m,0}$ est l'aire de la surface initiale de réaction du minéral m (m^2), $\left(\frac{M_m}{M_{m,0}} \right)^{2/3}$ est le facteur en prenant compte la diminution de la surface de réaction pendant la dissolution, $M_{m,0}$ et M_m sont respectivement le nombre de mol à l'état initial et à l'état actuel du minéral m , n est l'ordre de la réaction de OH^- , la dépendance de la vitesse de réaction, $k_{0,m}$ est la constante intrinsèque de vitesse de réaction. Le tableau C.1 contient les éléments de la cinétique de dissolution des différents composants.

Tableau E: Les paramètres de la cinétique des minéraux de la bentonite BX-80

Minéraux	log_k	Surface spécifique (m2/m3)	Volume molaire cm3/mol	n	mole	A(m2)
Cristobalite	-10.2	2.00E+05	25.74	0.3	2.619	13.484
Gypsum	-8	2.00E+03	74.69	0	0.055	0.008
Na-Montmorillonite	-	1.73E+09	170	-	3.215	945561.211
Calcite	-1	2.00E+03	36.93	0	0.220	0.016

Annexe F. Cinétique des réactions hydro-chimique du test d'altération hydro-chimique de la pierre du tuffeau

La dissolution des gaz pollués dans l'eau forme des acides qui nuisent à la pierre. D'une part, le dioxyde de soufre SO_2 se dissout dans l'eau avec l'équation suivante :



La quantité dissoute de dioxyde de soufre dépend de la pression partielle du gaz. La loi de Henry donne une relation de la molarité dissoute et la pression partielle sous la forme suivante :

$$H^0 = \frac{p_{SO_2}}{m_{SO_2}} \quad (F.2)$$

Où H^0 est la constante de Henry du SO_2 (kPa kg mol⁻¹), qui est déterminé par l'équation suivante [COL 06] :

$$H^0 = 101,325 \exp\left(9.3795 - \frac{2851.1}{T}\right) \quad (F.3)$$

Dans l'air ambiant, le dioxyde de soufre a une fraction molaire de $201 \cdot 10^{-9}$. La pression partielle de ce gaz est donc égale à :

$$p_{SO_2} = 201 \cdot 10^{-9} \cdot 1.013 \cdot 10^2 = 2.036 \cdot 10^{-5} \text{ (kPa)} \quad (F.4)$$

A 25°C, la constante de Henry de dioxyde de soufre est déterminée à partir de l'équation suivante :

$$H^0 = 101,325 \exp\left(9.3795 - \frac{2851.1}{T}\right) = 101,325 \exp\left(9.3795 - \frac{2851.1}{298.13}\right) = 84,369 \left(\frac{\text{kPa kg}}{\text{mol}}\right) \quad (F.5)$$

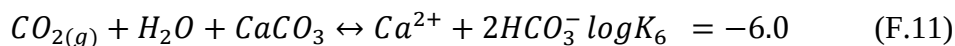
La concentration du dioxyde SO_2 dans l'eau est calculée :

$$m_{SO_2} = \frac{p_{SO_2}}{H^0} = \frac{2.036 \cdot 10^{-5}}{84,369} = 2.413 \cdot 10^{-7} \text{ (mol/kg)} \quad (F.6)$$

D'autre part, la dissolution du gaz carbonique dans l'eau implique une série de réactions. Ce phénomène est la cause de la dissolution de calcite et il est susceptible de former le gypse. Les réactions sont décrites ci-dessous :



La combinaison des équations (F.7)-(4.10) donne la réaction de calcite en présence de dioxyde de carbone :



A l'état initial, le tuffeau se compose du quartz et de calcite. Au contact avec l'eau, du gaz carbonique CO_2 et dioxyde de soufre SO_2 , ces deux minéraux ont la possibilité de se dissoudre et le gypse pourra se former.

La vitesse de dissolution des minéraux suit l'équation (E.2) de la même façon que pour la bentonite citée précédemment. Les paramètres de la cinétique des deux minéraux principaux du tuffeau sont également donnés dans le tableau F.

Tableau F: Les paramètres de la cinétique des minéraux du tuffeau

Minéraux	log_k	Surface spécifique (m ² /m ³)	volume molaire cm ³ /mol	n	mole	A(m ²)
Quartz	-10.2	2.00E+05	22.68	0.3	2.183	9.902
Calcite	-1	2.00E+03	36.93	0	11.79	0.871

En présence du gaz SO₂ dans l'air, le gypse peut se former ou se précipiter. En effet, la vitesse de précipitation du gypse j_2 (mol cm⁻²s⁻¹) est écrite sous la forme suivante [FAT 10] :

$$j_2 = k_2[SO_4^{2-}]H\left[Ca^{2+}[SO_4^{2-}] - K_{eq}\right]H[d_{max} - d] \quad (F.19)$$

Où : $k_2 = 0.0013 \pm 0.0005$ cm s⁻¹, H est la fonction Heaviside

d_{max} , d sont respectivement la concentration maximale et la concentration dans la solution

K_{eq} est la constante d'équilibre du gypse.

Annexe G. Description du modèle simplifié du gonflement hydro-mécanique des argiles gonflantes ELASGONF

Hypothèses principales du modèle ELASGONF

Le modèle des argiles gonflantes, décrits dans [HOX 07a], a été proposé par le LaEGO en 2004 afin de prendre en compte d'une façon simplifiée la pression de gonflement susceptible de se produire lors de la resaturation des argiles gonflantes. Les hypothèses de base de ce modèle ont été clairement présentées dans le document [HOX 07a] tandis que quelques résultats prédictifs et interprétatifs du modèle sur des essais de laboratoire et in situ sont présentés dans les rapports [HOX 08] et [HOX 10].

Le comportement THM de l'argile gonflante est réalisé dans le cadre général des milieux poreux décrits par Coussy [COU 04]. Les équations décrivant le comportement hydrique et thermique ne seront pas explicitées ici mais un document détaillé du Code_Aster est fourni dans les annexes de ce rapport.

On se concentre donc sur le comportement mécanique des argiles gonflantes en restant dans un cadre macroscopique et on considère que le comportement des argiles gonflantes reste élastique. Bien que cette hypothèse est très simplificatrice, étant donné que la mise en charge des matériaux de scellement sera plutôt monotone aussi bien du point de vue mécanique que hydrique (chargement mécanique du à la convergence des ouvrages et chargement hydrique sur un chemin de saturation) on pourra intégrer certains phénomènes dissipatifs comme des phénomènes non linéaires réversibles.

Avec cette hypothèse de base le modèle de gonflement élastique (ELASGONF) est une extension et une simplification du modèle BBM. Les déformations élastiques du modèle BBM [GAT 06] s'écrivent sous la forme :

$$d\varepsilon_v = \frac{d(\sigma_m + p_a)}{K(s)} - \frac{b.ds}{K_s(s)} \quad (G.1)$$

Dans ces expressions $K(s)$ et $K_s(s)$ représentent respectivement le module d'incompressibilité du matériau lors de la variation de la contrainte mécanique (σ_m) (le rapport de la variation de la contrainte moyenne à succion constante avec la déformation volumique respective à cette variation) et le module d'incompressibilité respectif en cour de variation de la succion (s) (le rapport de la variation de la succion à contrainte mécanique constante avec la variation de la déformation volumique respective). On utilisera par la suite les expressions incompressibilité mécanique et incompressibilité hydrique pour designer $K(s)$ et $K_s(s)$.

La variation du module d'incompressibilité $K(s)$ avec la succion est donnée dans ce cas par une expression exponentielle dont le principal mérite est de borner la valeur de l'incompressibilité mécanique entre sa valeur drainée en saturé (K_0) et sa valeur maximale coïncidant avec un état complètement sec du matériau ($K(s)=K_0 \times r$):

$$K(s) = K_0 \cdot ((1-r) \cdot \text{Exp}(-\beta \cdot s) + r) \quad r \geq 1 \quad (G.2)$$

Description du modèle ELASGONF

Le modèle de gonflement élastique ELASGONF est basé sur une extension de la partie élastique du modèle BBM qui se traduit ici par l'hypothèse de l'évolution de l'incompressibilité hydrique en fonction de la succion. Cette évolution est alors supposée suivre celle de l'incompressibilité mécanique à une fonction de la succion près, i.e :

$$K_s(s) = K(s)\Gamma(s) \quad (G.3)$$

Si on veut modéliser le fait que lorsque le matériau est quasiment sec la variation de la succion ne produira plus de variation de déformation et que lorsque la succion devient nulle on doit retrouver le comportement saturé du matériau, alors les caractéristiques suivantes s'imposent pour la fonction $\Gamma(s)$:

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \Gamma(s) = \infty \text{ et } \Gamma(0) = 1 \quad (G.4)$$

En injectant (G.3) dans (G.1) on obtient pour les déformations volumiques :

$$d\varepsilon_v = \frac{d(\sigma_m + p_a)}{K(s)} - \frac{b.ds}{K_s(s)} = \frac{d(\sigma_m + p_a)}{K(s)} - \frac{b.ds}{K_s(s)\Gamma(s)} = \frac{d(\sigma_m + p_a) - b(s)ds}{K_s(s)} \quad (G.5)$$

Cette dernière équation laisse apparaître une expression similaire à une contrainte effective en non-saturé avec un coefficient de Biot qui est lui fonction de la succion :

$$b(s) = \frac{b}{\Gamma(s)} \quad (G.6)$$

En vue des conditions (G.4), l'équation G.6 indique que le coefficient de Biot en non saturé tend donc vers zéro lorsque la succion tend vers l'infini et il est égal au coefficient de Biot saturé lorsque la succion est égale à zéro.

Selon les observations concordantes de plusieurs auteurs la pression de gonflement se développe surtout aux dernières phases de saturation des argiles gonflantes. Plusieurs théories microscopiques tentant de faire le lien entre le potentiel de gonflement et la structure des argiles vont aussi dans ce sens. En tenant compte de ces observations, nous proposons la forme suivante de la fonction $\Gamma(s)$:

$$\Gamma(s) = \frac{\text{Exp}(\beta_m \cdot \xi^2)}{(1 + \xi)} \quad (G.7)$$

avec $\xi = \frac{s}{\sigma_0}$, σ_0 étant une valeur de référence égale à 1MPa.

On peut partir de l'équation G.5 et G.7, la pression de gonflement maximale obtenue en cours d'essai de gonflement à volume constant (resaturation homogène à partir d'une succion zéro jusqu'à la saturation complète) s'écrit:

$$P_{gf}^{s_0} = \sigma_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\beta_m}} \text{Erf}\left(\xi\sqrt{\beta_m}\right) + \frac{1}{2\beta_m} \left(1 - e^{-\beta_m \xi^2}\right) \quad (G.8)$$

Lorsqu'on resature à partir de l'état sec ($s \rightarrow \infty; \xi \rightarrow \infty$) on obtient la pression de gonflement maximale égale à :

$$P_{gf}^{\max} = \sigma_0 \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\beta_m}} + \frac{1}{2\beta_m} \right) \quad (G.9)$$

On peut alors calculer la valeur du paramètre β_m telle que la pression de gonflement maximal ait une valeur consignée :

$$\beta_m = \left(\frac{\sigma_0}{P_{gf}^{\max}} \frac{\sqrt{\pi} + \sqrt{\pi + 8 \frac{P_{gf}}{\sigma_0}}}{4} \right)^2 \quad (G.10)$$

Pour une pression de gonflement maximale égale à 7 MPa, (c'est la pression de gonflement souvent ciblée dans de nombreux ouvrages en pratique) la valeur du paramètre β_m doit être égale à 0.114215295.

Conclusions et Perspectives

La modélisation du comportement complexe des milieux poreux en prenant en compte tous les phénomènes et leurs interactions, bien que très développée dans la littérature reste un domaine qui suscite l'intérêt des scientifiques afin de répondre à de nombreuses questions liées aux nouvelles applications de pointe telles que le stockage des déchets radioactifs, le stockage du gaz carbonique ou la préservation des monuments historiques.

L'utilisation des approches complémentaires macroscopiques et microscopiques de modélisation des couplages hydro-mécaniques et chimiques est souvent nécessaire pour comprendre les mécanismes en jeux et pour répondre aux besoins de prédictions à très long terme de l'évolution des structures en génie civil.

En abordant le problème des couplages HMC aux milieux poreux (géomatériaux) nous avons d'abord traité le problème de la modélisation numérique des écoulements diphasiques dans les milieux poreux saturés et non saturés en présence de microfissures, en considérant une approche microscopique directe. Cette approche est basée sur la description géométrique du réseau poral par un système de conduits 1D. L'écoulement dans chaque conduit est régi par un algorithme développé qui utilise en plus de la pression de liquide, la pression capillaire et les forces capillaires dans le conduit pour décrire les conditions d'entrée du fluide mouillant dans un pore et le cas échéant la vitesse d'écoulement. Si l'écoulement dans un seul tube est simple la complexité d'écoulement macroscopique vient principalement de la complexité et la connectivité du réseau poral. Il est possible suivant cette approche de reproduire les caractéristiques hydriques d'un milieu poreux (porosité, conductivité hydraulique, perméabilité relative, courbe de sorption-désorption) en connaissant la structure du réseau poral.

En particulier, nous avons utilisé l'approche développée pour étudier l'influence de l'apparition et la propagation des microfissures sur les propriétés hydriques d'un matériau poreux, sans s'intéresser explicitement à l'origine de ces fissures. Un algorithme numérique développé permet d'imiter le développement de la fissuration par une augmentation directionnelle de la densité de fissuration. L'impact de cette fissuration est une augmentation de conductivité hydraulique dans toutes les directions. Dans les conditions simulées la conductivité dans la direction d'évolution de la fissuration augmente de presque 3 ordres de

grandeurs comparée avec la conductivité hydraulique initiale de l'échantillon alors que la porosité n'augmente que de 2%. Ces résultats sont en accord avec les mesures de laboratoire et les observations de la fissuration. En non saturé les simulations montrent un impact de la fissuration sur la courbe de rétention qui se traduit pour une même succion par une désaturation plus prononcée du matériau fissuré comparé au matériau sain. Si l'effet de l'endommagement sur la conductivité hydraulique allait vers une conductivité plus forte, la perméabilité relative diminue avec la fissuration. Cette diminution s'explique par une augmentation de la fraction des conduits de grand rayon et une diminution à cette occasion des forces motrices capillaires.

La modélisation du comportement chimique-hydromécanique a été abordée par une approche macroscopique de couplage par une technique dite de communication-passerelle entre les codes en utilisant un couplage d'un code de calcul hydro-géochimie (HP1) avec un code de calcul mécanique développé sur Matlab. Cette technique de modélisation a été utilisée en deux études consacrées respectivement à l'évolution du potentiel de gonflement d'une argile gonflante en cours d'infiltration par une solution alcaline et au rôle de la formation du gypse par voie aérienne dans le tuffeau blanc. Il a été démontré qu'en cours d'infiltration de l'argile gonflante par une solution alcaline, la dissolution des minéraux argileux et des autres minéraux secondaires bien qu'importante à long terme reste avec un impact réduit sur le comportement mécanique. En revanche l'évolution de la composition de l'eau porale et notamment le remplacement des ions Ca^{++} par Na^+ conduit à une diminution du potentiel de gonflement. Un modèle mécanique paramétré par des champs de concentrations a été adapté et utilisé pour prédire l'évolution de la pression en fonction de la composition chimique de l'eau porale. Les simulations numériques produisent qualitativement les résultats expérimentaux publiés dans la littérature. Concernant le problème de la formation du gypse par voie aérienne dans un tuffeau, malgré les concentrations fortes du SO_2 utilisées dans une des simulations et la pluie acide utilisée dans la deuxième simulation, la concentration du gypse lorsque celui-ci est présent reste très faible, même à la fin des phases de séchage.

Plusieurs perspectives peuvent être envisagées pour continuer ce travail.

- Dans une future immédiate, la relation entre la structure du réseau poral et la conductivité hydraulique est à revoir du point de vue d'une structure porale plus réaliste. Le réseau poral que nous avons construit est obtenu par une distribution spatiale aléatoire. Il est possible de générer une structure porale en termes de longueurs et de connexions de tubes

qui décrirait plus fidèlement la structure d'un matériau donné si on utilise pour cela des données plus fines sur la microstructure. Des observations à l'échelle microscopique et la caractérisation des propriétés à cette échelle seront alors nécessaires pour essayer d'éviter un retro ajustement des rayons hydrauliques représentatifs de pores.

- La prise en compte du transport diffusif dans les conduits semble une nécessité pour une description pertinente des écoulements en non saturé. Plus largement, cela permettrait de tenir compte rigoureusement du changement de phases sans lequel la modélisation du comportement en partiellement saturé restera approximative. Le transport par intermittence de l'eau dans le réseau poral en forme de vapeur, surtout dans les gros pores, avant de se condenser est un mécanisme souvent cité mais difficilement quantifiable. La voie de modélisation permettrait de mettre plus de la lumière sur ce mécanisme et de vérifier ses fondements microscopiques.
- Le couplage hydromécanique est à étudier aussi dans le sens hydro vers mécanique, notamment en partiellement saturé. On peut imaginer l'établissement d'une procédure de calcul de la contrainte effective en tenant compte aussi bien de la pression dans chaque tube que des ménisques.
- Une extension possible de la modélisation microscopique directe en prenant en compte d'autres phénomènes qui peuvent influencer le comportement macroscopique comme la pression du gel dans les conduits pour examiner son rôle sur la microfissuration des milieux poreux, ou la diffusion de la vapeur pour le comportement en non saturé.
- La prise en compte de la température constitue peut être le chantier le plus laborieux si l'on reste dans l'approche choisie. Non seulement cela demanderait de suivre de façon assez précise les changements de phases cités précédemment mais aussi les relations réciproques entre les réactions chimiques et la température.

Références

- [3FL 06] Guide de 3FLO, Calculs d'écoulement tridimensionnels, Volume 1, 2, 3, 4. Version 2.31, 2006.
- [ABO 91] Aboudi J., *Mechanics of composite materials : a unified micromechanical approach*, Elsevier Science Publiher, Amsterdam, 1991.
- [ALO 90] E.E. Alonso, A. Genset A. Josa, A constitutive model for partially saturated soils. *Geotechnique*, 40(3) :405-430,1990.
- [AND 01] ANDRA 2005. Dossier 2005. Argile sur l'avancement des études et recherches relatives à la faisabilité d'un stockage de déchets à haute activité et à vie longue en formation géologique profonde. Rapport de synthèse. 162 pages
- [AND 08] ANDRA 2008. Rapport d'évaluation n°2. Tome 1. Juin 2008. 86 pages.
- [AST 12] Code_Aster, Introduction à Code_Aster Date 17/10/2012, Page 1-13, Clé : U1.02.00, Révision 9881. Lien : http://www.code-aster.org/V2/doc/default/fr/man_u/u1/u1.02.00.pdf
- [AVR 08] C. Auvray, F. Homand, D. Hoxha, The influence of relative humidity on the rate of convergence underground gypsum mine. *International Journal of Rock Mechanics&Mining Sciences* 45 (2008) 1454-1468.
- [BAR 07] S. S. Barboura, Modélisation micromécanique du comportement de milieux poreux non linéaires : Applications aux argiles compactées. Thèse de doctorat en Mécanique, Université Paris 6, Année 2007.
- [BAZ 86] Bazant Z.P., Oh B.H., Efficient numerical integration on the surface of a sphere, *Z.A.M.M.*, 66:37-49,1986.
- [BAD 11] S. Janvier-Badosa, K. Beck, X. Brunetaud, M. Al-Mukhtar, A basis for establishing the health record of the monument, *Journal of Architectural Heritage* – publication acceptée en octobre 2011;

- [BEA 91] Bear, J., and Bachmat, Y. Introduction to modeling of transport phenomena in porous media. In Bear J. (Ed.), Theory and applications of transport in porous media. Kluwer Academic Publishers, 1991.
- [BEC 06] Beck K., Etudes des propriétés hydriques et des mécanismes d'altération de pierres calcaires à forte porosité. Thèse de doctorat en Sciences et Matériaux, Université d'Orléans, Année 2007.
- [BEC 07] K. Beck, H. A. Ramezani, M. Al-Mukhtar, Mechanical strength and water content of porous limestones. Proceeding (Springer) of ICEM 13 Int. Conference on Experimental Mechanics-Experimental Analysis of Nano and Engineering Materials and Structures Alexandroupolis, Greece, July 1-6, 2007.
- [BEC 08] E. Béchet, M. Scherzer and M. Kuna. Fracture of piezoelectric materials with the X-FEM, *European Journal of Computational Mechanics*, 17 (2008) 637-649.
- [BEC 10] K. Beck, M. Al-Mukhtar, Weathering effects in an urban environment: a case study of tuffeau, a French porous limestone, *Geological Society*, London, Special Publications, v. 331, p. 103-111, 2010.
- [BEC 11] Beck K. and Al-Mukhtar M., Formation of a patina by means of wetting-drying cycles. Int. Conf. on Weathering on Buildings and Stone Sculptures SWBSS, Limassol, Cyprus, 18-22 Oct. 2011.
- [BEK 97] Békri S., J-F. Thovert, Adler P.M., Dissolution and deposition in fractures. *Engineering Geology* 48 (1997) 283-308.
- [BEL 12a] N. Belayachi, D.P. Do, D. Hoxha, A note on the numerical homogenisation of the mechanical behavior of an argillaceous rock. *Computers and Geotechnics* 41 (2012) 70-78.
- [BEL 12b] N. Belayachi, D. Hoxha, D.P. Do, Thermo-Hydro-Mechanical behavior of the tuffeau stone masonry. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*. Volume 6, Issue 5, 2012.
- [BEN 89] A. Benhamida, *Etude micromécanique des mousses syntactiques*. Thèse de Doctorat, Université Pierre et Marie Curie, 1989.

- [BEN 00] L.S. Bennethum, M.A. Muradet J.H. Cushman, Microscale thermodynamics and the chemical potential for swelling media. *Transport in Porous Media*, 39 :187-225, 2000.
- [BEN 05] Benhamida A., Djéran-Maigre I., Dumontet H. et Smaoui S., Clay compaction modelling by homogenization theory. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 42 (2005), 996-1005.
- [BEN 11] A. Bensoussan, J.L. Lions, G. Papanicolaou, Asymptotic Analysis for Periodic Structures. AMS Chelsea Publishing, *American Mathematical Society-Providence*, Rhode Island, 2011.
- [BER 87] Berryman J. G., Blair S. C., Kozeny-Carman relations and image processing methods for estimating darcy's constant, *Journal of Applied Physics*, ISSN 0021-8979, CODEN JAPIAU, 1987, vol. 62, no6, pp. 2221-2228 (22 ref.)
- [BIE 10] N.N. Bien, Modélisation micromécanique des roches poreuses : Application aux calcaires oolithiques. Thèse de doctorat, I.N.P.L Nancy, 2010.
- [BIO 41] M.A. Biot., General theory of three-dimensional consolidation. *Journal of Applied Physics*, 12(2) :155-164, 1941.
- [BIO 55] M.A. Biot., Theory of elasticity and consolidation for a porous anisotropic solid. *Journal of Applied Physics*, 26(2) :182-185, 1955.
- [BIS 59] A.W. Bishop. The principle of effective stress. *Tekniskg Ukeblad*, 106 (39) :859-863, 1959.
- [BIS 63] A.W. Bishop, G.E. Blight, Some aspects of the effective stress in saturated and partly saturated soils. *Geotechnique*, 13 (1963) 177-197.
- [BLA 10] Ph. Blanc, X. Bourbon, A. Lassin, E.C. Gaucher, Chemical model for cement-based materials: Temperature dependence of thermodynamic functions for nanocrystalline and crystalline C-S-H phases. *Cement and Concrete Research* 40 (2010) 851-866.
- [BOB 98] Bobet, A., Einstein, H.H., Fracture coalescence in rock type materials under uniaxial and biaxial compression. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 35 (7), 863-888, 1998.

- [BOU 12] Bourbatache, O. Millet, A. Aït-Mokhtar, Ionic in charged porous media. Periodic homogenization and parametric study on 2D microstructures Original Research Article *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Volume 5, Issues 21-22, October 2012, Pages 5979-5991.
- [BRE 11] Konstantin Brenner, Méthodes de volumes finis sur maillages quelconques pour des systèmes d'évolution non linéaires. Thèse Doctorat de l'université Paris-Sud XI, année 2011.
- [BRO 57] Broadbent S.R., Hammersley J.M. Percolation processes. *Pro. Cambr. Phil. Soc.*, N 53 p629-645 (1957).
- [BRU 09] Xavier Brunetaud, Kévin Beck, Muzahim Al-Mukhtar, Méthodologie d'acquisition d'un modèle du Château de Chambord. Conférence AUGC 2009.
- [BUD 06] E. Budyn, L. Henry and T. Hoc. Multiple crack growth failure in cortical bone by the extended finite element method, *Proceeding of the Seventh World Congress on Computational Mechanics*, (2006) 16-22, Los Angeles (USA).
- [CAR 10] S. Cariou, Couplage hydro-mécanique et transfert dans l'argilite de Meuse/Haute-Marne : approches expérimentale et multi-échelle. Thèse de doctorat en spécialité : Structures et Matériaux. Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, année 2012.
- [CAR 09] Carl I. Steefel. Crunch Flow, Software for Modeling Multicomponent Reactive Flow and Transport. User's manuel. Earth Sciences Division Lawrence Berkeley, CA 94720 USA.
- [CAL 98] Carlos A. Leon y Leon, New perspectives in mercury porosimetry, *Advances in Colloid and Interface Science* 76-77 (1998) 341-372.
- [CHA 85] J. T. Chayes, L. Chayes, C.M. Newman, The Stochastic Geometry of Invasion Percolation. *Communications in Mathematical Physics*, Springer-Verlag 1985, Commun. Math. Phys 101, 383-407 (1985).
- [CHA 98] X. Château, L. Dormieux, Approche micromécanique du comportement d'un matériau poreux non saturé. *C.R.Acad.Sci.Serie 2B*, 326 (1998) 533-538.
- [CHA 02] X. Château, L. Dormieux, Micromechanics of saturated and unsaturated porous media, *International journal Numerical Method Geomechanic*, 26 (2002) 813-844.

- [CHR 79] Christensen R., *Mechanics of composite materials*, John Wiley & Sons, New-York, 1979.
- [CLA 03] Claquin C., *Etude du comportement de l'interface milieu granulaire et inclusion par une approche multi-échelle*. Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2003.
- [CLI 04] Clifford S. Riebe, James W. Kirchner et Robert C. Finkel., *Erosional and climatic effects on long-term chemical weathering rates in granitic landscapes spanning diverse climate regimes*, *Earth and Planetary Science Letters* 224 (2004) 547-562.
- [CON 07] Conan C., *Etude expérimentale et modélisation des écoulements liquide-liquide en conduite horizontale*. Thèse de doctorat en Génie Chimique, Institut National Polytechnique de Toulouse, Année 2007.
- [COT 10] Cottin C., *Drainage dans des micromodèles de milieux poreux. Application à la récupération assistée du pétrole*. Thèse de doctorat de spécialité Chimie-Physique, Université Bordeaux I, Année 2010.
- [COU 91] O. Coussy, *Mécanique des milieux poreux*, Edition TEchnip, (1991) 427.
- [COU 95] O. Coussy, *Mechanics of Porous Continua*, Wiley Ltd, New York, (1995) 455.
- [COU 04] O. Coussy, *Poromechanics*. John Wiley & Sons, 2004.
- [CHR 02] Christian Moyne, Marcio A. Murad, *Electro-chemo-mechanical couplings in swelling clays derived from a micro/macro-homogenization procedure*. *International Journal of Solids and Structures* 39 (2002) 6159-6190.
- [DAG 00] H. Daghari, L. De Backer, *Transfert d'eau dans un milieu poreux non isotherme*. *Revue de sciences de l'eau*, Rev. Sci. Eau 13/1(2000) 74-84
- [DAC 93] Daccord G., Liétard O., Lenormand R., *Chemical dissolution of a porous medium by a reactive fluid—II. Convection vs reaction, behavior diagram*, January 1993, Pages 179–186.
- [DAV 03] W. David Carrier III, *Goodbye, Hazen; Hello, Kozeny-Carman*. *J. Geotech. Geoenviron. Eng.* 129, 1054 (2003); doi:10.1061/(ASCE)1090-0241(2003)129:11(1054) (3 pages).

- [DO 12] D.P. Do, D. Hoxha, Effective transfer properties of partially saturated geomaterials with interfaces using the immersed interface method. *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.* In submission.
- [DOR 04] L. Dormieux, Djimedo Kondo, Approche micromécanique du couplage perméabilité-endommagement. *C.R. Mécanique* 332 (2004) 135-140.
- [DOR 06] L. Dormieux, E. Lemarchand, J. Sanahuja, Comportement macroscopique des matériaux poreux à microstructure en feuillets. *C.R. Mecanique* 334 (2006) 304-310.
- [DIR 96] Dirk Mallants, Diederik Jacques, Peng-Hsiang Tseng, Martinus Th. Van Genuchten, Jan Feyen, Comparison of three hydraulic property measurement methods. *Journal of Hydrology* 199 (1997) 295-318.
- [DIE 05] Diederik Jacques et Jirka Simunek., User Manual of the Multicomponent Variably-Saturated Flow and Transport Model HP1. Waste and Disposal, SCK.CEN, Mol, Belgium, Department of Environmental Sciences, University of California, Riverside, USA.
- [DO 08] D.P. Do, Application des approches d'homogénéisation à l'étude des propriétés thermo-hydro-mécaniques des roches : Application aux argilites. Thèse de doctorat, I.N.P.L Nancy, 2008.
- [DOM 12a] A. Dominijanni, M. Manassero, Modelling the swelling and osmotic properties of clay soils. Part I: The phenomenological approach. *International Journal of Engineering Science* 51 (2012) 32-50.
- [DOM 12b] A. Dominijanni, M. Manassero, Modelling the swelling and osmotic properties of clay soils. Part II: The physical approach. *International Journal of Engineering Science* 51 (2012) 51-63.
- [DON 04] Mingzhe Dong, Francis A. L. Dullien, Liming Dai et Daiming Li., Immiscible Displacement in the Interacting Capillary Bundle Model Part I. Development of Interacting Capillary Bundle Model. *TransPorous Med* (2005) 59:1-28. Springer 2005, p 18.
- [DOR 02] Dormieux, L., and Bourgeois, E. Introduction à la micromécanique des milieux poreux. Presses de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 2002.

- [DOR 03] L. Dormieux, E. Lemarchand, O. Coussy. - Macroscopic and Micromechanical Approaches to the Modelling of the Osmotic Swelling in Clays, *Transport in Porous Media* 50: 75–91, 2003.
- [DOR 06] L. Dormieux, D. Kondo et F.J. Ulm, Microporomechanics. John Wiley and Sons, 2006.
- [DOU 02] Doughty C., Karasaki K., Flow and transport in hierarchically fractured rock. *Journal of Hydrology* 263 (2002) 1-22.
- [ESH 57] Eshelby J.D., The determination of the elastic field of an ellipsoïdal inclusion and related problems, vol 241. *Proceedings of the Royal Society of London*, 1957.
- [ESL 12] J. Eslami, D. Hoxha, D. Grgic, Estimation of the damage of a porous limestone using continuous wave velocity measurements during uniaxial creep tests. *Mechanics of Materials*, volume 49, June 2012, Page 51-56.
- [EDV 99] C. Edvardsen, Water permeability and autogeneouse healing of cracks in concrete. *ACI Materials Journal*, V.96, N0.4, pp 448-454, 1999.
- [ELG 06] T. Elguedj, A. Gravouil, and A. Combescure. Appropriate extended functions for XFEM simulation of plastic fracture mechanics, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195 (2006) 501-515.
- [ENE 75] Ene, H., and Sanchez-Palencia, E. Equations et phénomènes de surface pour l'écoulement dans un modèle de milieu poreux. *Journal de Mécanique* 14(1) 1975, 73-108.
- [EYM 93] Eymard, R. and T. Gallouët (1993), Convergence d'un schéma de type éléments finis – volumes finis pour un système couplé elliptique - hyperbolique, *Modél. Math. Anal. Numér.* 27, 7, 843-861
- [EYM 94] Eymard R., M. Ghilani (1994), Convergence d'un schéma implicite de type éléments finis-volumes finis pour un système formé d'une équation elliptique et d'une équation hyperbolique, *C.R. Acad. Sci. Paris Serie I*, 319, 1095-1100.
- [EYM 06] Eymard, R. and T. Gallouët and Herbin R. (2006) Finite Volume Methods, in *Handbook of Numerical Analysis*, P.G. Ciarlet, J.L. Lions eds, vol 7, pp 713-1020

- [FAB 12] A. Fabbri, N. Jacquemet, D.M. Seyed, A chemo-poromechanical model of oilwell cement carbonation under CO₂ geological storage conditions. *Cement and concrete Research*, 42 (2012) 8-19.
- [FLA 06] FLAC3D, Fast Lagrangian Analysis of Continua in 3 Dimensions, Online Manual Table of Contents. Version 3.1, 2006.
- [FRI 10] B. Fritz, E. Jacquot, B. Jacquemont, A. Baldeyrou-Bailly, M. Rosener, O. Vidal, Geochemical modelling of fluid-rock interactions in the context of the Soultz-sous-Forêt geothermal system. *C.R. Geoscience* 342 (2010) 653-667.
- [GAT 06] Gatabin .C., Selection and THM characterisation of the buffer material : technical report. E.NT.0GME.05.0005/B, 2006.
- [GAU 04] E.C. Gaucher, P. Blanc, J.M. Matray, N. Michau, Modeling diffusion of an alkaline plume in a clay barrier. *Applied Geochemistry* 19 (2004) 1505-1515.
- [GEN 80] M. Th. Van Genuchten, A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil Science Society of America Journal*. Volume 44, no 5, September-October 1980, 677 South Segoe RD., Madison, WI 53711 USA.
- [GEN 02] A. Gens, L. do N. Guimaraes, A. Garcia-Molina, E.E. Alonso, Factors controlling rock-clay buffer interaction in a radioactive waste repository. *Engineering Geology*, 61 :297-308, 2002.
- [GEN 03] Gentier S., Hosni A., Courrioux G., Rachez X., Billaux D., Riss J., BRGM DR, ADEME.
- [GER 98] B. Gerard, G. Pijaudier-Cabot et C. Laborderie, Coupled diffusion-damage modelling and implications on failure due to strain localisation. *Int. J. Solids Structures*, 35(31-32) :4107-4120, 1998.
- [GHA 03] A. Ghassemi, A. Diek, Linear chemo-poroelasticity for swelling shales: theory and application. *Journal of petroleum Science and Engineering* 38 (2003) 199-212.
- [GHA 06] H. Ghasemzadeh, Couplages dans les géomatériaux multiphasiques effets de la température et de la chimie, Thèse de doctorat de ENPC, année 2006.

- [GHA 10] B. Ghanbarian-Alavijed, A. Liaghat, Huang Guan-Hua, M. Th. Van Genuchten, Estimation of the van Genuchten Soil Water Retention Properties from Soil Textural Data. *Pedosphere* 20 (4): 456-465, 2000.
- [GIE 06] Herbert Giesche, Mercury Porosimetry: a General (Practical) Overview. Part. Part. Syst. Charact. 23 (2006) 1-11.
- [GIL 02] J.A. Gili and E.E. Alonso, Microstructural deformation mechanisms of unsaturated granular soils. *International journal for numerical and analytical methods in geomechanic*, 26 (2002) 433-468.
- [GRA 01] W.G. Gray et B.A. Schrefler. Thermodynamic approach to effective stress in partially saturated porous media. *Europeen Journal of Mechanics, A/Solids* 20, (2001) 521-538.
- [GRA 93] Gratier, J.P., Pressure solution-deposition creep of rocks in the upper crust. *Bulletin de la SocieteGeologique de France*, t. 164 (2), 267-287, 1993.
- [GRA 08] Granet S., Modèles de comportement THHM ; document de référence de Code_Aster, http://www.code-aster.org/DOCASTER/Man_R/R7/R70111c.pdf (2008)
- [GRA 09] W.G. Gray, B.A. Schrefler, F. Pesvento, The solid phase stress tensor in porous media mechanics and the Hill-Mandel condition. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57 (2009) 539-554.
- [GRO 05] Grodin F.A., Modélisation multi-échelles du comportement thermo-hyro-mécanique des milieux hétérogènes : Applications aux matériaux cimentaires sous sollicitations sévères. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, 2005.
- [HAD 76] Hadley, K., Comparison of calculated and observed crack densities and seismic velocities in Westerley granite. *Journal Geophysical Research* 81, 3484–3487, 1976.
- [HAS 62a] Hashin Z., The elastic moduli of heterogeneous materials. *Journal of Applied Mechanics*, 29 (1962), 143-150.
- [HAS 62b] Hashin Z. et Shtrikman S., On some variational principles in anisotropic non homogeneous elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 10 (1962), 335-342.

- [HAS 63] Hashin Z. et Shtrikman S., A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11 (1963), 127-140.
- [HAX 09] Adrien Haxaire et Irini Djeran-Maigre, Influence of dissolution on the mechanical behaviour of saturated, *Engineering Geology* 109 (2009) 255-261.
- [HET 06] T. Hettich et E.Ramm. Interface material failure modeled by the extended finite element method and level sets. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195 (2006) 4753–4767.
- [HIL 65] Hill R., A self-consistent mechanics of composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13 (1965), 213-222.
- [HOM 00] F. Homand, D. Hoxha, T. Belem, M.N. Pons et N. Hoteit. Geometric analysis of damaged microcracking in granites, *Mechanics of Materials*, 32 (2000) 361-376.
- [HOR 83] Horii, H., Nemat-Nasser, S., 1983. Overall moduli of solids with microcracks: load-induced anisotropy. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 31 (2), 155–171.
- [HOX 99] D. Hoxha, F. Homand, Microstructural approach in damage modeling. *Mechanics of Materials*, 32 (2000) 377-387.
- [HOX 05] D. Hoxha, M. Lespinasse, Judith Sausse, Françoise Homand, A microstructural study of natural and experimentally induced cracks in a granodiorite. *Tectonophysics*. Volume 395, Issue 1-2, 6 January 2005, Pages 99-112.
- [HOX 06] D. Hoxha, F. Homand, C. Auvray, Deformation of natural gypsum rock: Mechanisms and questions. *Engineering Geology* 86 (2006) 1-17.
- [HOX 07] D. Hoxha, A. Giraud, F. Homand and C. Auvray, Saturated and unsaturated behavior modelling of Meuse-Haute-Marne argillite, *International Journal of Plasticity*, 23 (2007) 733-766.
- [HOX 07a] D.Hoxha, Modélisation des phénomènes de base du couplage hydrique et hydromécanique des argilites et de l'argile gonflante – Conceptualisation de l'étude, C. RP. ONEG.07.0536.A, 2007.

- [HOX 08] D.Hoxha, Modélisation des phénomènes de base du couplage hydrique et hydromécanique des argilites et de l'argile gonflante – Modélisation des essais de laboratoire, C. RP. ONEG.08.0227.A, 2008.
- [HOX 10] D.Hoxha, Modélisation des phénomènes de base du couplage hydrique et hydromécanique des argilites et de l'argile gonflante –Tache 2.B : Modélisation interprétative de l'expérience PGZ, C. RP. ONEG.10.0460.A, 2010.
- [JEA 92] Jeannette D. (1992). Capillary transfers in rocks. Cours doctoral européen – Sciences et matériaux du patrimoine culturel, Ravello – Florence.
- [JIA 04] M.J. Jiang, S. Leroueil et J.M. Konrad. Insight into shear strength functions of unsaturated granulates by demi analyses.
- [JAC 10] D. Jacques, L. Wang, E. Martens, D. Mallants, Modelling chemical degradation of concrete during leaching with rain and soil water types. *Cement and Concrete Research* 40 (2010) 1306-1313.
- [KAC 82] Kachanov, M., Microcrack model of rock inelasticity: Part II. Propagation of microcracks. *Mechanics of Materials* 1, 29–41, 1982.
- [KAR 07] O.Karnland, S. Olsson, Ulf Nilsson et Patrik Sellin, « Experimentally determined swelling pressures and geochemical interactions of compacted Wyoming bentonite with highly alkaline solutions » *Physics and Chemistry of the Earth* 32 (2007) 275-286.
- [KHA 98] N. Khalili et M.H. Khabbaz. A unique relationship for χ for the determination of the shear strength of unsaturated soils. *Geotechnique*, 48 (1998), 1-7.
- [KHA 04] N. Khalili, F. Geiser, G.E. Blight, Effective stress in unsaturated soils : reviews with new evidence. *International Journal Geomechanic*, 4 (2004) 115-126.
- [KHA 10] Khalil Z., Ecoulement diphasique compressible et immiscible en milieu poreux : analyse mathématique et numérique. Thèse de doctorat de spécialité Mathématiques Appliquées. Ecole Centrale de Nantes, Année 2010.
- [LAF 02] Lafhaj Z., Skoczylas F., Détermination expérimentale de la perméabilité relative d'un sable. *Paramètres de calcul géotechnique. Magnan (ed.) 2002, Presses de l'ENPC/LCPC, Paris.*

- [LAR 81] Larson R.G., Scriven L.E., Davis H.T., Percolation theory of two phase flow in porous media. *Chem.Eng.Sci.*, v.36, N.1, p.57-73 (1981).
- [LAS 01] A. Lassin et M. Azaroual, Thermodynamique de la zone non saturée en eau des systèmes géologiques : I. Extension du modèle HKF-révisé et intégration des phénomènes capillaires. Projet de recherche 2001-MOD-D03, BRGM/RP-51306-FR, année 2001.
- [LEM 01] Lemarchand, E. Contribution de la micromécanique à l'étude des phénomènes de transport et de couplage poromécanique dans les milieux poreux : Application aux phénomènes de gonflement des géomatériaux. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 2001.
- [LEN 84] F. Léné, Contribution à l'étude des matériaux composites et leur endommagement, Thèse de doctorat d'Etat, Université Pierre et Marie Curie, 1984.
- [LER 11] C. Lerouge, S. Grangeon, E.C. Gaucher, C. Tournassat, P. Agrinier, C. Guerrot, D. Widory, C. Fléhoc, G. Wille, C. Ramboz, A. Vinsot, S. Buschaert. Mineralogical and isotopic record of biotic and abiotic diagenesis of the Callovian-Oxfordian clayey formation of Bure (France). *Geochimica et Cosmochimica Acta* 75 (2011) 2633-2663.
- [LEW 82] R.W. Lewis et B.A. Schrefler, A finite element simulation of the subsidence of gas reservoirs undergoing a water drive. In : Gallagher, R.H., Norrie, D.H., Oden, J.T., Zienkiewicz, O.C. (Eds.), *Finite Elements in Fluids*, Wiley, Chichester, 4 (1982) 179-199.
- [LI 03] X.S. Li, Effective stress in unsaturated soil : A microstructural analysis, *Géotechnique*, 53 (2003) 273-277.
- [LI 08] Shaofan Li, Gang Wang, Introduction to Micromechanics an Nanomechanics. World Scienfic, 2008.
- [LIU 05] Z. Liu, N. Boukpeti, X. Li, F. Collin, J.-P. Radu, T. Hueckel and R. Charlier (2005) - Modelling chemo-hydro-mechanical behaviour of unsaturated clays: a feasibility study, *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.*, 2005; 29:919-940
- [LOR 02] B. Loret, T. Hueckel et A.Gajo, Chemo-mechanical coupling in saturated porous media : elastic-plastic behavior of homoionic expansive clays. *International Journal of Solids and Structures*, 39: 2773-2806, 2002.

- [LUI 08] M. Luisa Rozalén, F. Javier Huertas, P.V. Brady, J. Cama, S. Garcia-Palma et J. Linares, Experimental study of the effect of pH on the kinetics of montmorillonite dissolution at 25°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 72(2008)4224-4253.
- [MAH 06] M. Ismail, Etude des transferts et de leurs interactions avec la cicatrisation dans les fissures pour prolonger la durée de service des infrastructures (ponts, centrales nucléaires). Thèse de doctorat, Institut national des sciences appliquées de Toulouse, année 2006.
- [MAL 67] Marle C., Ecoulements monophasiques en milieu poreux, revue de l'Institut Français du Pétrole et annales des combustibles liquides, vol XXII, n°10, Octobre 1967.
- [MAR 07] R. Marmier, Changement d'échelle dans les modèles hydromécaniques couplés des réservoirs fracturés. Thèse de doctorat en Génie Civil – Hydrosystème – Géotechnique, Institut national polytechnique de Lorraine – Nancy, année 2007.
- [MAR 12] Bertrand Marcon, Hygromécanique des panneaux en bois et conservation du patrimoine culturel. Thèse de doctorat, Université Montpellier 2, Università degli studi di Firenze, année 2012.
- [MAU 94] C. Mauge, M. Kachanov, Effective elastic properties of an anisotropic material with arbitrarily oriented interacting cracks. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Volume 42, Issue 4, April 1994, page 561-584.
- [MAU 05] J.-C. Maurin, F. Gilbert, M. Robert et C. Churlaud, « L'érosion chimique et l'érosion mécanique à long terme du substrat granitique (Vendée, France) » *C.R. Geoscience* 337 (2005) 841-848.
- [MOE 03] N. Moës, M. Cloirec, and P. Cartraud. A computational approach to handle complex microstructure geometries, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192 (2003) 3163-3177.
- [MOH 12] Mohamed E.M., Etude de l'efficacité diphasique d'une pompe pour la compression du CO₂. Thèse de doctorat de spécialité Mécanique, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Année 2012.
- [MOK 10] N. Mokni, S. Olivella, E.E. Alonso, Swelling in clayey soils induced by the presence of salt crystals. *Applied Clay Science*, 47 (2010) 105-112.

- [MON 05] G. Montes-H, B. Fritz, A. Clement, N. Michau - A simplified method to evaluate the swelling capacity evolution of a bentonite barrier related to geochemical transformations, *Applied Geochemistry* 20 409–422. (2005).
- [MON 05] G. Montes-H, N. Marty, B. Fritz, A. Clement, N. Michau (2005) Modelling of long-term diffusion–reaction in a bentonite barrier for radioactive waste confinement, *Applied Clay Science* 30, pp. 181– 198
- [MOV 06] A.B. Movchan, Multi-structures: asymptotic analysis and singular perturbation problems. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 25 (2006) 677-694.
- [MUK 06] Al-Mukhtar, M., Van, T.T., K, Beck, K., and Vanapalli, S.K., Water retention characteristics of two limestones. *American Society of Civil Engineers Geotechnical SP147*, Vol. 2, 1833-1844. 2006,
- [MUK 07] M. Al-Mukhtar, K. Beck, I. Rannou, Characterization of weathering of a porous limestone in urban environment: a case study. Stone Weathering and Pollution NETwork (SWAPNET) Malta, 24-26 May 2007.
- [NAG 05] V. Nagy, Laszlo M. Vas, Pore Characteristic Determination with Mercury Porosimetry in Polyester Staple Yarns, *FIBRES & TEXTILES in Eastern Europe*, July / September 2005, Vol. 13, No. 3 (51), pg. 21-26
- [ONA 07] Muserref Onal, Swelling and cation exchange capacity relationship for the samples obtained from a bentonite by acid activations and heat treatments. *Applied Clay Science* 37 (2007) 74-80.
- [PAN 03] Panfilova I., Ecoulements diphasiques en milieux poreux : Modèle de ménisque. Thèse de doctorat en Génie-Civil – Hydrosystèmes - Géotechnique, Institut National Polytechnique de Lorraine, Année 2003.
- [PAR 99] PARKHURST D. L. AND APPELO C.A.J. User's guide to PHREEQC (version 2)—a computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations, (1999)

- [PEN 08] Peng Xu, Boming Yu, Developing a new form of permeability and Kozeny–Carman constant for homogeneous porous media by means of fractal geometry. *Advances in Water Resources* 31 (2008) 74–81.
- [PHA 08] Pham T.L., Erosion et dispersion des sols argileux par un fluide. Thèse de doctorat en Géotechnique, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, Année 2008.
- [PIT 87] Pitt W.G., B.R. Younget S.L. Copper, Measurement of Advancing and Receding Contact Angles Inside Polymer Tubing. *Colloids and Surfaces*, 27 (1987) 345-355
- [PRI 03] P.Oliva, J. Vierset et B. Dupré, « Chemical weathering in granitic environments », *Chemical Geology* 202 (2003) 225-256.
- [QUI 96] M. Quintard et S. Whitaker. Transport in chemically and mechanically heterogeneous porous media. I: Theoretical development of region averaged equation for slightly compressible single-phase flow. *Advances in Water Resources*, 19(1) :29-47, 1996.
- [RAU 01] Rautureau M., G. Pierre et C. Hartmann (2001). *Tendre comme la pierre*, ouvrage collectif sous la direction de Michel Rautureau. Ed. Conseil régional Centre & Université d'Orléans, 116 p.(<http://www.culture.fr/culture/conservation/fr/biblioth/biblioth.htm>)
- [RIG 01] S.P. Rigby, R.S. Fletcher, S.N. Riley, Characterization of Macroscopic Structural Disorder in Porous Media Using Mercury Porosimetry. *J. Colloid Interface Sci.* 2001, 240 (1), 190-210.
- [RIG 02] S.P. Rigby, S. Daut, A. Statistical Model for the Heterogeneous Structure in Catalyst Pellets, *Adv. Colloid Interface Sci.* 2002, 98 (2), 87-119.
- [ROB 03] Robert P. Chapuiset Michel Aubertin, Predicting the coefficient of permeability of soils using the Kozeny-Carman equation. Ecole Polytechnique de Montréal, EPM-RT-2003-03.
- [ROS 03] R. Rosanne, Paszkuta M., Tevissen E. et Adler P.M., « Thermodiffusion in compact clays » *Journal of Colloid and Interface Science* 267 (2003) 194-203.
- [ROZ 04] Rozenbaum O., Bruand A., Beck K., Al-Mukhtar M., Plançon A., L'apport de la microtomographie X dans la conservation du patrimoine bâti : application aux pierres en œuvre. Journées Soleil en Région Centre, 4, France (2004).

- [ROZ 08] M. Luisa Rozalén, F. Javier Huertas, Patrick V. Brady, Jordi Cama, Susuna Garcia-Palma, José Linares, Experimental study of the effect of pH on the kinetics of montmorillonite dissolution at 25°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, Volume 72, Issue 17, 1 September 2008, Pages 4224-4253.
- [RUT 83] Rutter E.H., Pressure solution in nature, theory and experiment. *Journal of the Geological Society (London)* 140, 725-740.
- [SAM 08] A. Samouelian, S. Cornu, Modelling the formation and evolution of soils, towards an initial synthesis. *Geoderma* 145 (2008) 401-409.
- [SAH 94] Sahimi M., *Application of percolation theory*. 1st edn. Taylor&Francis, London.
- [SAH 08] F. Sahara, T. Murakami, I. Kobayashi, M. Mihara, T. Ohi, Modelling for the long-term mechanical and hydraulic behavior of bentonite and cement-based materials considering chemical transitions. *Physics and Chemistry of the Earth* 33 S531–S537(2008)
- [SHA 99] J.F. Shao, D. Hoxha, M. Bart, F. Homand, G. Duvieu, M. Souley, N. Hoteit, Modelling of induced anisotropic damage in granites. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 36 (1999) 1001-1012.
- [SID 00] Sidney Diamond, Mercury porosimetry: An inappropriate method for the measurement of pore size distributions in cement-based materials. *Cement and Concrete Research*, Volume 30, Issue 10, October 2000, Pages 1517–1525
- [SOU 01] M. Souley, F. Homand, S. Pepa et D. Hoxha, Damage-induced permeability changes in granite: a case example at the URL in Canada. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 38 (2001) 297-210.
- [SU 08] Su K., Fiche navette données scientifiques pour les simulations phénoménologiques : Propriétés mécaniques et hydromécaniques de l'argile gonflante (MX80+3% sable), C.NT.ASMG.08-0009/A, 2008.
- [SUK 01] N. Sukumar, D.L. Chopp, N. Moës, and T. Belytschko. Modeling holes and inclusions by level sets in the extended finite-element method, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 190 (2001) 6183-6200.

- [SHU 12] Shutao Chen, Xiaoshuai Shen, Zhenghua Hu, Haishan Chen, Yanshu Shi, Yan Liu, Effect of simulated acid rain on soil CO₂ emission in a secondary forest in subtropical China. *Geoderma*, 189-190 (2012) 65-71.
- [SUR 00] Ana Surget, Tatiana Macé, Mise en place des chaines nationales d'étalonnage. Synthèse de raccordement SO₂, NO et NO₂. Laboratoire central de surveillance de la qualité de l'air. Réf. LNE : C524J20, année 2000.
- [SUQ 95] P. Suquet, Effective behavior of nonlinear composites. In: Continuum micromechanics, P. Suquet ed., Springer Verlag Wien, 197-264, 1997.
- [SUQ 97] P. Suquet, Overall properties of nonlinear composites: a modified secant moduli theory and its link with Ponte Castañeda's nonlinear variational procedure. *Compte Rendus de l'Académie des Sciences*, 320:563-571, 1995.
- [SUZ 98] Suzuki K., Oda M., Yamazaki M., Kuwahara T., Permeability changes in granite with crack growth during immersion in hot. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* 35 (7), 907-921.
- [TAP 76] Tapponnier, P., Brace, W.F., Development of stress-induced microcracks in Westerley granite. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 13, 103–112, 1976.
- [TER 34] K. Terzaghi. Pressure due to capillarity in Drying Concrete Bodies. *BAuingenieur*, 15 (1934) 303-306.
- [TER 43] K. Terzaghi. Theoretical soil mechanics. New York : Wiley , 1943.
- [THO 02] Thomachot C., Modifications des propriétés pétrophysiques de grès soumis au gel ou recouverts d'encroûtements noirs vernissés. Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur, Strasbourg, 263 p. (2002).
- [ULM 99] F.J. Ulm, O. Coussy et Z. P. Bazant, The « chunnel » fire :Chemoplastic softening in rapidly heated concrete. *Journal of Engineering Mechanics*, 125(3):272-282, March 1999.
- [UDEEC] Software validation test plan for the universal distinct element code (UDEEC), version 3.1, May 2002.

- [ULM 03] Ulm F.J., Lemarchand E., Heukamp H.F., Elements of chemomechanics of calcium leaching of cement-based materials at different scales. *Engineering Fracture Mechanics* 70, 871-889, 2003.
- [VAN 64] Van Dyke M.D., Perturbation Methods in Fluid Mechanics. Academic Press, New York.
- [VAN 03] Cornelis H. Van der Weijden, Fernando A.L. Pacheco, Hydrochemistry, weathering and weathering rates on Madeira island. *Journal of Hydrology* 283 (2003) 122-145.
- [VAN 07] T.T. Van, M. Al-Mukhtar, K. Beck, X. Brunetaud and H.A. Ramezani, Salt distribution in a limestone due to the imbibition and relative humidity cycle tests: preliminary results, Proceeding of Salt Damage Congress, Ghent, may 9-11 2007.
- [VAN 07] T.T. Van, K. Beck, X. Brunetaud, M. Al-Mukhtar, Crystallization pressure and salt distribution in Tuffeau limestone. Proceeding (Springer) of ICEM 13 Int. Conference on Experimental Mechanics -Experimental Analysis of Nano and Engineering Materials and Structures Alexandroupolis, Greece, July 1-6, 2007.
- [VAN 07] T. T. Van, K. Beck, M. Al-Mukhtar, 2007, Accelerated weathering tests on two highly porous limestones. *Environmental Geology*, « SI-saltDecay » Vol.52-2, 411-420.
- [VAN 08] T.T. Van, Vieillissement du Tuffeau en présence de sels : approche expérimentale et numérique. Thèse de doctorat de spécialité Génie-Civil, Université d'Orléans, année 2008.
- [VOG 00] T. Vogel, M. Th. Van Genuchten, M. Cislerova, Effect of the shape of the soil hydraulic functions near saturation on variably- saturated flow predictions, *Advances in Water Resources*, 24 (2001) 133-144.
- [XIA 10] XiaoHui Chen, Michael A. Hicks, « Influence of water chemical potential on the swelling of water sensitive materials » *Computers and Structures* 88 (2010) 1498-1505.
- [XU 04] Y. Xu. Approche multi-échelle pour l'étude du comportement des systèmes polyphasiques application aux milieux poreux non saturés, Thèse de doctorat, ENPC Paris 2004.
- [WAS 21] Washburn W., « The dynamics of capillary flow », *The physical review*, vol. XXVIII, No. 3, March, 1921, p. 273-283.

- [WIL 88] Wilkinson D., Fluid dynamics at a pore scale. In « *Math. Oil Prod. :Proc.Conf.Inst.Math. and its Appl.Math.Oil Prod., Cambridge, July 1985.* », Oxford, p343-362.
- [WU 11] Wu Senjun, Modélisation du comportement des géomatériaux : apport des méthodes numérique de changement d'échelle. Thèse de doctorat, Université d'Orléans, année 2011.
- [WON 85] Wong, T.F., Geometric probability approach to the characterization and analysis of microcracking in rocks. *Mechanics of Materials* 4, 261– 276, 1985.
- [WON 98] Wong, R.H.C., Chau, K.T., Crack coalescence in a rock-like material containing two cracks. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 35 (2), 147– 164, 1998.
- [ZAK 05] E.A. Zakharova, O.S. Pokrovsky, B. Dupré et M.B. Zaslavskaya, « Chemical weathering of silicate rocks in Aldan Shield and Baikal Uplift : insights from long-term seasonal measurements of solute fluxes in rivers », *Chemical Geology*, 214 (2005) 223-248.
- [ZAK 07] E.A. Zakharova, O.S. Pokrovsky, B. Dupré, J. Gaillardet, L.E. Efimova, « Chemical weathering of silicate rocks in Karelia region and Kola peninsula, NW Russia : Assessing the effect of rock composition, wetlands and vegetation », *Chemical Geology*, 242 (2007) 255-277.
- [ZAO 01] A. Zaoui, Chapitre 1 : Changement d'échelle : motivation et méthodologie. Homogénéisation en mécanique des matériaux 1. Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques. *Hermès Science*, 2001.
- [ZAO 02] A. Zaoui, Continuum micromechanics : Survey. *Journal of Engineering Mechanics* 128, 8 (2002), 594-601.
- [ZEG 05] Zeghadi A., Calculs d'agrégats polycristallins : effet de surface et effet de taille de grain. Thèse de doctorat, Ecole des mines de Paris, 2005.
- [ZHA 08] Zhang Yan, Modélisation du comportement élastoplastique d'un pâte ciment soumise à la dégradation chimique. Thèse de doctorat de l'Université des Sciences et de Technologies de Lille, année 2008.

- [ZHU 06] Zhu Q., Applications des approches d'homogénéisation à la modélisation tridimensionnelle de l'endommagement des matériaux quasi fragiles : formulations, validations et implémentations numériques. Thèse de l'Université des Sciences et Technologies de Lille. Année 2006.