



**HAL**  
open science

# Problèmes de thermodynamique et de thermo-hydro-mécanique associés à l'exploitation du sous-sol

Ahmed Rouabhi

► **To cite this version:**

Ahmed Rouabhi. Problèmes de thermodynamique et de thermo-hydro-mécanique associés à l'exploitation du sous-sol. Matériaux et structures en mécanique [physics.class-ph]. Sorbonne Université, 2019. tel-02239077

**HAL Id: tel-02239077**

**<https://minesparis-psl.hal.science/tel-02239077>**

Submitted on 1 Aug 2019

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

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

**Habilitation à Diriger des Recherches**

**Sorbonne Université**

**Spécialité : Recherches sciences de l'univers**

---

**Problèmes de thermodynamique et  
de thermo-hydro-mécanique  
associés à l'exploitation du sous-sol**

---

**Ahmed ROUABHI**

**Centre de Géosciences, MINES ParisTech**

**Soutenue publiquement le 03 juillet 2019 devant le Jury composé de :**

<b>Pierre BÉREST</b>	Professeur émérite, École Polytechnique	Rapporteur
<b>Philippe COSENZA</b>	Professeur, Université de Poitiers	Rapporteur
<b>Alain MILLARD</b>	Ingénieur de recherche, HDR, CEA Saclay	Rapporteur
<b>Muriel GASC</b>	Directrice de recherche, CEREMA	Examinatrice
<b>Alain TABBAGH</b>	Professeur émérite, Sorbonne Université	Examinateur
<b>Michel TIJANI</b>	Directeur de recherche, MINES ParisTech	Examinateur



# Remerciements

---

Je tiens à adresser mes premiers remerciements à Michel TIJANI. Les mots me manquent pour lui exprimer toute ma reconnaissance et tout mon respect. C'est un grand honneur pour moi de l'avoir eu, d'abord comme directeur de thèse, ensuite comme collègue et ami. Ce travail n'aurait sans doute pas été possible sous cette forme sans sa grande complicité scientifique.

Mes remerciements sincères vont ensuite à tous les membres du Centre de Géosciences, chercheurs, techniciens et personnels administratifs. Je remercie, en particulier mes collègues de l'équipe Géologie de l'Ingénieur et Géomécanique pour leur complicité professionnelle. Parmi ceux, je suis particulièrement reconnaissant à Faouzi HADJ-HASSEN pour son dévouement et son dynamisme envers la recherche appliquée. Je n'oublie pas bien sûr tous les doctorants de l'équipe (Manon VITEL, Mohamed MAHJOUB, Paule LABAUNE, Hafssa TOUNSI, Aurélien SOUBEYRAN, Mejda AZABOU, Houssam DANNAWY...), et j'espère leur avoir apporté autant qu'ils m'ont apporté.

Je tiens à remercier aussi tous les partenaires industriels (SOTRENGY, GESOTOCK, AIR LIQUIDE, SALINS, SOLVAY, TOTAL, ORANO, SOLETANCHE BACHY...) pour leur confiance, grâce à laquelle j'ai pu explorer des domaines techniques variés et d'une richesse inestimable. La recherche appliquée que je pratique n'aurait certainement pas la même valeur sans leur soutien et leur volonté de coopération qui donne accès à des données qui sont souvent difficiles à acquérir à l'échelle d'un laboratoire de recherche.

Je remercie également très chaleureusement tous les membres du jury qui ont montré, à travers les nombreuses et variées questions pendant la soutenance, un grand intérêt à mon travail. Alain TABBAGH pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury. Pierre BÉREST, Alain MILLARD et Philippe COSENZA qui ont répondu favorablement et sans aucune hésitation à ma demande d'être les rapporteurs de cette HDR. Muriel GASC pour avoir accepté de faire partie du jury. Je suis particulièrement reconnaissant à Alain MILLARD, qui a été déjà rapporteur de ma thèse, d'avoir accepté d'examiner à nouveau mes travaux avec toujours la même rigueur scientifique et la même finesse d'analyse.

Enfin, sur le plan personnel, je voudrais remercier ma famille, mon épouse Najet et mes deux enfants Yasmine et Yacine. Je leur dédie ce mémoire de HDR en témoignage de mon affection et de mon amour.





# Résumé

---

Mes travaux de recherches sont motivés par diverses problématiques liées à l'exploitation du sous-sol telles que le stockage d'énergie, l'exploitation de gisements complexes ou encore le stockage profond des déchets radioactifs. Ces problématiques présentent un vaste champ pluridisciplinaire d'investigation que j'ai commencé il y a maintenant près de seize ans. Face à la complexité des problèmes posés et la diversité des disciplines scientifiques couvertes, ma contribution dans ces domaines était de différentes natures mais gardant toujours une approche globale basée sur une compréhension macroscopique des phénomènes. Dans ce mémoire, organisé en quatre chapitres, je me suis attaché davantage aux aspects de modélisation.

Dans le premier chapitre, qui servira de base aux chapitres suivants, je présente au mieux le cadre général de la thermodynamique des milieux continus dans l'objectif d'établir les équations de bilan dont certaines comme celle de l'énergie reste encore mal maîtrisée surtout dans le cas des systèmes ouverts qui m'intéresse et qui, en plus d'être multiconstituant et multiphasique, peuvent changer de masse soit par réactions chimiques soit par changement de phase. Le deuxième chapitre porte sur les lois de comportement et aborde en particulier celles qui régissent le comportement complexe des géomatériaux formant la roche hôte telle que le sel gemme. Le troisième chapitre est dédié à la problématique du stockage d'énergie. Dans ce domaine, qui confie au sous-sol un rôle déterminant dans la transition énergétique, je développe l'approche que j'ai adoptée pour la réalisation du logiciel Demether dédié à la résolution des problèmes thermodynamiques liés au stockage des fluides dans des cavités souterraines et qui traite en particulier le cas des cavités salines. Quant au dernier chapitre, je l'ai consacré à la congélation artificielle des terrains qui rentre dans la problématique d'exploitation des gisements miniers complexes par des méthodes non conventionnelles, et qui pose des verrous scientifiques qui ne sont pas uniquement liés aux changements de phase et aux comportements thermo-hydrauliques mais aussi et surtout aux comportements mécaniques et d'une manière générale aux capacités prédictives des modèles de couplage thermo-hydro-mécaniques. Je conclue le rapport par des perspectives de recherche qui auront pour objectif de poursuivre les thématiques actuelles tout en consolidant chacun des maillons de la chaîne : expérimentation - modélisation - simulation.



# Abstract

---

My research activities are fueled by the various challenges inherent to the exploitation of the subsurface such as energy storage, complex deposit exploitation or deep storage of radioactive waste. Combined, these research areas put up a broad multidisciplinary field that I undertook about sixteen years ago. Considering the complexity and diversity of the scientific disciplines included, my contribution in those domains was of different natures, but was always keeping a global approach, based on a macroscopic understanding of the encountered phenomena. In this dissertation, divided into 4 chapters, I rather focused on the modeling aspects.

In the first chapter which will serve as the basis for the following ones, I undertake the presentation of the general framework of thermodynamics of continuous media in order to establish the balance equations among which there are still some of them, like the energy balance, that are not completely understood especially in the case of open systems which are of interest to me. These systems, in addition to being multicomponent and multiphase, can undergo a change of mass via chemical reactions or phase change. The second chapter deals with the constitutive laws and addresses in particular the ones governing the complex behavior of the geomaterials forming host rocks such as rock salt. The third chapter is dedicated to energy storage. In this field, which gives the subsurface an essential role in the current energy transition, I detail the approach I adopted for the realization of Demeter; a software dedicated to solving thermodynamic problems related to fluid storage in underground caverns and focusing more specifically on salt caverns. The last chapter concerns artificial ground freezing linked to the exploitation of complex mining deposits with non conventional methods, which poses scientific locks that are not only related to phases changes and to thermo-hydraulic behaviors but also to the mechanical behaviors and more generally to the predictive abilities of thermo-hydro-mechanical coupling models.

I conclude with research perspectives that will aim to continue the current themes while consolidating each link in the chain : experimentation - modeling - simulation.



# Table des matières

---

Couverture	i
Remerciements	iii
Résumé	v
Abstract	vii
Table des matières	ix
Introduction	1
<b>Chapitre 1 : Le cadre de la thermodynamique des milieux continus</b>	<b>3</b>
1 Le cadre de la thermostatique des mélanges de fluides . . . . .	4
2 Le cadre des mélanges fluides isotropes . . . . .	5
2.1 Les équations de bilan . . . . .	7
2.1.1 Bilan de la masse . . . . .	8
2.1.2 Bilan de la quantité de mouvement . . . . .	9
2.1.3 Bilan de l'énergie totale - le premier principe . . . . .	10
2.1.4 Synthèse des trois bilans . . . . .	11
2.2 État thermodynamique local . . . . .	11
2.2.1 Le postulat de l'état local pour un milieu matériellement fermé	11
2.2.2 Le postulat de l'état local pour un milieu multiconstituant et réactif . . . . .	12
2.3 Bilan de l'entropie - le second principe . . . . .	12
2.4 Lois complémentaires et fermeture du problème . . . . .	13
3 Le cadre multiphasique et multiconstituant des milieux poreux . . . . .	15
3.1 Opérations de moyenne sur les équations microscopiques . . . . .	16
3.1.1 Les équations de bilan . . . . .	17
3.1.2 Les équations d'état . . . . .	18
3.2 Les équations de bilan macroscopique . . . . .	18
3.2.1 Formes locales . . . . .	18
3.2.2 Formes globales . . . . .	20
3.2.3 Rôle de la phase solide . . . . .	21
3.2.4 Bilan de la masse . . . . .	22
3.2.5 Bilan de la quantité de mouvement . . . . .	23
3.2.6 Bilan de l'énergie . . . . .	24
3.2.7 Bilan de l'entropie . . . . .	25
3.3 Lois d'état et lois complémentaires . . . . .	26
3.3.1 Les lois d'état . . . . .	27
3.3.2 Les lois complémentaires . . . . .	30
3.4 Équation de la chaleur . . . . .	31
<b>Chapitre 2 : Les lois de comportement</b>	<b>33</b>

1	Lois de comportement des roches salines . . . . .	34
1.1	Hypothèses principales . . . . .	34
1.2	La nécessité d'une nouvelle loi . . . . .	35
1.3	La nouvelle loi . . . . .	36
1.3.1	Le cadre des transformations finies . . . . .	36
1.3.2	Les lois d'évolution . . . . .	41
1.3.2.a	Le tenseur des déformations viscoplastiques . . . . .	42
1.3.2.b	Les variables d'écouissage . . . . .	44
1.4	Le calage des paramètres . . . . .	44
1.4.1	Commentaires généraux . . . . .	44
1.4.2	Identification des paramètres de la nouvelle loi . . . . .	48
1.4.3	Intérêt pratique des essais triaxiaux à pression moyenne constante . . . . .	48
1.5	Commentaires sur la mesure des déformations volumiques . . . . .	49
2	Lois de comportement de l'air humide . . . . .	53
2.1	Introduction . . . . .	53
2.2	Le modèle proposé . . . . .	55
2.3	Étude de quelques propriétés thermodynamiques . . . . .	57
2.3.1	La saturation . . . . .	57
2.3.2	La masse volumique . . . . .	58
2.3.3	La capacité thermique à pression constante . . . . .	59
<b>Chapitre 3 : Le stockage souterrain d'énergie</b>		<b>61</b>
1	Le modèle Puits . . . . .	62
1.1	Géométrie . . . . .	62
1.2	Les équations de bilan . . . . .	63
1.2.1	Hypothèses simplificatrices . . . . .	64
1.2.2	Bilan de la masse . . . . .	65
1.2.3	Bilan de la quantité de mouvement . . . . .	66
1.2.4	Bilan de l'énergie totale . . . . .	66
1.2.5	Bilan de l'entropie . . . . .	67
1.2.6	Transformation des équations et hypothèses supplémentaires . . . . .	67
1.3	Conditions initiales - conditions aux limites . . . . .	69
2	Le modèle cavité . . . . .	70
2.1	Bilan de la masse . . . . .	72
2.2	Bilan de l'énergie totale . . . . .	73
2.3	Hypothèse supplémentaire et système d'équation . . . . .	75
<b>Chapitre 4 : La congélation artificielle des terrains</b>		<b>77</b>
1	Introduction . . . . .	78
2	Mise en équation du problème dans le terrain . . . . .	79
2.1	Bilan de la masse . . . . .	79
2.2	Bilan de la quantité de mouvement . . . . .	80
2.3	Bilan de l'énergie . . . . .	80
2.4	Synthèse des équations de bilan et fermeture du problème . . . . .	80
2.4.1	Lois d'état . . . . .	81
2.4.2	Lois complémentaires . . . . .	82
2.5	Thermodynamique du changement de phase . . . . .	82
2.6	Lois d'état simplifiées . . . . .	84
3	Mise en équation du problème dans le puits de congélation . . . . .	88

4	Couplage entre le terrain et les puits de congélation . . . . .	89
5	Étude d'un exemple : construction d'une barrière étanche . . . . .	90
5.1	Effet de la vitesse d'écoulement . . . . .	93
5.2	Effet de la salinité de l'eau . . . . .	94
	<b>Bilan et perspectives</b>	<b>96</b>
	<b>Références</b>	<b>99</b>
	<b>Annexe A : Curriculum vitæ</b>	<b>106</b>
1	Diplômes et titres universitaires . . . . .	106
2	Expériences professionnelles . . . . .	106
3	Activités de recherche et compétences . . . . .	106
4	Activités de développement . . . . .	107
5	Activités d'enseignement . . . . .	107
5.1	Cycle ingénieur civil de MINES ParisTech . . . . .	107
5.2	Autres enseignements . . . . .	108
6	Activités d'encadrement . . . . .	108
6.1	Encadrement de thèses (taux d'encadrement > 60 %) . . . . .	108
6.2	Participation à l'encadrement de thèses (taux d'encadrement > 20 %) . . . . .	108
6.3	Encadrement de stages de recherche et de fin d'études . . . . .	108
7	Projets de recherche . . . . .	109
8	Publications scientifiques et techniques . . . . .	110
8.1	Articles dans des revues à comité de lecture . . . . .	110
8.2	Articles soumis . . . . .	112
8.3	Articles en préparation . . . . .	112
8.4	Chapitres de livre . . . . .	112
8.5	Conférences avec actes . . . . .	112
8.6	Rapports scientifiques et techniques . . . . .	113
	<b>Annexe B : Publications choisies</b>	<b>116</b>
	Continuum modeling of dynamic behaviour and fragmentation . . . . .	117
	Triaxial behaviour of transversely isotropic materials . . . . .	138
	Phenomenological behavior of rock salt . . . . .	157
	A multiphase multicomponent modeling approach of underground salt cavern storage . . . . .	173
	Modeling heat and mass transfer during ground freezing . . . . .	188



# Introduction

---

L'optimisation technique des ouvrages de l'espace souterrain est un thème conduit par le Centre de Géosciences depuis de longue date lorsque les applications étaient presque exclusivement minières. Mais suite à l'émergence récente de nouvelles stratégies d'exploitation du sous-sol, les aspects thermodynamiques et thermo-hydro-mécaniques sont devenus très importants et ont poussé l'équipe Géologie de l'Ingénieur et Géomécanique à adapter ses logiciels de simulation numérique en fonction de la pluridisciplinarité des problématiques abordées et aux exigences des partenaires industriels qui sont confrontés tous les jours à de nouveaux défis. Afin d'illustrer cette démarche d'adaptation, prenons les trois exemples suivants :

Le premier est relatif au stockage des produits pétroliers dans les cavités salines. En effet, durant plusieurs décennies, le Centre de Géosciences a choisi de ne fournir que des logiciels relatifs à la résolution des problèmes thermo-mécaniques liés au massif rocheux. L'interaction entre le fluide stocké et le massif était très simplifiée voire ignorée. Mais au cours des dernières années, l'évolution du marché du gaz a amené les opérateurs à modifier leur mode d'exploitation en augmentant les fréquences des cycles injection/soutirage. Cette augmentation de fréquence affecte significativement l'état thermodynamique non seulement du fluide stocké mais aussi du massif rocheux ; ce qui a pour conséquence en cas d'une modélisation simplifiée, en plus d'une mauvaise évaluation du stock, des problèmes non maîtrisés de stabilité et de perte de volume par fluage. Ces problèmes, bien identifiés par nos partenaires industriels tels que Storengy et Géostock, nous ont amenés à chercher une réponse globale au niveau des modèles aussi bien de dimensionnement que de fonctionnement prédictif en essayant d'intégrer tous les aspects : la mécanique des fluides dans le puits qui alimente la cavité, la thermodynamique de la cavité et la thermo-mécanique du massif rocheux.

Le deuxième exemple, proche du premier, concerne le stockage massif de l'énergie. En effet, le caractère fluctuant et intermittent des énergies renouvelables et la non maîtrise des flux énergétiques entre l'offre et la demande d'électricité imposent aujourd'hui la mise en oeuvre d'installations flexibles et performantes de stockage. Une solution parmi les plus pertinentes est celle fonctionnant par stockage d'air comprimé dans des cavités souterraines minées revêtues capables de fonctionner à des pressions très élevées et de supporter des chargements cycliques rapides. Lorsque elle est combinée avec un système de récupération de la chaleur de compression, cette technologie peut présenter des rendements énergétiques relativement élevés. Cependant, la modélisation de ce système soulève des problèmes de thermodynamique de l'air humide et de thermo-hydro-mécanique dans les revêtements et dans le massif rocheux qui nécessitent des couplages multi-physiques forts dans des gammes de pression et de température très larges où les procédés de linéarisation des lois de comportement ne sont plus justifiables.

Le dernier exemple, différent des deux premiers, concerne l'exploitation des gisements miniers complexes où des méthodes classiques sont rendus délicates par des contextes géologiques et hydro-géologiques particuliers. L'une des solutions, utilisée par nos partenaires industriels tel que Areva, consiste en l'emploi de la congélation artificielle. L'avantage de cette technique, employée souvent dans le génie civil, est qu'elle permet de résoudre les problèmes de pompage

tout en renforçant la stabilité des terrains. L'enjeu de la recherche dans cette thématique est de contribuer non seulement à prédire les phénomènes thermo-hydro-mécaniques dans les terrains mais, en outre, à optimiser les systèmes de congélation ; ceci passe encore une fois par des couplages multi-physiques.

Ce sont là quelques exemples de thématiques mettant en jeu des physiques complexes et illustrant la nécessité de fonder un savoir scientifique durable qui répond aux besoins actuels et essaye d'anticiper les besoins futurs par une recherche permanente et pluridisciplinaire.

Mes travaux de recherche en lien avec ces thématiques sont de différentes natures :

- la conception et la réalisation d'outils numériques idoines tels que le logiciel Demether pour l'étude des cavités salines depuis le lessivage jusqu'à l'abandon et le logiciel Solec dédié à la congélation artificielle des terrains ;
- la recherche des lois de comportement tant pour les roches que pour les fluides ;
- le calcul des structures en utilisant mes propres outils numériques ou les outils numériques de l'équipe ou encore des outils numériques externes avec le plus souvent la réalisation de modules permettant le couplage de codes différents.

Mais je pense que seuls les aspects de modélisation méritent d'être rapportés dans le mémoire d'Habilitation à Diriger des Recherches car il me semble que la clé d'une application réussie doit d'abord résider dans la bonne modélisation des phénomènes physiques mis en jeu. Le développement des applications pratiques et la confrontation entre mesures et calculs, qui constituent pourtant une part considérable de mes activités et qui représentent un support inestimable pour les modèles, ne seront détaillés qu'à travers les articles donnés en annexe.

Dans ce document, je propose une illustration de ces travaux de recherche à travers quatre chapitres : un premier qui fixe le cadre théorique et définit les concepts de base, un deuxième qui traite les lois de comportement, un troisième relatif au stockage souterrain d'énergie et un dernier sur la congélation artificielle des terrains.

Je donne en annexe, en plus d'un Curriculum Vitæ détaillé incluant la liste de mes travaux (Annexe A), cinq publications (Annexe B) :

- Rouabhi et al. [1] sur le comportement et la fragmentation dynamique des roches qui illustre une autre thématique de recherche sur laquelle je travaille depuis ma thèse, tout d'abord pour des applications de fragmentation des roches à l'explosif (en collaboration avec l'université de Leoben (Autriche)), et actuellement pour des applications de fragmentation des roches par pulse électrique (en collaboration avec l'université de Dresde (Allemagne) et Soletanche Bachy), ou encore pour des applications de forage pétrolier en conditions extrêmes (thèse de Houssam Dannawy) ;
- Rouabhi et al. [2] et Rouabhi et al. [3] sur la thématique lois de comportement des géomatériaux ;
- Rouabhi et al. [4] sur la thématique stockage d'énergie en cavités salines ;
- Rouabhi et al. [5] sur la thématique congélation artificielle des terrains.

# Chapitre 1

## Le cadre de la thermodynamique des milieux continus

---

Mon investissement dans ce cadre est non seulement pour comprendre les fondements de la discipline mais encore et surtout pour les maîtriser afin de les intégrer efficacement dans mes problématiques générales de stockage d'énergie et de couplage thermo-hydro-mécanique dans les milieux poreux. Les articles Rouabhi et al. [4], Rouabhi et al. [5] et Mahjoub et al. [6], portant sur des modèles multiphasiques et multiconstituants sont des exemples d'illustration de cette démarche.

Pour un milieu continu en mouvement, les lois de bilan (masse, quantité de mouvement, énergie) ne sont clairement énoncées que lorsque les taux de variation utilisés sont exprimés par rapport à un référentiel lié au mouvement des particules matérielles. C'est le cas d'un milieu monoconstituant où il n'y a qu'un seul champ de vitesse. Pour un milieu poreux ou un mélange de fluides où il y a autant de champs de vitesse qu'il y a de constituants, le choix du référentiel devient moins évident et les notions telles que contrainte et chaleur deviennent floues ; la définition d'une cinématique adéquate qui conserve pourtant la masse n'est pas forcément synonyme que le domaine d'étude est tout le temps constitué des mêmes éléments de matière. Face à cette difficulté et malgré le grand nombre d'ouvrages que ce soit en thermodynamique des mélanges fluides ou en mécanique des milieux poreux qui ont été consacrés depuis des dizaines d'années à ce sujet, ce qui frappe dès l'abord est la multiplicité des démarches et des postulats sans forcément des indications précises qui permettent de séparer ce qui relève de l'expérimentation de ce qui est déduit par simples manipulations mathématiques. Raison pour laquelle j'ai souhaité dans ce chapitre reprendre les équations de bilan en exploitant au mieux un cadre que je pense "physiquement correct" et mathématiquement cohérent ; l'objectif ultime étant l'établissement de l'équation de la chaleur pour un milieu multiconstituant et multiphasique dont j'aurai besoin dans les derniers chapitres de ce mémoire. Cette équation, si elle semble évidente pour les systèmes fermés, reste en effet complexe à élaborer pour les systèmes ouverts.

Je profite de ce développement pour discuter à chaque fois la validité des hypothèses de base, habituellement admises sans réserves, afin de ne voir dans ce cadre théorique qu'une approche de modélisation d'une réalité physique bien trop complexe pour qu'elle ne soit totalement cernée que par des certitudes, et garder à l'esprit qu'il ne s'agit que d'un "modèle" dont seule l'expérience permet d'en juger la pertinence.

Pour la clarté de la démarche, j'ai pris le parti de traiter le problème en procédant par généralisations successives en partant de la thermostatique, pour aborder ensuite le cas d'une seule phase fluide en tant que milieu continu muticonstituant, et pour finir avec le milieu poreux en tant que milieu continu multiphasique et muticonstituant.

**Notation** : les lettres grecques droites ( $\alpha, \beta, \sigma \dots$ ) désigneront les phases, les lettres latines

minuscules (i, j, k . . .) désigneront les constituants. La notation en double indice  $k\alpha$  précise que la quantité physique concernée est associée au constituant k dans la phase  $\alpha$ .

## 1 Le cadre de la thermostatique des mélanges de fluides

Le passage de la thermostatique des phases finies, une thermodynamique qui suppose des variables intensives homogènes en équilibre avec l'extérieur, à la thermodynamique des milieux continus en mouvement est généralement formulé à l'aide du postulat de l'état local qui consiste à admettre que le milieu continu est une adjonction de sous-phases infinitésimales (suffisamment petites pour assurer l'homogénéité des variables intensives) en évolution suffisamment lente pour que chaque sous-phase puisse être considérée comme en thermostatique dont je rappelle brièvement, dans ce qui suit, quelques résultats.

Considérant le cas d'un mélange de q constituants miscibles de sorte que sa masse totale  $\mathcal{M}$  contenue dans un volume  $\mathcal{V}$  soit égale à la somme des masses  $\mathcal{M}_k$  :  $\mathcal{M} = \sum \mathcal{M}_k$ . Soit  $\mathcal{U}$  l'énergie interne et  $\mathcal{S}$  l'entropie associées à la matière contenue dans  $\mathcal{V}$ . Lorsqu'aucune des masses  $\mathcal{M}_k$  n'a changé, le système étudié est matériellement fermé et le premier principe de la thermodynamique permet d'écrire :  $d\mathcal{U} = -pd\mathcal{V} + Td\mathcal{S}$ ; c'est la relation de Gibbs, valable pour toute transformation infinitésimale, dans laquelle  $p = -\partial_{\mathcal{V}}\mathcal{U}$  est la pression thermodynamique et  $T = \partial_{\mathcal{S}}\mathcal{U} > 0$  est la température absolue du mélange. Lorsque le système échange de la matière avec l'extérieur ( $\mathcal{M}_k$  varient), le système étudié devient un système thermodynamique ouvert auquel nous pouvons toujours attribuer, à un instant donné quelconque, le "système fermé coïncidant" (Fer [7]) dont l'état thermodynamique peut être décrit, en plus du couple  $(\mathcal{V}, \mathcal{S})$ , par les q masses  $\mathcal{M}_k$ . Dans ce cas, la relation précédente de Gibbs s'écrit :  $d\mathcal{U} = -pd\mathcal{V} + Td\mathcal{S} + \sum \mu_k d\mathcal{M}_k$  où  $\mu_k$  est le potentiel chimique massique du constituant k dans le mélange :  $\mu_k = \partial_{\mathcal{M}_k}\mathcal{U}(\mathcal{V}, \mathcal{S}, \mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_k, \dots, \mathcal{M}_q)$  (dérivée partielle de  $\mathcal{U}$  par rapport à la masse  $\mathcal{M}_k$  en maintenant constants  $\mathcal{V}$ ,  $\mathcal{S}$  et les autres masses  $\mathcal{M}_{j \neq k}$ ).

Les grandeurs  $\mathcal{U}$  et  $\mathcal{S}$  sont des grandeurs extensives au même titre que le volume  $\mathcal{V}$  et les masses  $\mathcal{M}_k$ . En particulier, si nous multiplions les grandeurs  $\mathcal{V}$ ,  $\mathcal{S}$  et  $\mathcal{M}_k$  par un facteur  $\lambda$  positif, l'énergie interne  $\mathcal{U}$ , en tant que fonction de ces variables extensives, se trouve également multiplié par  $\lambda$  :  $\mathcal{U}(\lambda \vec{A}) = \lambda \mathcal{U}(\vec{A})$ ,  $\forall \vec{A} = (\mathcal{V}, \mathcal{S}, \mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_q) \in \mathbb{R}^{2+q}$ ,  $\forall \lambda \in \mathbb{R}_+$ . En dérivant cette égalité par rapport à  $\vec{A}$ , il vient :  $\vec{\nabla} \mathcal{U}(\lambda \vec{A}) = \vec{\nabla} \mathcal{U}(\vec{A})$ ,  $\vec{\nabla} \mathcal{U}$  étant le gradient de  $\mathcal{U}$  par rapport à son argument. Les dérivées partielles de  $\mathcal{U}$  par rapport à ses variables canoniques sont donc des grandeurs intensives qui ne dépendent pas de la taille du système. En dérivant notre égalité de départ par rapport à  $\lambda$ , on obtient :  $\mathcal{U}(\vec{A}) = \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \mathcal{U}(\lambda \vec{A})$ . En particulier pour  $\lambda = 1$ , il vient :  $\mathcal{U} = -p\mathcal{V} + T\mathcal{S} + \sum \mathcal{M}_k \mu_k$  : c'est la relation d'homogénéité d'Euler ; on y reviendra à la fin de la section.

Par ailleurs, pour  $\lambda = 1/\mathcal{M}$ , nous pouvons aussi déduire que  $\mathcal{U}(\vec{a}) = \mathcal{U}(\vec{A})/\mathcal{M}$  avec  $\vec{a} = \vec{A}/\mathcal{M}$ . La fonction  $\mathcal{U}$  qui a pour argument  $\vec{a}$ , fonction homogène de degré 0, est la densité massique de l'énergie interne  $u$  :  $u(\vec{a}) = \mathcal{U}(\vec{A})/\mathcal{M}$ . En divisant la relation  $\mathcal{U} = -p\mathcal{V} + T\mathcal{S} + \sum \mathcal{M}_k \mu_k$  par  $\mathcal{M}$ , on obtient l'égalité massique  $u = -p\nu + Ts + \sum c_k \mu_k$  dans laquelle  $\nu = \mathcal{V}/\mathcal{M} > 0$  est le volume massique,  $s = \mathcal{S}/\mathcal{M}$  est l'entropie massique et  $c_k = \mathcal{M}_k/\mathcal{M}$  est la concentration massique du constituant k. On a évidemment  $\sum c_k = 1$  et donc seules q - 1 concentrations sont indépendantes. On pose  $C = (c_1, \dots, c_{q-1})$ .

En combinant la différentielle de l'égalité  $\mathcal{U} = -p\mathcal{V} + T\mathcal{S} + \sum \mathcal{M}_k \mu_k$  avec celle donnée par la relation de Gibbs, on obtient :  $\mathcal{V}dp - \mathcal{S}dT - \sum \mathcal{M}_k d\mu_k = 0$ , ou encore, en divisant par  $\mathcal{M}$  :

$\nu dp - s dT - \sum c_k d\mu_k = 0$ , c'est la relation de Gibbs-Duhem qui montre que si on fixe les grandeurs extensives  $\mathcal{V}$ ,  $\mathcal{S}$  et les masse  $\mathcal{M}_k$ , les grandeurs intensives  $p$ ,  $T$  et les  $\mu_k$  deviennent interdépendantes. En différenciant  $u = -p\nu + Ts + \sum c_k \mu_k$  et en considérant la dernière égalité, il vient :  $du = -p d\nu + T ds + \sum \mu_k dc_k$  ; c'est la relation de Gibbs, en termes des grandeurs massiques, dont on aura besoin par la suite pour annoncer le postulat de l'état local.

Revenons maintenant à la relation d'Euler  $\mathcal{U} = -p\mathcal{V} + T\mathcal{S} + \sum \mathcal{M}_k \mu_k$ . En introduisant l'enthalpie libre  $\mathcal{G} = \mathcal{U} + p\mathcal{V} - T\mathcal{S}$ , il vient :  $\mathcal{G} = \sum \mathcal{M}_k \mu_k$ . En remplaçant dans la relation de Gibbs  $\mathcal{U}$  par  $\mathcal{G} - p\mathcal{V} + T\mathcal{S}$ , on obtient :  $d\mathcal{G} = \mathcal{V} dp - \mathcal{S} dT + \sum \mu_k d\mathcal{M}_k$ . Pour un état thermodynamique défini par  $(p, T, \mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_q)$ , on a ainsi  $\mu_k = \partial_{\mathcal{M}_k} \mathcal{G}(p, T, \mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_q)$ , et par conséquent :  $\mathcal{G}(p, T, \mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_q) = \sum \mathcal{M}_k \partial_{\mathcal{M}_k} \mathcal{G}$ . Cette propriété ne concerne pas seulement  $\mathcal{G}$  mais elle est propre à toute grandeur extensive  $\Phi(p, T, \mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_q) = \mathcal{M} \varphi$  de densité massique  $\varphi(p, T, C)$ . En désignant par  $\bar{\varphi}_k(p, T, C) = \partial_{\mathcal{M}_k} \Phi$  la dérivée partielle de  $\Phi$  par rapport à  $\mathcal{M}_k$ , qui est une fonction homogène de degré 0, il vient :

$$\varphi(p, T, C) = \sum c_k \bar{\varphi}_k(p, T, C) \quad (1.1)$$

Sachant que  $\mathcal{M} \partial_{\mathcal{M}_k} c_j = -c_j$  pour  $j \neq k$  et que  $\mathcal{M} \partial_{\mathcal{M}_k} c_k = 1 - c_k$ , il est simple de montrer que  $\bar{\varphi}_k$  vérifie, pour  $k = 1$  à  $q - 1$ , l'égalité suivante :

$$\bar{\varphi}_k = \varphi + \partial_{c_k} \varphi - \sum c_j \partial_{c_j} \varphi \quad (1.2)$$

et que

$$\bar{\varphi}_k - \bar{\varphi}_q = \partial_{c_k} \varphi \quad (1.3)$$

## 2 Le cadre des mélanges fluides isotropes

Ce cadre est abordé dans la littérature (Fer [8], Truesdell [9], Wilmanski [10], Drew and Passman [11], Jakobsen [12]...) selon principalement deux approches macroscopiques : une approche à l'échelle du mélange comme celle proposée par Fer [8], et une approche constituant par constituant comme celle proposée, par exemple, par Truesdell [9]. L'avantage de considérer les constituants est qu'on a une meilleure compréhension des axiomes sur lesquels se base *in fine* les équations de bilan du mélange. Quoi qu'il en soit, nous avons toujours besoin de l'approche constituant par constituant ne serait-ce que pour le bilan de masse de chaque constituant. Dans la suite, nous allons combiner ces deux approches afin d'avoir une meilleure compréhension des phénomènes physiques mis en jeu.

Le milieu fluide étudié est composé de  $q$  constituants identifiables, distribués de façon continue et qui peuvent avoir des mouvements différents. Toute partie finie d'un tel milieu occupe à tout instant  $t$  un domaine  $\Omega(t)$  de l'espace de frontière  $\partial\Omega(t)$  régulière sur laquelle on définit une normale unitaire extérieure  $\vec{n}$  et un champ de vitesse  $\vec{\omega}$ . La continuité du mouvement du milieu se traduit par le fait qu'à chaque instant  $t$  et autour de tout point  $\vec{x}$  de  $\Omega(t)$  on peut construire un domaine élémentaire  $\delta\Omega(t)$  de volume  $\delta\mathcal{V}$  et associer à chaque constituant  $k$  de la matière contenue dans  $\delta\Omega(t)$  une masse volumique  $\rho_k$  et une vitesse macroscopique  $\vec{v}_k$ . La masse totale élémentaire occupant  $\delta\mathcal{V}$  étant la somme des masses élémentaires  $\delta m_k = \rho_k \delta\mathcal{V}$ , on en déduit donc une masse volumique du mélange  $\rho = \sum \rho_k$  et, pour le constituant  $k$ , une concentration massique  $c_k = \rho_k / \rho$ .

Dans un milieu réactif, le taux de variation de la masse totale  $\mathcal{M}_k(t) = \int_{\Omega(t)} \rho_k d\mathcal{V}$  du constituant  $k$  en le suivant dans son mouvement s'écrit :

$$D\mathcal{M}_k(t)/D_k t = \int_{\Omega(t)} \pi_k d\mathcal{V} \quad (1.4)$$

où  $\pi_k$  est le taux de production (destruction) du constituant  $k$  par l'ensemble des réactions chimiques qui peuvent se produire entre les constituants. L'opérateur  $D/D_k t$  de dérivation par rapport au temps est relatif au mouvement du constituant  $k$  défini par le champ de vitesse  $\vec{v}_k(\vec{x}, t)$ .

En suivant le mouvement de  $\Omega$ , défini par celui de sa frontière  $\partial\Omega$ , le taux de variation de  $\mathcal{M}_k$  peut alors s'écrire, compte tenu de (1.4), sous la forme :

$$d\mathcal{M}_k(t)/dt = \int_{\Omega(t)} \pi_k d\mathcal{V} - \int_{\partial\Omega(t)} \rho_k (\vec{v}_k - \vec{\omega}) \cdot \vec{n} d\mathcal{A} \quad (1.5)$$

L'addition terme à terme des égalités (1.5) pour  $k = 1$  à  $q$  établit l'équation de bilan de la masse totale du mélange  $\mathcal{M} = \sum \mathcal{M}_k$  :

$$d\mathcal{M}(t)/dt = \int_{\Omega(t)} \sum \pi_k d\mathcal{V} - \int_{\partial\Omega(t)} \left( \sum \rho_k \vec{v}_k - \rho \vec{\omega} \right) \cdot \vec{n} d\mathcal{A} \quad (1.6)$$

Cette égalité montre que la variation de la masse totale  $\mathcal{M}$ , à l'instar de l'égalité (1.5) relative au seul constituant  $k$ , n'est pas due seulement aux réactions chimiques mais aussi aux mouvements des constituants par rapport au domaine.

En l'absence de mouvement ( $\vec{v}_k = \vec{0} \forall k$  et  $\vec{\omega} = \vec{0}$ ), il est communément admis, en chimie, que, tant que la matière ne se transforme pas en énergie ni l'énergie en matière, les réactions chimiques sont régies par des règles avec conservation de la masse (la masse reçue par un constituant est égale à celle perdue par les autres), d'où  $\sum \pi_k = 0$ . En admettant ce résultat y compris pour les milieux en mouvement, l'égalité (1.6) devient :

$$d\mathcal{M}(t)/dt = - \int_{\partial\Omega(t)} \left( \sum \rho_k \vec{v}_k - \rho \vec{\omega} \right) \cdot \vec{n} d\mathcal{A} \quad (1.7)$$

qui fait apparaître la quantité  $\rho \vec{v} = \sum \rho_k \vec{v}_k$  pour laquelle il suffit de prendre  $\vec{\omega} = \vec{v} + \vec{W}/\rho$  où  $\vec{W}$  est tel que  $\vec{\nabla} \cdot \vec{W} = 0$  pour assurer la conservation de la masse totale. Par conséquent, en introduisant cette vitesse on se retrouve exactement comme pour le cas d'un fluide monoconstituant<sup>1</sup> ; la seule et unique différence est que l'existence d'un tel champ est énoncée par simple définition sans en imposer l'unicité.

Nous pouvons aussi faire apparaître cette vitesse barycentrique  $\vec{v}$  en considérant la quantité de mouvement qui, comme la masse, est une grandeur extensive. Pour un constituant  $k$ , sa quantité de mouvement contenue à l'instant  $t$  dans le domaine  $\Omega$  s'écrit :  $\vec{\mathcal{Q}}_k(t) = \int_{\Omega(t)} \rho_k \vec{v}_k d\mathcal{V}$ . En sommant par rapport à  $k$  et en posant  $\vec{\mathcal{Q}}(t) = \sum \vec{\mathcal{Q}}_k(t)$ , il vient :  $\vec{\mathcal{Q}}(t) = \int_{\Omega(t)} \sum \rho_k \vec{v}_k d\mathcal{V}$  et par conséquent, en posant  $\rho \vec{v} = \sum \rho_k \vec{v}_k$ , cela fait apparaître la vitesse  $\vec{v}$  comme la densité massique de la quantité de mouvement associée à la matière contenue à l'instant  $t$  dans le domaine  $\Omega$ .

Par ailleurs, comme pour la masse  $\mathcal{M}_k$  et la quantité de mouvement  $\vec{\mathcal{Q}}_k$ , nous pouvons aussi associer au constituant  $k$  contenu à l'instant  $t$  dans le domaine  $\Omega$  une énergie interne  $\mathcal{U}_k = \int_{\Omega(t)} \rho_k u_k d\mathcal{V}$ , une entropie  $\mathcal{S}_k = \int_{\Omega(t)} \rho_k s_k d\mathcal{V}$  et une énergie cinétique  $\mathcal{K}_k = \int_{\Omega(t)} \rho_k \vec{v}_k \cdot \vec{v}_k / 2 d\mathcal{V}$  où les deux densités massiques  $u_k$  et  $s_k$  sont des fonctions de l'état thermodynamique que nous ne cherchons pas, pour l'instant, à préciser. L'énergie totale du

1. Pour un fluide monoconstituant, l'équation (1.4) devient  $d\mathcal{M}(t)/dt = - \int_{\partial\Omega(t)} \rho (\vec{v} - \vec{\omega}) \cdot \vec{n} d\mathcal{A}$  puisque le terme de production de masse  $\pi$  est nul car il résulte uniquement d'échange de matière avec les autres constituants.



constituant  $k$  contenu à l'instant  $t$  dans le domaine  $\Omega$  est  $\mathcal{E}_k(t) = \int_{\Omega(t)} \rho_k (u_k + \vec{v}_k \cdot \vec{v}_k / 2) d\mathcal{V}$ . En sommant par rapport à  $k$  et en posant  $\mathcal{E}(t) = \sum \mathcal{E}_k(t)$  et  $\vec{w}_k = \vec{v}_k - \vec{v}$ , il vient :  $\mathcal{E}(t) = \int_{\Omega(t)} \rho e d\mathcal{V}$  avec  $e = \vec{v} \cdot \vec{v} / 2 + \sum c_k u_k + \sum c_k \vec{w}_k \cdot \vec{w}_k / 2$  est la densité massique de l'énergie totale  $\mathcal{E}(t)$ ; elle fait apparaître l'énergie cinétique de diffusion  $\sum c_k \vec{w}_k \cdot \vec{w}_k / 2$ . Selon l'approche de Fer [8], les vitesses relatives  $\vec{w}_k$  sont généralement faibles devant la vitesse barycentrique et l'énergie cinétique de diffusion peut être négligée devant celle associée au mouvement barycentrique. En revanche, selon Truesdell [9], l'énergie cinétique de diffusion est à affecter à l'énergie interne : ceci est en accord avec la théorie cinétique des mélanges de gaz (Truesdell [9]). En adoptant cette approche, on peut donc écrire que :

$$e = u + k, \quad u = \sum (c_k u_k + c_k \vec{w}_k \cdot \vec{w}_k), \quad k = \vec{v} \cdot \vec{v} / 2 \quad (1.8)$$

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{U}(t) + \mathcal{K}(t), \quad \mathcal{K}(t) = \int_{\Omega(t)} \rho k d\mathcal{V}, \quad \mathcal{U}(t) = \int_{\Omega(t)} \rho u d\mathcal{V} \quad (1.9)$$

Les deux grandeurs  $u$  et  $k$  représentent les densités massiques de l'énergie du mélange respectivement interne et cinétique.

La définitions de l'énergie interne par l'égalité (1.8)<sub>2</sub> mérite qu'on s'y attarde un peu. D'un côté, lorsque le milieu est en équilibre thermostatique (les flux de diffusion sont nuls), nous avons montré déjà que nous pouvons exprimer l'énergie interne  $u(p, T, C)$  sous la forme  $u = \sum c_k \bar{u}_k$ . Est-il donc correct d'en conclure que forcément  $u_k = \bar{u}_k$ ? La réponse mathématique à cette interrogation est non. En effet, si on en reste à la relation d'Euler, la décomposition  $u(p, T, C) = \sum c_k \bar{u}_k$  n'est pas unique car on peut toujours poser  $u_k = \bar{u}_k + \sum A_{kj}(p, T, C)$  avec  $c_k A_{kj} = -c_j A_{jk}$  de sorte que  $\sum c_k \bar{u}_k = \sum c_k u_k$  sans que  $u_k$  ne soit égale à  $\bar{u}_k$ . Si nous voulons rapprocher l'égalité d'Euler  $u = \sum c_k \bar{u}_k$  avec celle portant sur les  $u_k$ , la condition pour que  $\bar{u}_k = u_k$  est que les  $u_k$  vérifient les égalités suivantes :  $\sum c_j \partial_{c_k} u_j = 0$  pour  $k = 1$  à  $q - 1$ .

D'un autre côté, et indépendamment de l'hypothèse faite concernant l'énergie cinétique de diffusion, la variation de l'énergie totale  $e$ , qui doit rentrer dans l'énoncé du premier principe de la thermodynamique associé au mélange, ne sera connue, d'après (1.8)<sub>1</sub>, qu'à une combinaison linéaire près des  $dc_k$  pour  $k = 1$  à  $q - 1$ . En effet, les énergies internes  $u_k$  sont des fonctions de l'état thermodynamique que l'on suppose connues à une constante additive près. En écrivant, pour chaque constituant  $k$ ,  $u_k$  sous la forme :  $u_k = u_{k0} + \tilde{u}_k$  où  $\tilde{u}_k$  est une fonction connue, il vient :  $\sum c_k u_k = u_{q0} + \sum c_k u_{k0}^* + \tilde{u}$  où  $\tilde{u} = \tilde{u}_q + \sum c_k \tilde{u}_k^*$  est une fonction connue, avec, pour une fonction  $\varphi_k$ ,  $\varphi_k^* = \varphi_k - \varphi_q$  et  $\varphi_q^* = 0$ . En termes de différentielle, on obtient donc :  $d(\sum c_k u_k) = \sum u_{k0}^* dc_k + d\tilde{u}$ . En cas de réaction chimique et/ou changement de phase, ces  $q - 1$  constantes  $u_{k0}^*$  doivent faire partie des données du problème. Dans le cas contraire, elles doivent disparaître grâce à la conservation de la masse, mais encore faut-il que le premier principe soit énoncé en ce sens.

## 2.1 Les équations de bilan

Nous allons, pour chaque équation de bilan, procéder à deux écritures : une relative à un constituant  $k$  que l'on suit dans son mouvement et une deuxième relative au mélange que l'on suit dans le mouvement barycentrique. La vitesse barycentrique, déduite de l'analyse précédente, est telle que :

$$\vec{v} = \sum c_k \vec{v}_k \quad (1.10)$$

Pour suivre le mouvement d'un constituant, nous avons déjà introduit l'opérateur de dérivation par rapport au temps  $D/D_k t$  associé à un référentiel tel que  $\vec{\omega} = \vec{v}_k$ . Pour suivre le

mouvement d'ensemble, nous avons également besoin de définir un opérateur de dérivation par rapport au temps associé à un référentiel tel que, cette fois-ci,  $\vec{\omega} = \vec{v}$ . Cet opérateur sera noté par  $D/Dt$ . Pour une grandeur extensive  $\Phi_k(t) = \int_{\Omega(t)} \rho_k \varphi_k d\mathcal{V}$  de densité massique  $\varphi_k(\vec{x}, t)$ , le lien entre les deux opérateurs est immédiat :

$$D\Phi_k/Dt = D\Phi_k/D_k t - \int_{\partial\Omega} \rho_k \varphi_k \vec{w}_k \cdot \vec{n} d\mathcal{A} \quad (1.11)$$

En additionnant terme à terme les égalités (1.11) pour  $k = 1$  à  $q$ , on obtient :

$$D\left(\sum \Phi_k\right)/Dt = \sum D\Phi_k/D_k t - \int_{\partial\Omega} \sum \rho_k \varphi_k \vec{w}_k \cdot \vec{n} d\mathcal{A} \quad (1.12)$$

Par ailleurs, le taux de variation d'une grandeur extensive  $\Phi(t) = \int_{\Omega(t)} \rho \varphi d\mathcal{V}$  de densité massique  $\varphi(\vec{x}, t)$ , en tant que second membre décrété par les lois de la physique, suit généralement le modèle classique des milieux continus qui se décompose en une partie volumique exercée à distance et une partie surfacique le long de la frontière du domaine :

$$D\Phi(t)/Dt = \int_{\Omega(t)} \gamma d\mathcal{V} - \int_{\partial\Omega(t)} \vec{\Gamma} \cdot \vec{n} d\mathcal{A} \quad (1.13)$$

où  $\gamma$  est une densité volumique de source et  $\vec{\Gamma}$  est une densité surfacique de flux<sup>1</sup>. L'opérateur de dérivation  $D/Dt$  est relatif soit au mouvement des particules dans le cas d'un milieu monoconstituant soit au mouvement barycentrique dans le cas d'un mélange.

La forme locale eulérienne (conservative) de l'équation (1.13) peut s'écrire sous la forme :  $\partial_t(\rho\varphi) + \vec{\nabla} \cdot (\rho\varphi \vec{v} + \vec{\Gamma}) = \gamma$ . En particulier pour  $\varphi = 1$ , autrement dit  $\Phi$  est la masse  $\mathcal{M}$  contenue à l'instant  $t$  dans le domaine  $\Omega$ , et lorsque  $\mathcal{M}$  se conserve ( $\gamma = 0$  et  $\vec{\Gamma} = \vec{0}$ ), on obtient :  $\partial_t\rho + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0$ . Par conséquent, pour une grandeur massique  $\varphi(\vec{x}, t)$ , si on introduit sa dérivée particulaire  $\dot{\varphi} = D\varphi/Dt = \vec{\nabla} \varphi \cdot \vec{v} + \partial_t\varphi$ , on aboutit à l'égalité :  $\rho\dot{\varphi} = \partial_t(\rho\varphi) + \vec{\nabla} \cdot (\rho\varphi \vec{v})$  qui par intégration sur  $\Omega(t)$  donne :  $D\Phi/Dt = \int_{\Omega(t)} \rho\dot{\varphi} d\mathcal{V}$ . En la combinant avec la forme eulérienne, on obtient la forme locale lagrangienne (particulaire) suivante :  $\rho\dot{\varphi} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\Gamma} = \gamma$ . Son intégration sur le domaine  $\Omega(t)$  donne :

$$- \int_{\partial\Omega(t)} \vec{\Gamma} \cdot \vec{n} d\mathcal{A} = \int_{\Omega(t)} (\rho\dot{\varphi} - \gamma) d\mathcal{V} \quad (1.14)$$

qui peut constituer lorsque  $D\mathcal{M}/Dt = 0$  et en l'absence de sens physique clair pour le vecteur flux  $\vec{\Gamma}$ , juste une définition de celui-ci.

### 2.1.1 Bilan de la masse

Nous avons déjà annoncé le bilan de masse du constituant  $k$  en le suivant dans son mouvement (égalité 1.4). Dans le mouvement barycentrique, en introduisant  $\vec{v}$  dans (1.5) et (1.7), il vient :

$$D\mathcal{M}_k(t)/Dt = \int_{\Omega(t)} \pi_k d\mathcal{V} - \int_{\partial\Omega(t)} \rho_k \vec{w}_k \cdot \vec{n} d\mathcal{A} \quad (1.15)$$

$$D\mathcal{M}(t)/Dt = 0 \quad (1.16)$$

1. Le signe  $-$  dans l'égalité (1.13) est lié au fait que  $\Phi$  décroisse lorsque le flux est sortant ( $\vec{\Gamma} \cdot \vec{n} \geq 0$ ), la normale  $\vec{n}$  étant orientée vers l'extérieur de  $\Omega(t)$



La masse totale du mélange  $\mathcal{M}(t) = \int_{\Omega(t)} \rho d\mathcal{V}$  reste ainsi constante dans la transformation cinématique de  $\Omega$  défini par le champ barycentrique  $\vec{v}$ , et ceci bien que le domaine ne soit pas constitué tout le temps par les mêmes molécules : d'une part les intégrales  $\int_{\partial\Omega(t)} \rho_k \vec{w}_k \cdot \vec{n} d\mathcal{A}$  ne sont pas toutes nulles, et d'autre part à cause des réactions chimiques entre les constituants.

En rapprochant (1.15) de l'égalité (1.13), il en résulte alors l'identification suivante :  $\Phi = \mathcal{M}_k = \int_{\Omega(t)} \rho c_k d\mathcal{V}$ ,  $\varphi = c_k$ ,  $\gamma = \pi_k$  et  $\vec{\Gamma} = \rho \vec{J}_k$ . D'où :

$$- \int_{\partial\Omega(t)} \rho \vec{J}_k \cdot \vec{n} d\mathcal{A} = \int_{\Omega(t)} (\rho \dot{c}_k - \pi_k) d\mathcal{V} \quad (1.17)$$

La vitesse  $\vec{J}_k = c_k(\vec{v}_k - \vec{v})$  est la vitesse de diffusion du constituant  $k$  dans le mélange. Sa signification physique est claire. À travers une surface élémentaire  $\delta\mathcal{A}$  de normale  $\vec{n}$ , le flux de masse  $\rho_k \vec{v}_k \cdot \vec{n} \delta\mathcal{A}$  du constituant  $k$  se décompose en un flux de convection  $\rho_k \vec{v} \cdot \vec{n} \delta\mathcal{A}$  dû au mouvement barycentrique et un flux de diffusion  $\rho_k(\vec{v}_k - \vec{v}) \cdot \vec{n} \delta\mathcal{A}$ . Ce qui se traduit, pour tout vecteur  $\vec{n}$ , par l'égalité :  $c_k \vec{v}_k \cdot \vec{n} = c_k \vec{v} \cdot \vec{n} + \vec{J}_k \cdot \vec{n}$ . De par sa définition,  $\vec{J}_k$  vérifie  $\sum \vec{J}_k = \vec{0}$ . Par conséquent, il n'y a que  $q - 1$  vitesses de diffusions qui sont indépendantes.

Sous forme locale, l'équation (1.17) devient :

$$\rho \dot{c}_k + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{J}_k) = \pi_k \quad (1.18)$$

Pour la conservation de la masse du mélange, nous avons déjà établi que :

$$\dot{\rho} + \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \quad (1.19)$$

### 2.1.2 Bilan de la quantité de mouvement

La résultante  $\vec{\mathcal{F}}_k$  des forces exercées sur le constituant  $k$  contenu à l'instant  $t$  dans le domaine  $\Omega$  peut se mettre sous la forme :  $\vec{\mathcal{F}}_k(t) = \int_{\Omega(t)} (\rho_k \vec{g} + \sum \vec{a}_{j/k}) d\mathcal{V} + \int_{\partial\Omega(t)} \underline{\sigma}_k \vec{n} d\mathcal{A}$  qui regroupe respectivement l'action de la pesanteur, les forces exercées par les autres constituants et les forces de contact à travers la frontière du domaine. L'équation de bilan de la quantité de mouvement s'écrit alors :

$$D\vec{\mathcal{Q}}_k(t)/D_k t = \vec{\mathcal{F}}_k(t) \quad (1.20)$$

En sommant par rapport à  $k$  et en supposant que  $\sum \sum \vec{a}_{j/k} = \vec{0}$ , il en résulte, compte tenu de (1.12) :

$$D\vec{\mathcal{Q}}(t)/Dt = \int_{\Omega(t)} \rho \vec{g} d\mathcal{V} + \int_{\partial\Omega(t)} \underline{\sigma} \vec{n} d\mathcal{A} \quad (1.21)$$

avec

$$\underline{\sigma} = \sum (\underline{\sigma}_k - \rho_k \vec{w}_k \otimes \vec{w}_k) \quad (1.22)$$

Pour un domaine matériel (constitué à chaque instant par les mêmes particules physiques), le champ de contrainte  $\underline{\sigma}$  à une signification physique très claire : il est tel que  $\int_{\partial\Omega} \underline{\sigma} \vec{n} d\mathcal{A}$  est la résultante des forces de contact exercées par l'extérieur de  $\Omega$  sur la matière contenue dans  $\Omega$ . Lorsque le milieu est le siège de flux de diffusion, l'égalité (1.21) suggère simplement l'existence d'un tenseur  $\underline{\sigma}$  qui, dans le mouvement barycentrique, possède exactement les mêmes propriétés que dans le cas d'un milieu simple. Sa signification physique est en revanche loin d'être évidente puisque, d'après (1.22),  $\underline{\sigma}$  résulte non seulement des contributions partielles  $\underline{\sigma}_k$  qui, d'ailleurs, ne sont pas accessibles à la mesure, mais également des vitesses relatives  $\vec{w}_k$ .

L'identification de (1.21) à (1.13) donne :  $\vec{\Phi} = \vec{\mathcal{Q}}(t) = \int_{\Omega(t)} \rho \vec{v} d\mathcal{V}$ ,  $\vec{\varphi} = \vec{v}$ ,  $\vec{\gamma} = \rho \vec{g}$  et  $\underline{\underline{\Gamma}} = -\underline{\underline{\sigma}}$ . D'où :

$$\int_{\partial\Omega(t)} \underline{\underline{\sigma}} \vec{n} d\mathcal{A} = \int_{\Omega(t)} \rho (\dot{\vec{v}} - \vec{g}) d\mathcal{V} \quad (1.23)$$

Sous forme locale, l'équation (1.23) devient :

$$\rho \dot{\vec{v}} - \vec{\nabla} \cdot \underline{\underline{\sigma}} = \rho \vec{g} \quad (1.24)$$

Ce qui permet d'obtenir, en multipliant scalairement (1.24) par  $\vec{v}$ , l'équation de conservation de l'énergie cinétique  $k = \vec{v} \cdot \vec{v} / 2$  :

$$\rho \dot{k} - \vec{\nabla} \cdot (\underline{\underline{\sigma}} \vec{v}) = \rho \vec{g} \cdot \vec{v} - \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\nabla}} \vec{v} \quad (1.25)$$

L'intégration de (1.25) sur le domaine  $\Omega(t)$  conduit alors à la forme intégrale du bilan de l'énergie cinétique  $\mathcal{K}(t) = \int_{\Omega(t)} \rho k d\mathcal{V}$  :

$$D\mathcal{K}(t)/Dt = \int_{\Omega(t)} \rho \vec{g} \cdot \vec{v} d\mathcal{V} + \int_{\partial\Omega(t)} \underline{\underline{\sigma}} \vec{n} \cdot \vec{v} d\mathcal{A} - \int_{\Omega(t)} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\nabla}} \vec{v} d\mathcal{V} \quad (1.26)$$

### 2.1.3 Bilan de l'énergie totale - le premier principe

La puissance mécanique développée par la résultante  $\vec{\mathcal{F}}_k$  des forces exercées sur le constituant k est :  $\mathcal{P}_k^{mec}(t) = \int_{\Omega(t)} (\rho_k \vec{g} + \sum \vec{a}_{j/k}) \cdot \vec{v}_k d\mathcal{V} + \int_{\partial\Omega(t)} \underline{\underline{\sigma}}_k \vec{n} \cdot \vec{v}_k d\mathcal{A}$ . Quant à la puissance thermique, elle peut prendre la forme suivante :  $\mathcal{P}_k^{the}(t) = \int_{\Omega(t)} r_k d\mathcal{V} - \int_{\partial\Omega(t)} \vec{\psi}_k \cdot \vec{n} d\mathcal{A}$  qui regroupe respectivement, comme pour un milieu simple, un terme volumique de densité  $r_k$  et un terme surfacique de densité  $\vec{\psi}_k$ . L'équation de bilan de l'énergie totale (premier principe) s'écrit alors :

$$D\mathcal{E}_k(t)/D_k t = \mathcal{P}_k^{mec}(t) + \mathcal{P}_k^{the}(t) \quad (1.27)$$

En sommant par rapport à k, il en résulte, compte tenu de (1.12) :

$$D\mathcal{E}(t)/Dt = \int_{\Omega(t)} (\rho \vec{g} \cdot \vec{v} + r) d\mathcal{V} - \int_{\partial\Omega(t)} (\vec{\Psi}_u - \underline{\underline{\sigma}} \vec{v}) \cdot \vec{n} d\mathcal{A} \quad (1.28)$$

avec

$$r = \sum (r_k + \sum \vec{a}_{j/k} \cdot \vec{w}_k), \quad \vec{\Psi}_u = \sum (\vec{\psi}_k - \underline{\underline{\sigma}}_k \vec{w}_k + \rho_k (u_k + \vec{w}_k \cdot \vec{w}_k / 2) \vec{w}_k) \quad (1.29)$$

Le bilan de l'énergie totale exprimé dans le mouvement barycentrique a donc la même forme classique que pour un milieu simple avec toutefois une modification importante du contenu physique des termes  $r$  et  $\vec{\Psi}_u$ . Alors que pour un milieu simple ils signifient des actions précises : à distance de type rayonnement pour  $r$  et de contact à travers la frontière du domaine, exprimant un transfert de chaleur par conduction, pour  $\vec{\Psi}_u$ , ce n'est plus le cas pour le milieu multiconstituant siège de flux de diffusion comme le montre les équations (1.29).

En soustrayant les deux égalités (1.28) et (1.26) membre à membre, on obtient le bilan de l'énergie interne :

$$D\mathcal{U}(t)/Dt = \int_{\Omega(t)} r d\mathcal{V} - \int_{\partial\Omega(t)} \vec{\Psi}_u \cdot \vec{n} d\mathcal{A} + \int_{\Omega(t)} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\nabla}} \vec{v} d\mathcal{V} \quad (1.30)$$

L'identification de (1.30) à (1.13) donne :  $\Phi = \mathcal{U}(t) = \int_{\Omega(t)} \rho u d\mathcal{V}$ ,  $\varphi = u$ ,  $\gamma = r + \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\nabla}} \vec{v}$  et  $\vec{\Gamma} = \vec{\Psi}_u$ . D'où :

$$- \int_{\partial\Omega(t)} \vec{\Psi}_u \cdot \vec{n} d\mathcal{A} = \int_{\Omega(t)} (\rho \dot{u} - r - \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\nabla}} \vec{v}) d\mathcal{V} \quad (1.31)$$

Sous forme locale, les équations (1.28) et (1.31) deviennent :

$$\rho \dot{e} + \underline{\underline{\nabla}} \cdot (\vec{\Psi}_u - \underline{\underline{\sigma}} \vec{v}) = \rho \vec{g} \cdot \vec{v} + r \quad (1.32)$$

$$\rho \dot{u} + \underline{\underline{\nabla}} \cdot \vec{\Psi}_u = r + \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\nabla}} \vec{v} \quad (1.33)$$

### 2.1.4 Synthèse des trois bilans

Identifier expérimentalement les effets liés à chaque constituant et établir des lois constitutives pour les grandeurs partielles telles que  $\underline{\underline{\sigma}}_k$  et  $\vec{\psi}_k$  semble irréalisable dans le cadre d'une approche par constituant. Cela nous amène donc à considérer le problème d'évolution thermodynamique du mélange dans le cadre du mouvement barycentrique dont les égalités (1.17), (1.23) et (1.31) ne constituent, pour l'instant, que des définitions des champs  $\vec{J}_k$ ,  $\underline{\underline{\sigma}}$  et  $\vec{\Psi}_u$ . L'unicité de ces champs n'est pas forcément assurée et leur pertinence ne sera établie que par le recours au second principe de la thermodynamique. Mais avant cela, encore faut-il définir l'état thermodynamique, à tout le moins tenter d'en préciser les hypothèses relatives à un choix donné.

## 2.2 État thermodynamique local

Nous évoquons pour cela le postulat de l'état local qui, pour un milieu ouvert qu'on suit dans une transformations purement cinématique telle que celle définie par la vitesse barycentrique, n'est pas aussi simple à admettre que pour un milieu matériellement fermé.

### 2.2.1 Le postulat de l'état local pour un milieu matériellement fermé

Soit, à un instant  $t$ , une particule matérielle<sup>1</sup> du milieu continu définie par le domaine élémentaire  $\delta\Omega(t)$ , de volume  $\delta\mathcal{V}$  et de masse  $\delta\mathcal{M}$ , qu'elle occupe à cet instant autour d'un point macroscopique  $\vec{x} \in \Omega(t)$  qui se trouve à un instant de référence ( $t = 0$ ) au point  $\vec{x}_0 \in \Omega(0)$ . Si on suit la particule dans son mouvement, sa masse  $\delta\mathcal{M}$  reste invariante. Par conséquent, pour un observateur lié à la particule qui observe toujours les mêmes molécules et qui constate, à tout instant, l'invariance de la masse, tout se passe pour lui comme en thermostatique des systèmes fermés et il peut attribuer à la particule de masse  $\delta\mathcal{M} = \rho\delta\mathcal{V}$  une énergie interne  $u\delta\mathcal{M}$  et une entropie  $s\delta\mathcal{M}$ . Le postulat de l'état local consiste alors à admettre que, à tout instant  $t$  et en tout point  $\vec{x}$ , la grandeur  $u(\vec{x}, t)$  est une fonction connue de l'état thermodynamique défini par les variables d'état  $\nu$  et  $s$  :  $u(\vec{x}, t) = u(\nu(\vec{x}, t), s(\vec{x}, t))$ . Les variables intensives  $p$  et  $T$  (en équilibre avec l'extérieur de la particule) sont alors telles que, comme en thermostatique, toute variation de  $\nu$  et de  $s$  induit une variation de  $u$  de sorte que :  $du = -pd\nu + Tds$ . D'un autre côté, la différentielle de  $\vec{x}(\vec{x}_0, t)$  en tant que fonction de  $\vec{x}_0$  et de  $t$  s'écrit :  $d\vec{x} = \underline{\underline{F}}d\vec{x}_0 + \vec{v}dt$  où  $\underline{\underline{F}}$  est le gradient de la transformation et  $\vec{v} = \partial_t \vec{x}$  est la vitesse de la particule, ce qui amène, pour une fonction  $\phi(\vec{x}, t)$  du point  $\vec{x}(\vec{x}_0, t)$  et du temps  $t$ , à écrire sa différentielle sous la forme  $d\phi = \underline{\underline{\nabla}} \phi \cdot \underline{\underline{F}}d\vec{x}_0 + \dot{\phi}dt$ . Donc, si nous suivons

1. La particule matérielle est la matière occupant, à un instant donné, un volume infinitésimal  $\delta\mathcal{V}$  suffisamment grand pour contenir un très grand nombre de molécules et suffisamment petit pour avoir un caractère ponctuel à l'échelle macroscopique du problème étudié.

la même particule ( $d\vec{x}_0 = \vec{0}$ ), il résulte que, pendant l'intervalle de temps  $dt$ , la particule s'est déplacé de  $d\vec{x} = \vec{v}dt$  et  $d\phi = \dot{\phi}dt$ . Il vient par conséquent :  $\dot{u} = -p\dot{\nu} + T\dot{s}$ . Ainsi, avec le postulat de l'état local, la différentiation  $d$  qui figure dans les lois de la thermostatique devient relative au mouvement de la particule.

## 2.2.2 Le postulat de l'état local pour un milieu multiconstituant et réactif

La particule, occupant à l'instant  $t$  le domaine élémentaire  $\delta\Omega(t)$  autour du point  $\vec{x}$ , dont il est question précédemment, devient, cette fois-ci, un mélange de  $q$  constituants dont la masse de chacun est une fraction de la masse totale de la particule :  $\delta\mathcal{M}_k = c_k\delta\mathcal{M}$ , avec  $\delta\mathcal{M} = \rho\delta\mathcal{V}$  et  $\rho = \sum \rho_k$ . L'observateur lié à cette particule peut toujours considérer, à l'instant  $t$ , le système fermé coïncidant dont l'état thermodynamique peut être décrit, en plus du couple  $(\nu(\vec{x}, t), s(\vec{x}, t))$ , par les  $q - 1$  concentrations massiques  $c_k(\vec{x}, t)$ . Les variables intensives  $p$ ,  $T$  et  $\mu_k$  sont alors telles que, comme en thermostatique, toute variation de  $\nu$ , de  $s$  et de  $c_k$  induit une variation de  $u$  de sorte que :  $du = -pd\nu + Tds + \sum \mu_k dc_k$ . Les différentielles des fonctions  $u$ ,  $\nu$ ,  $s$  et  $c_k$ , en tant que fonction de  $\vec{x}$  et de  $t$ , s'écrivent sous la même forme que précédemment, sauf que, dans le cas présent et si on suit la particule dans le mouvement barycentrique, pendant l'intervalle de temps  $dt$ , la masse de chaque constituant  $k$  a changé soit par réaction chimique soit par diffusion (voir égalité 1.15). Autrement dit, et malgré l'invariance de la masse totale, l'observateur qui se déplace avec la vitesse barycentrique, ne verra pas, à tout instant, les mêmes molécules. En dépit de cette différence fondamentale avec les systèmes fermés, il est généralement admis que la relation de Gibbs est encore valable pour le système ouvert à condition de considérer la différentiation  $d$  qui y figure comme relative au mouvement barycentrique :  $d = (D/Dt)dt$ . Il vient :

$$\dot{u} = -p\dot{\nu} + T\dot{s} + \sum \mu_k^* \dot{c}_k \quad (1.34)$$

avec  $\mu_k^* = \mu_k - \mu_q$  et  $\mu_q^* = 0$ .

## 2.3 Bilan de l'entropie - le second principe

Contrairement aux autres bilans où nous partons des équations globales, nous allons ici, à l'instar de l'énergie cinétique, commencer tout d'abord par établir l'équation locale en partant de l'égalité (1.34).

Compte tenu des équations de bilan de masse (1.18) et (1.19), on obtient la relation suivante :  $\rho T \dot{s} = \rho \dot{u} + p \vec{\nabla} \cdot \vec{v} + \sum \mu_k^* \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{J}_k) - \sum \mu_k^* \pi_k$ , qui, en la combinant avec l'égalité (1.33), permet d'écrire :

$$\rho \dot{s} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{\Psi}_s / T) = r / T + \varpi / T \quad (1.35)$$

avec

$$\varpi = (\underline{\sigma} + p\underline{1}) : \underline{\nabla} \vec{v} - \vec{\Psi}_s \cdot \vec{\nabla} T / T - \sum \pi_k \mu_k^* - \sum \rho \vec{J}_k \cdot \vec{\nabla} \mu_k^* \quad (1.36)$$

$$\vec{\Psi}_s = \vec{\Psi}_u - \sum \rho \mu_k^* \vec{J}_k \quad (1.37)$$

Ainsi, en l'absence de réaction chimique et de diffusion ( $\pi_k = 0$  et  $\vec{J}_k = \vec{0}$ ), nous avons donc d'un côté  $\vec{\Psi}_s = \vec{\Psi}_u$ , et d'un autre côté  $\varpi = (\underline{\sigma} + p\underline{1}) : \underline{\nabla} \vec{v} - \vec{\Psi}_s \cdot \vec{\nabla} T / T$ , qui n'est autre que la dissipation volumique dont les seules sources d'irréversibilité sont le gradient de la vitesse et le gradient de la température. Pour un milieu mutli-constituant et réactif, en plus de ces deux sources, l'expression de  $\varpi$  fait apparaître deux autres termes qui sont simplement liés au fait que les  $\pi_k$  et les  $\vec{J}_k$  ne sont pas nuls. Ces deux termes expriment eux aussi

des phénomènes irréversibles : le terme  $\sum \pi_k \mu_k^*$  caractérise une irréversibilité chimique, et le terme  $\sum \rho \vec{J}_k \cdot \vec{\nabla} \mu_k^*$ , caractérise, quant à lui, une irréversibilité par phénomènes de diffusion. Dans l'équation (1.36), la quantité  $\varpi$  regroupe donc l'ensemble des phénomènes irréversibles potentiellement sources de génération interne d'entropie. En l'absence d'irréversibilité, l'évolution de l'entropie ne peut être que le résultat des influences extérieures.

Par conséquent, si nous désignons par  $\mathcal{S}(t) = \int_{\Omega(t)} \rho s d\mathcal{V}$  l'entropie, de densité massique  $s$ , associée à la matière contenue à l'instant  $t$  dans le domaine  $\Omega$ , par  $\Pi_I$  le taux de production interne d'entropie, de densité volumique  $\varpi/T$ , qui résulte des phénomènes dissipatifs qui ont lieu à l'intérieur de  $\Omega$  et par  $\Pi_E$  le taux d'apport d'entropie, de densité volumique  $r/T - \vec{\nabla} \cdot (\vec{\Psi}_s/T)$ , qui résulte de l'interaction du domaine  $\Omega$  avec l'extérieur, l'équation de bilan de l'entropie, en suivant le domaine  $\Omega$  dans le mouvement barycentrique, s'écrit en intégrant l'équation locale (1.35) sur le domaine  $\Omega(t)$  :

$$D\mathcal{S}(t)/Dt = \Pi_I(t) + \Pi_E(t) \quad (1.38)$$

avec

$$\Pi_I(t) = \int_{\Omega(t)} (\varpi/T) d\mathcal{V} \quad (1.39)$$

$$\Pi_E(t) = \int_{\Omega(t)} (r/T) d\mathcal{V} - \int_{\partial\Omega(t)} (\vec{\Psi}_s/T) \cdot \vec{n} d\mathcal{A} \quad (1.40)$$

Selon le second principe, l'égalité (1.38), doit être complétée par la propriété suivante :  $\Pi_I(t)$  est strictement positif dès que le domaine  $\Omega(t)$  comporte une quelconque irréversibilité, et est nul quand il n'y en a aucune. D'où l'inégalité :  $\varpi \geq 0$ . Ici s'arrête l'apport de la thermodynamique, les postulats qui permettent l'établissement des lois complémentaires, essentielles à la fermeture du problème mathématique (autant d'équations que d'inconnues), ne font qu'exploiter la positivité de  $\varpi$ .

## 2.4 Lois complémentaires et fermeture du problème

Pour satisfaire l'inégalité  $\varpi \geq 0$ , l'hypothèse de découplage des dissipations est généralement admise. Cette hypothèse consiste à exiger que soient satisfaites des inégalités séparées beaucoup plus contraignantes que la seule exigence du second principe mais qui facilitent les relations de dualité entre les variables forces (causes des déséquilibres) et les variables flux (permettant le retour aux équilibres). Mais avant de découpler les phénomènes, encore faut-il être en mesure de bien les identifier.

Les deux premières dissipations sont simples à identifier. Lorsque la vitesse  $\vec{v}$  et l'état thermodynamique sont homogènes ( $\underline{\nabla} \vec{v} = \underline{0}$ ,  $\vec{\nabla} T = \vec{0}$  et  $\vec{\nabla} \mu_k^* = \vec{0} \ \forall k$ ), la seule source d'irréversibilité est due aux réactions chimiques entre les constituants, d'où :  $\varpi = \varpi_c = -\sum \pi_k \mu_k^*$ . Lorsque l'état thermodynamique est homogène ( $\vec{\nabla} T = \vec{0}$  et  $\vec{\nabla} \mu_k^* = \vec{0} \ \forall k$ ), et en l'absence de réaction chimique, il ne reste de la dissipation  $\varpi$  que la dissipation intrinsèque :  $\varpi_i = \underline{\zeta} : \underline{\nabla} \vec{v}$  qui traduit les irréversibilités dans le fluide résultat du travail des contraintes "visqueuses"  $\underline{\zeta} = \underline{\sigma} + p\underline{1}$ . Notons ici que lorsque  $\underline{\zeta} = \underline{0}$ , on a  $\underline{\sigma} = -p\underline{1}$ , ce qui permet de retrouver une signification mécanique à la pression thermodynamique  $p$ .

Lorsque la vitesse  $\vec{v}$  est homogène, et en l'absence de réactions chimiques, la dissipation  $\varpi$  se réduit à  $-\vec{\Psi}_s \cdot \vec{\nabla} T/T - \sum \rho \vec{J}_k \cdot \vec{\nabla} \mu_k^*$  qui ne dépend que des gradients de  $T$  et de  $\mu_k^*$ . Pour un état thermodynamique dont une de ses variables indépendantes est  $T$ , il est évident que le flux conjugué à la force thermodynamique  $\vec{\nabla} T/T$  n'est pas seulement  $\vec{\Psi}_s$  mais un flux qui fait

intervenir aussi les vitesses de diffusions  $\vec{J}_k$ . En effet, en introduisant le gradient isotherme de  $\mu_k^*$ ,  $\vec{\nabla}_T(\mu_k^*) = \vec{\nabla} \mu_k^* - \partial_T \mu_k^* \vec{\nabla} T$ , on obtient :  $\varpi = \varpi_\psi + \varpi_J$  avec  $\varpi_\psi = -\vec{\psi} \cdot \vec{\nabla} T/T$ ,  $\varpi_J = -\sum \rho \vec{J}_k \cdot \vec{\nabla}_T(\mu_k^*)$  et  $\vec{\psi}$  est tel que :

$$\vec{\psi} = \vec{\Psi}_s + \sum \rho T \partial_T \mu_k^* \vec{J}_k \quad (1.41)$$

Ainsi,  $\varpi$  est la somme de quatre mécanismes de dissipation :

$$\varpi = \varpi_i + \varpi_c + \varpi_\psi + \varpi_J \quad (1.42)$$

L'hypothèse de découplage de ces mécanismes conduit donc à considérer séparément la positivité de chaque dissipation :

$$\varpi_i \geq 0, \quad \varpi_c \geq 0, \quad \varpi_\psi \geq 0, \quad \varpi_J \geq 0, \quad (1.43)$$

Sachant que, pour un état thermodynamique défini par  $(\nu, T, C)$  ou par  $(p, T, C)$  on a :  $\mu_k^* = \partial_{c_k} f(\nu, T, C) = \partial_{c_k} g(p, T, C)$ , il vient compte tenu de (1.37) et (1.41) :

$$\vec{\Psi}_u = \vec{\psi} + \sum \rho \partial_{c_k} u(\nu, T, C) \vec{J}_k = \vec{\psi} + \sum \rho \partial_{c_k} h(p, T, C) \vec{J}_k \quad (1.44)$$

$$\vec{\Psi}_s = \vec{\psi} + \sum \rho T \partial_{c_k} s \vec{J}_k \quad (1.45)$$

Avec ces résultats, nous arrivons donc à donner un sens physique clair à toutes les grandeurs physiques présentes dans les équations de bilan.

Au final, nous nous retrouvons avec un problème mathématique dont nous pouvons décomposer ses variables primaires en deux catégories : les variables de mouvement et les variables d'état.

Le mouvement global du mélange est décrit par la vitesse  $\vec{v}$  qui vérifie l'équation vectorielle (1.24). Avec la décomposition de  $\underline{\underline{\sigma}}$  en un tenseur sphérique correspondant à la pression thermodynamique  $p$  et un tenseur de viscosité  $\underline{\underline{\zeta}}$ , il vient :  $\rho \dot{\vec{v}} + \vec{\nabla} p - \rho \vec{g} = \vec{\nabla} \cdot \underline{\underline{\zeta}}$ . Connaissant l'état thermodynamique, et par conséquent  $\rho$  et  $p$ , cette relation serait alors suffisante pour calculer  $\vec{v}$ , mais à condition de connaître le tenseur  $\underline{\underline{\zeta}}$ .

Connaissant la vitesse barycentrique  $\vec{v}$  et le tenseur  $\underline{\underline{\zeta}}$ , la détermination de l'état thermodynamique du mélange, que ce soit en variables  $(\nu, T, C)$  ou en variables  $(p, T, C)$ , nécessite alors  $q + 1$  équations supplémentaires. La conservation de la masse totale en fournit une :  $\dot{\nu}/\nu + \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$ , le bilan de masse de chaque constituant  $k$  en fournit  $q - 1$  :  $\rho \dot{c}_k = \pi_k - \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{J}_k)$ , et le bilan de l'énergie, écrit ici en enthalpie  $h$  et en variables  $(p, T, C)$ , en fournit une :  $\rho \dot{h} - \dot{p} - r - \underline{\underline{\zeta}} : \underline{\underline{\nabla}} \vec{v} + \vec{\nabla} \cdot (\sum \rho \partial_{c_k} h \vec{J}_k) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{\psi}$ . Il en résulte qu'à la condition de connaître les  $\pi_k$ , les  $\vec{J}_k$  et  $\vec{\psi}$ , les inconnues de l'état se retrouvent complètement déterminées ( $r$  est supposé connu comme l'a été la densité massique des efforts à distance  $\vec{g}$ ).

Ainsi, la connaissance des inconnues secondaires  $I_s = \{\underline{\underline{\zeta}}; \pi_k; \vec{J}_k; \vec{\psi}\}$  en fonction des inconnues primaires du problème  $I_p = \{\vec{v}; X; T; C\}$ ,  $X$  peut être  $\nu$  ou  $p$ , permet alors la fermeture du modèle. Cette connaissance se résume, en général, en la recherche de lois complémentaires empiriques qui relient  $I_s$  à  $I_p$  et  $\vec{\nabla} I_p$  et même plus généralement  $I_s(t)$  à  $I_p(t)$  et  $\vec{\nabla} I_p(t)$  à l'instant  $t$  et à l'historique jusqu'à l'instant  $t$  de  $I_p$ ,  $\vec{\nabla} I_p$ ,  $\Delta I_p$ , etc. Dans la pratique, cependant, cette recherche se limite à des formes linéaires qui relient chaque flux uniquement à la force thermodynamique qui lui est conjuguée de sorte à respecter les inégalités (1.42).



### 3 Le cadre multiphasique et multiconstituant des milieux poreux

Pour traiter ce cadre, tellement vaste tant par les applications que par les approches de modélisations, nous allons dans la suite combiner, à l’instar du cadre précédent concernant les mélanges fluides, les deux approches classiquement rencontrées dans la littérature : l’approche purement macroscopique basée uniquement sur des variables macroscopiquement observables (Biot [13], Coussy [14], Bear and Fel [15]...), et les approches par changement d’échelle à partir des lois élémentaires valables à l’échelle des pores (Marle [16], Dobran [17], Hassanizadeh and Gray [18], Kaviany [19], Quintard and Whitaker [20], Gray [21], Schrefler [22], Loret and Simões [23], Dormieux et al. [24], Pinder and Gray [25], Gray and Miller [26]...). En effet, l’approche par changement d’échelle ne permet le passage de l’échelle microscopique à l’échelle macroscopique que pour les équations de bilan ; les lois d’état et les lois complémentaires que forment les lois de comportement ne sont, en revanche, clairement établies que lorsqu’on admet qu’à l’échelle macroscopique les lois d’état des phases fluides restent identiques à celles vérifiées par les grandeurs microscopiques.

Le milieu poreux étudié est composé de plusieurs phases non miscibles. Il contient en particulier une phase solide formant un squelette connexe et englobant des espaces connectés dans lesquels peuvent circuler des phases fluides. Chaque phase est formée de plusieurs constituants distribués de façon continue dans le volume occupé par la phase.

Si, à un instant  $t$  donné, nous pouvons associer à la phase  $\alpha$  un domaine  $\Omega_\alpha(t)$ , distinct des domaines des autres phases, nous pouvons, pour une grandeur extensive associée à ce domaine  $\Phi(t) = \int_{\Omega_\alpha(t)} \rho\varphi d\mathcal{V}$ , de densité massique  $\varphi(\vec{y}, t)$ , écrire les mêmes équations de bilan que celles développées dans la première partie de ce chapitre. En particulier :

$$\partial_t(\rho\varphi) + \vec{\nabla} \cdot (\rho\varphi \vec{v} + \vec{\Gamma}) = \gamma, \quad \forall \vec{y} \in \Omega_\alpha(t) \quad (1.46)$$

Cette équation doit être complétée par les relations de saut associées à chaque interface  $\alpha\beta$  séparant la phase  $\alpha$  de la phase  $\beta$  :

$$(\rho|_\alpha \varphi|_\alpha (\vec{v}|_\alpha - \vec{v}|_\beta) + \vec{\Gamma}|_\alpha) \cdot \vec{n}_\alpha + (\rho|_\beta \varphi|_\beta (\vec{v}|_\beta - \vec{v}|_\alpha) + \vec{\Gamma}|_\beta) \cdot \vec{n}_\beta = -\zeta_{\alpha\beta}, \quad \forall \vec{y} \in \Sigma_{\alpha\beta}(t) \quad (1.47)$$

où  $\Sigma_{\alpha\beta}(t)$  est la surface de  $\mathbb{R}^3$  décrivant l’interface  $\alpha\beta$  à l’instant  $t$ ,  $\vec{v}|_\alpha$  est la vitesse de l’interface,  $\vec{n}_\alpha$  la normale unitaire extérieure à la phase  $\alpha$  avec  $\vec{n}_\alpha = -\vec{n}_\beta$  et  $\zeta_{\alpha\beta}$  est la propriété thermodynamique associée à l’interface. La notation  $\varphi|_\alpha$  est employée pour indiquer que la grandeur  $\varphi$  est évaluée dans la phase  $\alpha$  à l’interface  $\Sigma_{\alpha\beta}$ .

Toutefois, vu la complexité de la géométrie de l’espace poreux et de la physique des interfaces entre les phases, la résolution des équations (1.46) et (1.47) est pratiquement impossible à mettre en oeuvre dans les applications de l’ingénieur qui ne sont basées que sur des grandeurs physiques prises à une échelle macroscopique qui dépassent largement l’échelle des pores que nous pouvons qualifier, par rapport à la taille des structures qui nous occupent, de microscopique.

Lorsqu’il s’agit de matériaux naturels (sol, argilite, sel gemme, etc), le processus de passage de l’échelle microscopique à l’échelle macroscopique, mis à part le fait qu’il soit fastidieux et mathématiquement complexe, peut paraître inutile puisqu’il se base sur des concepts dont l’existence de certains n’est que théorique ; dès le premier abord, le fait même d’attribuer à la phase  $\alpha$  un domaine  $\Omega_\alpha$  est un concept théorique qui peut ne pas trouver de justification expérimentale dans bien des cas. Néanmoins, cette démarche constitue en soi un excellent exercice pédagogique à travers lequel nous pouvons mesurer l’écart entre les concepts abstraits et la réalité physique des phénomènes.

### 3.1 Opérations de moyenne sur les équations microscopiques

L'idée est de remplacer le milieu réel, hétérogène et discontinu à l'échelle microscopique, par un milieu fictif de telle sorte que toute grandeur physique définie à l'échelle microscopique en un point  $\vec{y}$  au voisinage d'un point  $\vec{x}$  devient un champ de la variable  $\vec{x}$  à l'échelle macroscopique. Dans cette approche, ce milieu fictif se trouve alors doté de propriétés macroscopiques locales, puisqu'elles sont définies en chaque point  $\vec{x}$ , mais qui ne sont établies qu'à partir d'un volume suffisamment grand autour de  $\vec{x}$  pour être représentatif du milieu réel et permettre ainsi de définir des moyennes pertinentes de ces propriétés (voir par exemple Gray and Miller [26]).

Pour une grandeur  $\phi(\vec{y}, t)$  définie dans tout  $\mathbb{R}^3$ , sa moyenne volumique au point macroscopique  $\vec{x}$  peut se mettre sous la forme générale suivante (l'intégration est par rapport à la variable  $\vec{y}$ ) :

$$\langle \phi \rangle(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \phi(\vec{y}, t) m(\vec{y} - \vec{x}) d\mathcal{V}(\vec{y}) \quad (1.48)$$

où la fonction  $m(\vec{\eta})$ , avec  $\vec{\eta} = \vec{y} - \vec{x}$ , est une fonction de pondération centrée au point  $\vec{x}$  et à support compact ; elle est supposée intégrable et son intégrale étendue à tout  $\mathbb{R}^3$  est égale à 1 :  $\int_{\mathbb{R}^3} m(\vec{\eta}) d\mathcal{V} = 1$ .

Considérons maintenant un milieu poreux qui occupe tout  $\mathbb{R}^3$ . Afin d'étendre à  $\mathbb{R}^3$  les grandeurs microscopiques, définies seulement à l'intérieure de chaque domaine  $\Omega_\alpha(t)$ , on introduit la fonction caractéristique de la phase  $\alpha$  :

$$\chi_\alpha(\vec{y}, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } \vec{y} \in \Omega_\alpha(t) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.49)$$

Ainsi, pour une grandeur  $\phi(\vec{y}, t)$  définie uniquement sur  $\Omega_\alpha(t)$ , la fonction  $\chi_\alpha \phi$  permet d'étendre à tout  $\mathbb{R}^3$  la grandeur  $\phi_\alpha$  associée à la phase  $\alpha$ , ce qui permet de définir sa moyenne volumique apparente au point macroscopique  $\vec{x}$  par :

$$\langle \chi_\alpha \phi \rangle(\vec{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} (\chi_\alpha \phi)(\vec{y}, t) m(\vec{y} - \vec{x}) d\mathcal{V}(\vec{y}) = \int_{\Omega_\alpha(t)} \phi_\alpha(\vec{y}, t) m(\vec{y} - \vec{x}) d\mathcal{V}(\vec{y}) \quad (1.50)$$

Lorsque  $\phi$  est uniforme dans tout le milieu, l'égalité (1.50) induit une moyenne qui ne coïncide pas avec  $\phi$  ; c'est en ce sens que la moyenne ainsi définie est une moyenne apparente. Une moyenne volumique intrinsèque à la phase  $\alpha$  peut, par conséquent, être définie par :

$$\langle \phi \rangle_\alpha(\vec{x}, t) = \frac{1}{n_\alpha(\vec{x}, t)} \langle \chi_\alpha \phi \rangle(\vec{x}, t) \quad (1.51)$$

où  $n_\alpha$  est la fraction volumique de la phase  $\alpha$  telle que :

$$n_\alpha(\vec{x}, t) = \langle \chi_\alpha \rangle(\vec{x}, t) = \int_{\Omega_\alpha(t)} m(\vec{y} - \vec{x}) d\mathcal{V}(\vec{y}) \quad (1.52)$$

Nous avons évidemment  $\sum n_\alpha = 1$ . La porosité du milieu est définie par :

$$n = \sum n_\alpha \quad (1.53)$$

où, afin d'alléger les écritures, le symbole  $\sum$  désigne la somme par rapport  $\alpha \neq \sigma$  :  $\sum \equiv \sum_{\alpha \neq \sigma}$ .



### 3.1.1 Les équations de bilan

La prise de moyenne de l'équation (1.46), après l'avoir multiplié par  $\chi_\alpha$  pour l'étendre à tout  $\mathbb{R}^3$ , donne :  $\langle \chi_\alpha \partial_t(\rho\varphi) \rangle + \langle \chi_\alpha \vec{\nabla} \cdot (\rho\varphi \vec{v} + \vec{\Gamma}) \rangle = \langle \chi_\alpha \gamma \rangle$ . En revanche, la permutation des dérivées partielles avec l'opérateur de moyenne n'est pas immédiate puisque les fonctions concernées ne sont pas nécessairement continues à cause des surfaces  $\Sigma_{\alpha\beta}$  qui séparent l'espace en plusieurs sous-domaines ; cela nécessite que les dérivées soient prises au sens des distributions. En prenant de telles précautions et en introduisant, pour une fonction  $\phi$ , sa moyenne surfacique  $\langle \phi \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}}$  sur l'interface  $\Sigma_{\alpha\beta}$  :

$$\langle \phi \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}}(\vec{x}, t) = \int_{\Sigma_{\alpha\beta}} \phi(\vec{y}, t) m(\vec{y} - \vec{x}) d\mathcal{A}(\vec{y}) \quad (1.54)$$

la prise de moyenne volumique de l'équation microscopique (1.46) conduit alors à la forme suivante :

$$\partial_t \langle \chi_\alpha \rho \varphi \rangle + \vec{\nabla} \cdot \langle \chi_\alpha (\rho \varphi \vec{v} + \vec{\Gamma}) \rangle = \langle \chi_\alpha \gamma \rangle - \sum_{\beta \neq \alpha} \langle (\rho_{|\alpha} \varphi_{|\alpha} (\vec{v}_{|\alpha} - \vec{v}_{\alpha\beta}) + \vec{\Gamma}_{|\alpha}) \cdot \vec{n}_{\alpha} \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}} \quad (1.55)$$

qui ne fait pas apparaître explicitement des moyennes macroscopiques de  $\varphi$ , mais elle l'associe aux moyennes des produits  $\chi_\alpha \rho \varphi$ ,  $\chi_\alpha \rho \varphi \vec{v}$  et  $(\rho_{|\alpha} \varphi_{|\alpha} (\vec{v}_{|\alpha} - \vec{v}_{\alpha\beta})) \cdot \vec{n}_{\alpha}$ . Par conséquent, le développement de ces moyennes est indispensable pour avoir l'équation macroscopique relative à  $\varphi$ .

Commençons par les moyennes volumiques des produits  $\chi_\alpha \rho \varphi$  et  $\chi_\alpha \rho \varphi \vec{v}$ . Pour cela, il convient tout d'abord de définir la bonne moyenne de la quantité massique  $\varphi$  qui soit accessible à la mesure. En effet, définir une moyenne volumique pour une telle grandeur peut ne pas avoir beaucoup d'intérêt physique ; aussi, il est préférable de garder pour elle une moyenne massique et d'introduire par conséquent la moyenne intrinsèque suivante :

$$\langle \varphi \rangle_\alpha^\rho = \langle \rho \varphi \rangle_\alpha / \langle \rho \rangle_\alpha \quad (1.56)$$

Compte tenu de la définition (1.51), la moyenne de  $\chi_\alpha \rho \varphi$  s'écrit alors :

$$\langle \chi_\alpha \rho \varphi \rangle = n_\alpha \langle \rho \varphi \rangle_\alpha = n_\alpha \langle \rho \rangle_\alpha \langle \varphi \rangle_\alpha^\rho \quad (1.57)$$

Quant à la deuxième moyenne, il vient :  $\langle \chi_\alpha \rho \varphi \vec{v} \rangle = n_\alpha \langle \rho \varphi \vec{v} \rangle_\alpha = n_\alpha \langle \rho \rangle_\alpha \langle \varphi \vec{v} \rangle_\alpha^\rho$ . Il reste donc le terme  $\langle \varphi \vec{v} \rangle_\alpha^\rho$  dont le développement n'est pas immédiat et peut passer par l'introduction des décompositions spatiales suivantes :

$$\varphi(\vec{y}, t) = \langle \varphi \rangle_\alpha^\rho(\vec{x}, t) + \tilde{\varphi}(\vec{y}, t), \quad \vec{v}(\vec{y}, t) = \langle \vec{v} \rangle_\alpha^\rho(\vec{x}, t) + \tilde{\vec{v}}(\vec{y}, t) \quad (1.58)$$

où  $\tilde{\varphi}$  et  $\tilde{\vec{v}}$  sont les déviations respectivement de  $\varphi$  et de  $\vec{v}$  autour des valeurs moyennes massiques, elles vérifient :  $\langle \tilde{\varphi} \rangle_\alpha^\rho = 0$  et  $\langle \tilde{\vec{v}} \rangle_\alpha^\rho = \vec{0}$ . D'où :  $\langle \varphi \vec{v} \rangle_\alpha^\rho = \langle \varphi \rangle_\alpha^\rho \langle \vec{v} \rangle_\alpha^\rho + \langle \tilde{\varphi} \tilde{\vec{v}} \rangle_\alpha^\rho$ . Nous nous retrouvons donc non seulement avec les quantités moyennes mais aussi avec leurs déviations. Mais devant la complexité du problème et surtout lorsqu'on garde à l'esprit toutes les difficultés expérimentales associées à la mesure locale dans les milieux poreux naturels, nous ne pouvons que négliger la contribution des déviations dans l'équation précédente et nous contenter de l'approximation suivante :

$$\langle \varphi \vec{v} \rangle_\alpha^\rho \approx \langle \varphi \rangle_\alpha^\rho \langle \vec{v} \rangle_\alpha^\rho \quad (1.59)$$

Le développement des moyennes surfaciques peut passer aussi par l'introduction d'une moyenne pertinente de  $\varphi|_\alpha$ . Dans ce cas, nous pouvons la définir par pondération avec l'apport de masse résultant des échanges aux interfaces  $\Sigma_{\alpha\beta}$ . Il vient :

$$\langle (\rho|_\alpha \varphi|_\alpha (\vec{v}|_\alpha - \vec{v}_{\alpha\beta})) \cdot \vec{n}_\alpha \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}} = \langle (\rho|_\alpha (\vec{v}|_\alpha - \vec{v}_{\alpha\beta})) \cdot \vec{n}_\alpha \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}} \langle \varphi|_\alpha \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}}^\rho \quad (1.60)$$

Passons maintenant à la prise de moyenne de l'équation de saut (1.47) au niveau de chaque interface  $\alpha\beta$ . Il vient, après l'avoir multiplié par la distribution de Dirac  $\delta_{\Sigma_{\alpha\beta}}$  de support  $\Sigma_{\alpha\beta}$  pour l'étendre à tout  $\mathbb{R}^3$  :

$$\langle (\rho|_\alpha \varphi|_\alpha (\vec{v}|_\alpha - \vec{v}_{\alpha\beta}) + \vec{\Gamma}|_\alpha) \cdot \vec{n}_\alpha \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}} + \langle (\rho|_\beta \varphi|_\beta (\vec{v}|_\beta - \vec{v}_{\alpha\beta}) + \vec{\Gamma}|_\beta) \cdot \vec{n}_\beta \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}} = -\langle \zeta_{\alpha\beta} \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}} \quad (1.61)$$

### 3.1.2 Les équations d'état

Cela concerne les phases fluides, le squelette sera traité à l'occasion de la reformulation du second principe. Nous avons déjà introduit pour les grandeurs extensives, telles que l'énergie interne  $u$  et l'entropie  $s$ , la moyenne massique  $\langle \cdot \rangle_\alpha^\rho$  afin de conserver une signification physique toujours claire des grandeurs moyennes. Ceci est aussi applicable pour les concentrations massiques des constituants dans chaque phase puisque  $c_{k\alpha}$  n'est autre que la densité massique de la masse du constituant  $k$  dans la phase  $\alpha$ .

La question maintenant est de savoir si une relation fondamentale telle que développée dans la première partie de ce chapitre (voir § 2.2.2)  $u(\vec{y}, t) = u_\alpha(\nu(\vec{y}, t), s(\vec{y}, t), C(\vec{y}, t))$ , écrite à l'échelle microscopique d'une phase  $\alpha$ , reste aussi valable à l'échelle macroscopique; autrement dit, peut-on avoir  $\langle u \rangle_\alpha^\rho(\vec{x}, t) = u_\alpha\left(\frac{1}{\langle \rho \rangle_\alpha}(\vec{x}, t), \langle s \rangle_\alpha^\rho(\vec{x}, t), \langle C \rangle_\alpha^\rho(\vec{x}, t)\right)$ ? En général, la réponse à cette question est négative, pire encore nous n'avons probablement même pas le droit de la poser puisque rien ne garantit déjà l'existence d'une telle relation car nous pouvons, pour les mêmes moyennes, avoir différentes répartitions spatiales des phases.

Pourtant cette relation est partout admise en mécanique des milieux poreux, que ce soit pour des matériaux naturels ou artificiels (béton, réfractaire, etc.), y compris en non-équilibre thermique local (Khalili and Loret [27], Duval et al. [28], Gelet et al. [29]...).

## 3.2 Les équations de bilan macroscopique

### 3.2.1 Formes locales

Commençons tout d'abord par simplifier les notations. Notons par  $\rho_\alpha(\vec{x}, t) = \langle \rho \rangle_\alpha(\vec{x}, t)$  la moyenne intrinsèque de  $\rho$ , par  $\phi^\alpha(\vec{x}, t) = \langle \chi_\alpha \phi \rangle(\vec{x}, t)$  la moyenne apparente d'une grandeur quelconque  $\phi$  et par  $\varphi_\alpha(\vec{x}, t) = \langle \varphi \rangle_\alpha^\rho$  la moyenne massique intrinsèque de la densité massique  $\varphi$ . Pour  $\rho$  et  $\varphi$ , c'est un abus de notation que de les confondre avec leurs fonctions microscopiques, mais cela ne doit avoir aucune gravité en pratique puisque le modèle qui suppose l'uniformité des grandeurs microscopiques dans le volume de prise de moyenne est aussi pertinent, voire plus eu égard aux hypothèses sur les lois d'état des phases fluides, que celui utilisant les moyennes.

Avec ces notations, et compte tenu des relations (1.57), (1.59) et (1.60), les égalités (1.55) et (1.61) deviennent :

$$\partial_t(\rho^\alpha \varphi_\alpha) + \vec{\nabla} \cdot (\rho^\alpha \varphi_\alpha \vec{v}_\alpha + \vec{\Gamma}^\alpha) = \gamma^\alpha + \hat{\pi}^\alpha \hat{\varphi}^\alpha + \hat{\Gamma}^\alpha \quad (1.62)$$

$$\hat{\pi}_{\alpha\beta}^{\alpha} \hat{\varphi}_{\alpha\beta}^{\alpha} + \hat{\Gamma}_{\alpha\beta}^{\alpha} + \hat{\pi}_{\alpha\beta}^{\beta} \hat{\varphi}_{\alpha\beta}^{\beta} + \hat{\Gamma}_{\alpha\beta}^{\beta} = \hat{\zeta}^{\alpha\beta} \quad (1.63)$$

où nous avons cherché, en plus de la simplification des notations, à réorganiser les termes qui viennent des échanges aux interfaces :

$$\begin{aligned} - \hat{\pi}^{\alpha} &= \sum_{\beta \neq \alpha} \hat{\pi}_{\alpha\beta}^{\alpha}, & \hat{\pi}_{\alpha\beta}^{\alpha} &= \langle (\rho_{|\alpha} (\vec{v}_{\alpha\beta} - \vec{v}_{|\alpha}) \cdot \vec{n}_{\alpha}) \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}} \\ - \hat{\pi}^{\alpha} \hat{\varphi}^{\alpha} &= \sum_{\beta \neq \alpha} \hat{\pi}_{\alpha\beta}^{\alpha} \hat{\varphi}_{\alpha\beta}^{\alpha}, & \hat{\pi}_{\alpha\beta}^{\alpha} \hat{\varphi}_{\alpha\beta}^{\alpha} &= \langle (\rho_{|\alpha} \varphi_{|\alpha} (\vec{v}_{\alpha\beta} - \vec{v}_{|\alpha}) \cdot \vec{n}_{\alpha}) \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}} \\ - \hat{\Gamma}^{\alpha} &= \sum_{\beta \neq \alpha} \hat{\Gamma}_{\alpha\beta}^{\alpha}, & \hat{\Gamma}_{\alpha\beta}^{\alpha} &= \langle -\vec{\Gamma}_{|\alpha} \cdot \vec{n}_{\alpha} \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}} \\ - \hat{\zeta}^{\alpha\beta} &= \langle \zeta_{\alpha\beta} \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}} \end{aligned}$$

L'équation eulérienne (1.62) peut être aussi écrite sous forme lagrangienne en utilisant la dérivée particulaire associée à la phase  $\alpha$  :

$$\rho^{\alpha} D\varphi_{\alpha}/D_{\alpha}t + \vec{\nabla} \cdot \vec{\Gamma}^{\alpha} = \gamma^{\alpha} + \hat{\pi}^{\alpha}(\hat{\varphi}^{\alpha} - \varphi_{\alpha}) + \hat{\Gamma}^{\alpha} \quad (1.64)$$

En sommant l'égalité (1.63) par rapport aux interfaces  $\alpha\beta$  ( $\beta \neq \alpha$ ), on obtient la relation suivante :

$$\sum_{\alpha} (\hat{\pi}^{\alpha} \hat{\varphi}^{\alpha} + \hat{\Gamma}^{\alpha}) = \sum_{\alpha\beta} \hat{\zeta}^{\alpha\beta} \quad (1.65)$$

qui fait apparaître la somme des termes d'échange interfaciaux de l'équation (1.62). Cette somme représente un bilan macroscopique d'échange entre les différentes phases que nous allons supposer nul :

$$\sum (\hat{\pi}^{\alpha} \hat{\varphi}^{\alpha} + \hat{\Gamma}^{\alpha}) = 0 \quad (1.66)$$

Il est important de noter que cette hypothèse est indépendante du fait que les interfaces sont dotées de propriétés thermo-mécaniques; en particulier, cela n'empêche pas l'existence de tensions superficielles.

Pour une phase  $\alpha$ , les équations macroscopiques (1.62) et (1.64) obtenue par la méthode de prise de moyenne volumique, ne se distinguent finalement de ses homologues microscopiques que par l'utilisation d'une masse volumique apparente  $\rho^{\alpha}$ . En tant que milieu continu, cela se traduit donc par le fait qu'autour de tout point macroscopique  $\vec{x}$  d'un milieu poreux occupant à l'instant  $t$  le domaine  $\Omega(t)$ , nous pouvons construire un domaine élémentaire  $\delta\Omega(t)$ , de volume  $\delta\mathcal{V}$  et de masse  $\delta\mathcal{M}$ , et associer à chaque phase  $\alpha$  de la matière contenue dans  $\delta\Omega(t)$  une masse volumique  $\rho^{\alpha}$  et une vitesse  $\vec{v}_{\alpha}$ . La masse élémentaire de la phase  $\alpha$  occupant  $\delta\mathcal{V}$  s'écrit donc :  $\delta\mathcal{M}_{\alpha} = \rho^{\alpha} \delta\mathcal{V} = \rho_{\alpha} n_{\alpha} \delta\mathcal{V}$ . En associant la masse volumique  $\rho_{\alpha}$  au vrai volume  $\delta\mathcal{V}_{\alpha}$  occupé par la phase  $\alpha$ , on obtient alors :  $n_{\alpha} = \delta\mathcal{V}_{\alpha}/\delta\mathcal{V}$ . D'un autre côté, la masse totale  $\delta\mathcal{M}$  étant la somme des masses  $\delta\mathcal{M}_{\alpha}$ , on en déduit donc une masse volumique totale  $\rho$  qui vérifie :

$$\rho = \sum \rho^{\alpha} \quad (1.67)$$

Par ailleurs, chaque phase  $\alpha$  étant formée de  $q_{\alpha}$  constituant, la continuité du milieu suppose aussi que nous pouvons associer à chaque constituant  $k$  de la phase  $\alpha$  une masse volumique  $\rho_{k\alpha}$  et une vitesse  $\vec{v}_{k\alpha}$  telles que :

$$\rho_{\alpha} = \sum \rho_{k\alpha} \quad (1.68)$$

$$\vec{v}_{\alpha} = \sum c_{k\alpha} \vec{v}_{k\alpha} \quad (1.69)$$

Sachant, en désignant par  $\delta\mathcal{M}_{k\alpha}$  la masse du constituant  $k$  dans la phase  $\alpha$ , qu'on a :  $\rho_{k\alpha} = \delta\mathcal{M}_{k\alpha}/\delta\mathcal{V}_{\alpha}$  et  $c_{k\alpha} = \delta\mathcal{M}_{k\alpha}/\delta\mathcal{M}_{\alpha} = \rho_{k\alpha}/\rho_{\alpha}$ .

### 3.2.2 Formes globales

En intégrant (1.62) sur un domaine  $\Omega(t)$  du milieu poreux, on obtient :

$$D\Phi_\alpha(t)/D_\alpha t = \int_{\Omega(t)} \gamma^\alpha d\mathcal{V} + \int_{\Omega(t)} (\hat{\pi}^\alpha \hat{\varphi}^\alpha + \hat{\Gamma}^\alpha) d\mathcal{V} - \int_{\partial\Omega(t)} \vec{\Gamma}^\alpha d\mathcal{A} \quad (1.70)$$

avec

$$\Phi_\alpha(t) = \int_{\Omega(t)} \rho^\alpha \varphi_\alpha d\mathcal{V} \quad (1.71)$$

où  $D/D_\alpha t$  est l'opérateur de dérivation par rapport au temps associé au champ de vitesse  $\vec{v}_\alpha$ . En sommant par rapport à  $\alpha$  et en tenant compte de la condition (1.66), il vient :

$$\sum D\Phi_\alpha(t)/D_\alpha t = \int_{\Omega(t)} \sum \gamma^\alpha d\mathcal{V} - \int_{\partial\Omega(t)} \sum \vec{\Gamma}^\alpha d\mathcal{A} \quad (1.72)$$

$$\Phi(t) = \sum \Phi_\alpha(t) = \int_{\Omega(t)} \sum \rho^\alpha \varphi_\alpha d\mathcal{V} \quad (1.73)$$

Ainsi, si nous introduisons l'opérateur de dérivation par rapport au temps  $D/\underline{D}t$  tel que :

$$D\Phi(t)/\underline{D}t = \sum D\Phi_\alpha(t)/D_\alpha t = \int_{\Omega(t)} \partial_t \phi d\mathcal{V} + \int_{\partial\Omega(t)} \sum (\rho^\alpha \varphi_\alpha \vec{v}_\alpha) \cdot \vec{n} d\mathcal{A} \quad (1.74)$$

Il vient :

$$D\Phi(t)/\underline{D}t = \int_{\Omega(t)} \gamma d\mathcal{V} - \int_{\partial\Omega(t)} \vec{\Gamma} \cdot \vec{n} d\mathcal{A} \quad (1.75)$$

avec

$$\gamma = \sum \gamma^\alpha, \quad \vec{\Gamma} = \sum \vec{\Gamma}^\alpha \quad (1.76)$$

L'opérateur  $D/\underline{D}t$  exprime le taux de variation de  $\Phi(t)$  lorsque nous suivons toutes les phases en même temps ; il contient un terme  $\int_{\Omega(t)} \partial_t \phi d\mathcal{V}$  qui représente, en l'absence de mouvement, le taux de variation de  $\Phi(t)$  dans  $\Omega$  et le terme  $\int_{\partial\Omega(t)} \sum (\rho^\alpha \varphi_\alpha \vec{v}_\alpha) d\mathcal{A}$  qui caractérise, en cas de mouvement, l'échange avec l'extérieur. Quant au second membre de (1.75), c'est ici que nous mesurons l'intérêt de la condition (1.66) puisque ce qui en reste traduit uniquement l'apport de la grandeur  $\Phi$  à partir de l'extérieur.

Par conséquent, nous nous retrouvons avec la même forme (1.75) classique que pour une équation de bilan d'un milieu simple mais ce n'est qu'en apparence seulement puisque le contenu physique de chaque terme est complètement différent. Cette forme est surtout à comparer avec la forme (1.13) associée à un mélange de fluide qu'on suit dans son mouvement barycentrique car dans les deux cas, et contrairement à un milieu simple où l'observateur suit les molécules, l'observateur ne constate qu'une invariance de la masse totale ( $D\mathcal{M}(t)/\underline{D}t = 0$ ) sans que le système soit constitué à chaque instant par les mêmes molécules. Dans une approche purement phénoménologique qui cherche à faire abstraction des sommes qui sont dans le second membre de l'équation (1.75), la tentation est alors forte de partir de (1.75) pour annoncer les lois de bilan macroscopiques et d'oublier le raisonnement phase par phase surtout pour annoncer le bilan de la quantité de mouvement et celui de l'énergie mais encore faut-il déjà avoir une signification physique claire des termes  $\gamma$  et  $\vec{\Gamma}$  qui se trouvent davantage compliqués lorsqu'on est en présence de diffusion dans les phases comme nous l'avons déjà montré au début de ce chapitre.

Remarquons par ailleurs que la grandeur  $\Phi$  est exprimée seulement par une densité volumique ; introduire une densité massique  $\varphi$  telle que  $\rho\varphi = \sum \rho^\alpha \varphi_\alpha$  n'a pas beaucoup de sens ici puisque, contrairement à un mélange de fluide où les constituants sont miscibles et occupent

à tout instant tout le volume, les phases ne sont pas miscibles et occupent, à chaque instant, des volumes différents.

Dans la suite, à partir des équations (1.62) et (1.63) soumises à la condition (1.66), nous allons chercher à écrire les équations locales de bilan (masse, quantité de mouvement, énergie, entropie) en substituant à chaque fois les variables génériques par les grandeurs appropriées. Nous procédons en particulier, à l'instar de ce que nous avons déjà fait pour les mélanges de fluide, à deux écritures : une relative à la phase  $\alpha$  et une deuxième relative au milieu poreux en tant que, cette fois-ci, union de phases non miscibles. Cette deuxième écriture sera présentée surtout pour la quantité de mouvement, l'énergie et l'entropie afin de caractériser le milieu poreux dans son ensemble. L'équation (1.63) n'est développée que pour la masse et la quantité de mouvement ; son intérêt pour l'énergie et l'entropie est très peu utile dans le cadre de ce travail.

Mais avant cela, nous allons tout d'abord préciser le rôle de la phase solide dont on sait qu'il est déterminant dans les milieux poreux déformables.

### 3.2.3 Rôle de la phase solide

Nous avons vu au § 2 de ce chapitre que la cinématique de la particule élémentaire d'un mélange de fluide est le plus souvent choisie de sorte que la vitesse  $\vec{\omega}$  de la particule coïncide avec la vitesse barycentrique. L'application de cette démarche au cas d'un mélange poreux aurait conduit à  $\rho\vec{\omega} = \sum \rho^\alpha \vec{v}_\alpha$ . Avec un tel choix, la particule du mélange occupant un volume  $\delta\mathcal{V}$  autour d'un point  $\vec{x}$  a un mouvement tel que la masse est conservée mais pas nécessairement les molécules y compris celles de la phase solide. Mais dans la pratique, le solide joue un rôle bien particulier puisque souvent nous nous intéressons à sa déformation. Cela suppose donc, contrairement aux autres phases fluides qui ne sont considérées que par des bilans massique et énergétique, de suivre la phase solide dans son mouvement macroscopique en prenant  $\vec{\omega} = \vec{v}_\sigma$ . Dans la suite, cette vitesse commune à la particule du milieu poreux ( $\vec{\omega}$ ) et à la phase solide qu'elle contient ( $\vec{v}_\sigma$ ) sera notée  $\vec{v}$ . La position initiale de la particule solide étant  $\vec{x}_0$ , la position actuelle est  $\vec{x} = \vec{x}(\vec{x}_0, t)$ , et on a :  $\vec{v}_\sigma = \vec{v} = \partial_t \vec{x}$ . Le volume occupé par la particule du milieu poreux est  $\delta\mathcal{V}_0$  à  $t = 0$  et  $\delta\mathcal{V}$  à l'instant  $t$ . Le rapport  $J = \delta\mathcal{V}/\delta\mathcal{V}_0$  est le jacobien de la transformation.

Le fait de suivre le solide dans son mouvement ( $\vec{\omega} = \vec{v}_\sigma$ ) signifie, en l'absence de réactions chimiques, que seule la masse de la phase solide est conservée ainsi que les molécules de cette phase. En revanche, les autres phases sont variables tant en nature qu'en quantité. Cependant, toute grandeur physique  $\phi$  même lorsqu'elle concerne une phase contenue dans le vide poral est considérée comme fonction de  $(\vec{x}, t)$  et sa variation  $d\phi$  pour  $\vec{x}_0$  fixé est  $d\phi = (\vec{\nabla} \phi \cdot \vec{v} + \partial_t \phi) dt$  car  $d\vec{x} = \vec{v} dt$ . Dans la suite on notera  $D\phi/Dt = \dot{\phi} = \vec{\nabla} \phi \cdot \vec{v} + \partial_t \phi$ .

Par rapport à un référentiel lié au mouvement de la phase solide, chaque phase  $\alpha$  peut donc avoir une vitesse relative  $\vec{v}_\alpha - \vec{v}$  telle que, à travers une surface élémentaire  $\delta\mathcal{A}$  du milieu poreux de normale  $\vec{n}$ , son flux de matière  $\rho^\alpha \vec{v}_\alpha \cdot \vec{n} \delta\mathcal{A}$  se décompose en un flux dû au mouvement de la phase solide  $\rho^\alpha \vec{v} \cdot \vec{n} \delta\mathcal{A}$  et un flux dû au mouvement relatif de la phase  $\alpha$  par rapport au solide  $\rho^\alpha (\vec{v}_\alpha - \vec{v}) \cdot \vec{n} \delta\mathcal{A}$ . Ce qui se traduit, pour tout vecteur  $\vec{n}$ , par l'égalité :  $n_\alpha \vec{v}_\alpha \cdot \vec{n} = n_\alpha \vec{v} \cdot \vec{n} + \vec{V}^\alpha \cdot \vec{n}$  où  $\vec{V}^\alpha$  est la vitesse de filtration de la phase  $\alpha$  dans le milieu poreux :

$$\vec{V}^\alpha = n_\alpha (\vec{v}_\alpha - \vec{v}) \quad (1.77)$$

En introduisant  $\vec{v}$  et  $\vec{V}^\alpha$  dans (1.62), on obtient la forme eulérienne suivante :

$$\partial_t(\rho^\alpha \varphi_\alpha) + \vec{\nabla} \cdot (\rho^\alpha \varphi_\alpha \vec{v} + \rho_\alpha \varphi_\alpha \vec{V}^\alpha + \vec{\Gamma}^\alpha) = \gamma^\alpha + \hat{\pi}^\alpha \hat{\varphi}^\alpha + \hat{\Gamma}^\alpha \quad (1.78)$$

Sachant que  $\dot{J} = J \vec{\nabla} \cdot \vec{v}$ , on peut écrire cette équation sous la forme lagrangienne suivante :

$$\bar{J} D(\rho^\alpha \varphi_\alpha J) / Dt + \vec{\nabla} \cdot (\rho_\alpha \varphi_\alpha \vec{V}^\alpha + \vec{\Gamma}^\alpha) = \gamma^\alpha + \hat{\pi}^\alpha \hat{\varphi}^\alpha + \hat{\Gamma}^\alpha \quad (1.79)$$

avec  $\bar{J} = 1/J$ . La quantité  $\rho^\alpha \varphi_\alpha J$  est une densité volumique lagrangienne puisqu'elle est associée à la configuration de référence de la phase solide :  $\Phi_\alpha(t) = \int_{\Omega(t)} \rho^\alpha \varphi_\alpha dV = \int_{\Omega(0)} \rho^\alpha \varphi_\alpha J dV_0$ .

En rapprochant les deux formes lagrangienne (1.64) et (1.79), on peut déduire la relation qui exprime le lien entre les deux opérateurs de dérivations  $D/D_\alpha t$  et  $D/Dt$  :

$$\bar{J} D(\rho^\alpha \varphi_\alpha J) / Dt = \rho^\alpha D\varphi_\alpha / D_\alpha t - \vec{\nabla} \cdot (\rho_\alpha \varphi_\alpha \vec{V}^\alpha) + \hat{\pi}^\alpha \varphi_\alpha \quad (1.80)$$

### 3.2.4 Bilan de la masse

En remplaçant dans (1.46) les variables génériques microscopique par  $\varphi = 1$ ,  $\vec{\Gamma} = \vec{0}$  et  $\gamma = 0$ , l'égalité (1.62) permet d'écrire, sous forme eulérienne, l'équation de bilan de masse de chaque phase  $\alpha$  :

$$\partial_t(\rho^\alpha) + \vec{\nabla} \cdot (\rho^\alpha \vec{v}_\alpha) = \hat{\pi}^\alpha \quad (1.81)$$

avec

$$\sum \hat{\pi}^\alpha = 0 \quad (1.82)$$

Sous forme lagrangienne dans le mouvement de la phase solide et selon (1.79), l'équation (1.81) devient :

$$\bar{J} \dot{m}^\alpha + \vec{\nabla} \cdot (\rho_\alpha \vec{V}^\alpha) = \hat{\pi}^\alpha \quad (1.83)$$

avec

$$m^\alpha = \rho^\alpha J \quad (1.84)$$

Pour la phase solide, puisque par définition  $\vec{V}^\sigma = \vec{0}$ , l'équation (1.83) devient :  $\bar{J} \dot{m}^\sigma = \hat{\pi}^\sigma$ . Il apparaît donc que la masse de la phase solide ne se conserve que sous la condition  $\hat{\pi}^\sigma = 0$ , c'est-à-dire en l'absence d'échange massique avec les autres phases. Si cette condition est vérifiée, on obtient alors la relation suivante :  $J = \rho_0^\sigma / \rho^\sigma$  où  $\rho_0^\sigma$  est la masse volumique apparente dans la configuration de référence de la phase solide.

Passons maintenant aux équations de bilan de masse du constituant  $k$  dans la phase  $\alpha$ . Dans ce cas les variables génériques microscopiques dans l'équation (1.46) sont à remplacer par :  $\varphi = c_k$ ,  $\vec{\Gamma} = \rho \vec{J}_k$  et  $\gamma = \pi_k$ . Selon (1.62), il vient donc :

$$\partial_t(\rho^\alpha c_{k\alpha}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho^\alpha c_{k\alpha} \vec{v}_\alpha + \rho_\alpha \vec{J}_k^\alpha) = \pi_k^\alpha + \hat{\pi}_k^\alpha \quad (1.85)$$

avec

$$\hat{\pi}_k^\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} \hat{\pi}_{k\alpha\beta}^\alpha, \quad \hat{\pi}_{k\alpha\beta}^\alpha = \langle (\rho_{k|\alpha} (\vec{v}_{\alpha\beta} - \vec{v}_{k|\alpha}) \cdot \vec{n}_\alpha) \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}}, \quad \sum_\alpha \hat{\pi}_k^\alpha = 0 \quad (1.86)$$

$$\vec{J}_k^\alpha = n_\alpha c_{k\alpha} (\vec{v}_{k\alpha} - \vec{v}_\alpha) \quad (1.87)$$

Dans (1.85), nous avons regroupé les termes d'échange interfaciaux qui sont, dans ce cas particulier de même nature, dans le seul terme  $\hat{\pi}_k^\alpha$  lié à l'apport de masse à la phase  $\alpha$

résultant des échanges massiques aux interfaces du constituant  $k$ . Sous forme lagrangienne l'équation (1.85) devient :

$$\bar{J}\dot{m}_k^\alpha + \bar{\nabla} \cdot (\rho_\alpha c_{k\alpha} \bar{V}^\alpha + \rho_\alpha \bar{J}_k^\alpha) = \pi_k^\alpha + \hat{\pi}_k^\alpha \quad (1.88)$$

avec

$$m_k^\alpha = c_{k\alpha} m^\alpha \quad (1.89)$$

Pour une phase  $\alpha$  donnée, nous avons bien entendu les relations suivantes :

$$\sum_k \pi_k^\alpha = 0, \quad \hat{\pi}^\alpha = \sum_k \hat{\pi}_k^\alpha \quad (1.90)$$

À l'interface  $\alpha\beta$ , si on néglige les effets associés aux échanges de masse et aux réactions chimiques hétérogènes (en présence de deux phases), il vient selon l'équation (1.63), après avoir annulé dans l'équation (1.47) le terme microscopique  $\zeta_{\alpha\beta}$  :

$$\hat{\pi}_{\alpha\beta}^\alpha + \hat{\pi}_{\alpha\beta}^\beta = 0, \quad \hat{\pi}_{k\alpha\beta}^\alpha + \hat{\pi}_{k\alpha\beta}^\beta = 0 \quad (1.91)$$

### 3.2.5 Bilan de la quantité de mouvement

En remplaçant dans (1.46) les variables génériques microscopiques par  $\vec{\varphi} = \vec{v}$ ,  $\underline{\Gamma} = -\underline{\sigma}$  et  $\vec{\gamma} = \rho \vec{g}$ , il vient selon (1.62) :

$$\partial_t(\rho^\alpha \vec{v}_\alpha) + \bar{\nabla} \cdot (\rho^\alpha \vec{v}_\alpha \otimes \vec{v}_\alpha - \underline{\sigma}^\alpha) = \rho^\alpha \vec{g} + \hat{\pi}^\alpha \hat{v}^\alpha + \hat{\sigma}^\alpha \quad (1.92)$$

avec

$$\hat{\sigma}^\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} \langle \underline{\sigma}_\alpha | \vec{n}_\alpha \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}}, \quad \sum (\hat{\pi}^\alpha \hat{v}^\alpha + \hat{\sigma}^\alpha) = \vec{0} \quad (1.93)$$

En fonction de la dérivée particulière  $D\vec{v}_\alpha/D_\alpha t$ , l'équation (1.92) devient :

$$\rho^\alpha D\vec{v}_\alpha/D_\alpha t = \bar{\nabla} \cdot \underline{\sigma}^\alpha + \rho^\alpha \vec{g} + \hat{\pi}^\alpha (\hat{v}^\alpha - \vec{v}_\alpha) + \hat{\sigma}^\alpha \quad (1.94)$$

En sommant par rapport à  $\alpha$ , on déduit :

$$\sum (\rho^\alpha D\vec{v}_\alpha/D_\alpha t + \hat{\pi}^\alpha \vec{v}_\alpha) = \bar{\nabla} \cdot \underline{\sigma} + \rho \vec{g} \quad (1.95)$$

avec

$$\underline{\sigma} = \sum \underline{\sigma}^\alpha \quad (1.96)$$

La relation (1.95) exprime le fait que les efforts appliqués à l'ensemble du milieu poreux servent, en plus de créer les accélérations des différentes phases, de transmettre la vitesse  $\vec{v}_\alpha$  aux masses  $\hat{\pi}^\alpha$  résultantes des échanges massiques aux interfaces.

Passons maintenant à l'interface  $\alpha\beta$ . Dans ce cas, le terme  $\zeta_{\alpha\beta}$  associé aux échanges interfaciaux de la quantité de mouvement n'est pas négligeable ; il contient l'effet de la tension de surface de l'interface séparant les phases fluides  $\alpha$  et  $\beta$ . À l'échelle microscopique des pores, en considérant un domaine autour de l'interface  $\Sigma_{\alpha\beta}$  qui le sépare en deux sous domaines dans lesquelles toutes les grandeurs physiques sont continues et dérivables, on peut exprimer le terme  $\zeta_{\alpha\beta}$  associé au bilan de la quantité de mouvement sous la forme (Slattery et al. [30], Miller and Neogi [31], Ishii and Hibiki [32], Neumann et al. [33]. . .) :

$$\vec{\zeta}_{\alpha\beta} = \bar{\nabla}_s \sigma_{\alpha\beta} \pm 2H_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta} \vec{n}_\alpha \quad (1.97)$$



où  $\vec{\nabla}_s$  est l'opérateur gradient de surface tel que pour une fonction  $\phi$  quelconque on a :  $\vec{\nabla}_s \phi = (\underline{1} - \vec{n}_\alpha \otimes \vec{n}_\alpha) \vec{\nabla} \phi$ ,  $H_{\alpha\beta} = \pm(1/2)\vec{n}_\alpha \cdot \vec{\nabla}_s \cdot (\underline{1} - \vec{n}_\alpha \otimes \vec{n}_\alpha)$  est la courbure moyenne en un point de l'interface  $\Sigma_{\alpha\beta}$  et  $\sigma_{\alpha\beta}$  est la tension de surface entre les phases fluides  $\alpha$  et  $\beta$ . Selon (1.47), il vient donc :

$$(\rho_{|\alpha} \vec{v}_{|\alpha} \otimes (\vec{v}_{|\alpha} - \vec{v}_{\alpha\beta}) - \underline{\sigma}_{|\alpha}) \vec{n}_\alpha + (\rho_{|\beta} \vec{v}_{|\beta} \otimes (\vec{v}_{|\beta} - \vec{v}_{\alpha\beta}) - \underline{\sigma}_{|\beta}) \vec{n}_\beta = -\vec{\nabla}_s \sigma_{\alpha\beta} \pm 2H_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta} \vec{n}_\alpha \quad (1.98)$$

En géotechnique (Forde [34], Olivella and Gens [35], Rutqvist et al. [36], Murray and Siva-kumar [37]...), on ne retient généralement de cette égalité vectorielle que la composante normale dans laquelle l'hypothèse de prépondérance de la contribution des pressions hydrostatiques devant celle des contraintes visqueuses et celle relative aux échanges de masse est souvent admise :

$$p_{|\alpha} - p_{|\beta} = \pm 2H_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta} \quad (1.99)$$

C'est l'équation de Laplace qui n'est donc valable que lorsqu'on se place dans des conditions quasi-statiques.

La prise de moyenne volumique de (1.99) aboutit à la relation macroscopique suivante :

$$\langle p_{|\alpha} \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}} - \langle p_{|\beta} \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}} = \langle \pm 2H_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta} \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}} \quad (1.100)$$

qui s'écrit en termes des moyennes surfaciques des pressions des deux phases. À priori, il n'y a aucune raison pour que la moyenne surfacique de  $p_{|\alpha}$  soit égale à sa moyenne volumique  $\langle p \rangle_\alpha$ . Vouloir remplacer la différence  $\langle p_{|\alpha} \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}} - \langle p_{|\beta} \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}}$  par celle écrite en termes des moyennes volumique  $\langle p \rangle_\alpha - \langle p \rangle_\beta$  n'est, par conséquent, qu'une heuristique qui cherche juste à écrire une pression capillaire macroscopique par analogie avec la relation microscopique (1.99). Cette heuristique est d'ailleurs souvent complétée par une règle empirique exprimant le second terme de (1.100) en fonction de la température et des fractions volumiques des deux phases.

### 3.2.6 Bilan de l'énergie

En remplaçant dans (1.46) les variables génériques microscopiques par  $\varphi = e = u + k$ ,  $\vec{\Gamma} = \vec{\Psi}_u - \underline{\sigma} \vec{v}$  et  $\gamma = \rho \vec{g} \cdot \vec{v} + r$ , il vient selon (1.62) :

$$\partial_t (\rho^\alpha e_\alpha) + \vec{\nabla} \cdot (\rho^\alpha e_\alpha \vec{v}_\alpha + \vec{\Psi}_u^\alpha - \underline{\sigma}^\alpha \vec{v}_\alpha) = \rho^\alpha \vec{g} \cdot \vec{v}_\alpha + r^\alpha + \hat{\pi}^\alpha \hat{e}^\alpha + \hat{\Gamma}_e^\alpha \quad (1.101)$$

avec

$$\hat{\Gamma}_e^\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} \langle (-\vec{\Psi}_{u|\alpha} + \underline{\sigma}_{|\alpha} \vec{v}_{|\alpha}) \cdot \vec{n}_\alpha \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}}, \quad \sum (\hat{\pi}^\alpha \hat{e}^\alpha + \hat{\Gamma}_e^\alpha) = 0 \quad (1.102)$$

En fonction de la dérivée particulière  $De_\alpha/D_\alpha t$ , l'équation (1.101) devient :

$$\rho^\alpha De_\alpha/D_\alpha t + \vec{\nabla} \cdot (\vec{\Psi}_u^\alpha - \underline{\sigma}^\alpha \vec{v}_\alpha) = \rho^\alpha \vec{g} \cdot \vec{v}_\alpha + r^\alpha + \hat{\pi}^\alpha (\hat{e}^\alpha - e_\alpha) + \hat{\Gamma}_e^\alpha \quad (1.103)$$

D'autre part, en multipliant scalairement l'équation (1.94) par le vecteur  $\vec{v}_\alpha$ , on obtient le bilan de l'énergie cinétique  $k_\alpha = \vec{v}_\alpha \cdot \vec{v}_\alpha / 2$  :

$$\rho^\alpha Dk_\alpha/D_\alpha t - \vec{\nabla} \cdot (\underline{\sigma}^\alpha \vec{v}_\alpha) = \rho^\alpha \vec{g} \cdot \vec{v}_\alpha + \hat{\pi}^\alpha \vec{v}_\alpha \cdot (\hat{v}^{\lambda\alpha} - \vec{v}_\alpha) + \hat{\sigma}^{\lambda\alpha} \cdot \vec{v}_\alpha - \underline{\sigma}^\alpha : \underline{\nabla} \vec{v}_\alpha \quad (1.104)$$

En soustrayant les deux égalités (1.103) et (1.104) membre à membre, on aboutit à l'équation de bilan de l'énergie interne :

$$\rho^\alpha Du_\alpha/D_\alpha t + \vec{\nabla} \cdot \vec{\Psi}_u^\alpha = r^\alpha + \hat{\pi}^\alpha (\hat{e}^\alpha - e_\alpha - \vec{v}_\alpha \cdot (\hat{v}^{\lambda\alpha} - \vec{v}_\alpha)) + \hat{\Gamma}_e^\alpha - \hat{\sigma}^{\lambda\alpha} \cdot \vec{v}_\alpha + \underline{\sigma}^\alpha : \underline{\nabla} \vec{v}_\alpha \quad (1.105)$$



En utilisant (1.94) dans le développement du terme  $\underline{\sigma}^\alpha : \underline{\nabla} \vec{v}_\alpha$  afin de faire apparaître les vitesses  $\vec{v}$  et  $\vec{V}^\alpha$ , la forme lagrangienne dans le mouvement de la phase solide de l'équation (1.105) peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned} \bar{J}D(\rho^\alpha u_\alpha J)/Dt + \vec{\nabla} \cdot (\vec{\Psi}_u^\alpha + (\rho_\alpha u_{\alpha\perp} - \underline{\sigma}_\alpha) \vec{V}^\alpha) &= r^\alpha + \underline{\sigma}^\alpha : \underline{\nabla} \vec{v} \\ -\rho_\alpha \vec{V}^\alpha \cdot (D\vec{v}_\alpha/D_\alpha t - \vec{g}) - \hat{\pi}^\alpha (k_{\alpha\sigma} - k_\sigma) + \hat{\pi}^\alpha \hat{e}^\alpha + \hat{\Gamma}_e^\alpha - \vec{v} \cdot (\hat{\pi}^\alpha \hat{v}^\alpha + \hat{\sigma}^\alpha) \end{aligned} \quad (1.106)$$

avec  $\underline{\sigma}_\alpha = \langle \underline{\sigma} \rangle_\alpha$  et  $k_{\alpha\sigma} = (\vec{v}_\alpha - \vec{v}) \cdot (\vec{v}_\alpha - \vec{v})/2$ . En vertu de (1.93)<sub>2</sub> et (1.102)<sub>2</sub>, et en sommant par rapport à  $\alpha$ , il vient en négligeant les termes d'ordre 2 en  $\vec{v}_\alpha - \vec{v}$  tels que  $k_{\alpha\sigma}$  :

$$\bar{J}\dot{U} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{\Psi}_u + \sum (\rho_\alpha u_{\alpha\perp} - \underline{\sigma}_\alpha) \vec{V}^\alpha) = r + \underline{\sigma} : \underline{\nabla} \vec{v} - \sum \rho_\alpha \vec{V}^\alpha \cdot (D\vec{v}_\alpha/D_\alpha t - \vec{g}) \quad (1.107)$$

avec

$$U = \sum U^\alpha, \quad \vec{\Psi}_u = \sum \vec{\Psi}_u^\alpha, \quad r = \sum r^\alpha \quad (1.108)$$

$$U^\alpha = m^\alpha u_\alpha \quad (1.109)$$

La densité  $U$  est telle que l'énergie interne de la matière contenue à l'instant  $t$  dans un domaine  $\Omega(t)$  du milieu poreux s'écrit sous la forme :  $\mathcal{U}(t) = \int_{\Omega(t)} \sum \rho^\alpha u_\alpha dV = \int_{\Omega(0)} U dV_0$ .

### 3.2.7 Bilan de l'entropie

On suppose que l'équilibre thermique local entre les phases s'établit rapidement et que nous pouvons utiliser une seule température  $T$  pour toutes les phases. En remplaçant dans (1.46) les variables génériques microscopiques par  $\varphi = s$ ,  $\vec{\Gamma} = \vec{\Psi}_s/T$  et  $\gamma = (r + \varpi)/T$ , il vient selon (1.62) :

$$\partial_t (\rho^\alpha s_\alpha) + \vec{\nabla} \cdot (\rho^\alpha s_\alpha \vec{v}_\alpha + \vec{\Psi}_s^\alpha/T) = (r^\alpha + \varpi^\alpha)/T + \hat{\pi}^\alpha \hat{s}^\alpha + \hat{\Gamma}_s^\alpha \quad (1.110)$$

avec

$$\hat{\Gamma}_s^\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} \langle (-\vec{\Psi}_{s|\alpha}/T) \cdot \vec{n}_\alpha \rangle_{\Sigma_{\alpha\beta}}, \quad \sum (\hat{\pi}^\alpha \hat{s}^\alpha + \hat{\Gamma}_s^\alpha) = 0 \quad (1.111)$$

En fonction de la dérivée particulière  $Ds_\alpha/D_\alpha t$ , l'équation (1.110) devient :

$$\rho^\alpha Ds_\alpha/D_\alpha t + \vec{\nabla} \cdot (\vec{\Psi}_s^\alpha/T) = (r^\alpha + \varpi^\alpha)/T + \hat{\pi}^\alpha (\hat{s}^\alpha - s_\alpha) + \hat{\Gamma}_s^\alpha \quad (1.112)$$

En sommant par rapport à  $\alpha$  et sachant (1.111)<sub>2</sub>, on peut aboutir, comme pour l'énergie interne (1.107), à l'équation suivante :

$$\bar{J}\dot{S} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{\Psi}_s/T + \sum \rho_\alpha s_\alpha \vec{V}^\alpha) = (r + \varpi)/T \quad (1.113)$$

avec

$$S = \sum S^\alpha, \quad \vec{\Psi}_s = \sum \vec{\Psi}_s^\alpha, \quad \varpi = \sum \varpi^\alpha \geq 0 \quad (1.114)$$

$$S^\alpha = m^\alpha s_\alpha \quad (1.115)$$

La densité  $S$  est telle que l'entropie de la matière contenue à l'instant  $t$  dans un domaine  $\Omega(t)$  du milieu poreux s'écrit sous la forme :  $\mathcal{S}(t) = \int_{\Omega(t)} \sum \rho^\alpha s_\alpha dV = \int_{\Omega(0)} S dV_0$ .

### 3.3 Lois d'état et lois complémentaires

À ce stade, les deux équations (1.107) et (1.113) relatives respectivement au premier et au second principe semblent découplées, le terme  $r$  en commun ne représente d'une partie des actions de l'extérieur et qui est nul d'ailleurs dans la plupart des applications en géotechnique ; on ne sera en mesure d'évaluer les conséquences que le second principe a sur la formulation des lois de comportement que si on clarifie tout d'abord le lien entre les deux vecteurs flux  $\vec{\Psi}_u$  et  $\vec{\Psi}_s$ . En tant que somme de flux macroscopiques obtenu chacun par le processus de prise de moyenne volumique, ce lien est déjà établi à l'échelle microscopique mais uniquement pour une phase fluide : c'est l'équation (1.37). Concernant la phase solide, c'est ici que s'arrête véritablement son assimilation à une phase comme une autre puisque la complexité de son état thermodynamique ne permet pas de définir la même relation que celle utilisée pour les fluides. Aussi, dans la suite nous supposons que cette phase est un système thermodynamique matériellement fermé ( $\vec{J}_{k\sigma} = \vec{0}$  et  $\hat{\pi}^\sigma = 0$ ). Il en résulte donc les relations suivantes :

$$\vec{\Psi}_s^\alpha = \vec{\Psi}_u^\alpha - \sum \rho_\alpha \mu_{k\alpha}^* \vec{J}_k^\alpha, \quad \alpha \neq \sigma \quad (1.116)$$

$$\vec{\Psi}_s^\sigma = \vec{\Psi}_u^\sigma \quad (1.117)$$

Mais cela ne suffit pas pour exploiter pleinement les relations (1.107) et (1.113) : il faut en plus préciser pour les phases fluides la nature des contraintes qui y règnent ainsi que leurs variables d'état. Concernant les contraintes, nous allons admettre qu'elles sont à dominante hydrostatique :

$$\underline{\sigma}_\alpha = -p_\alpha \underline{1}, \quad \alpha \neq \sigma \quad (1.118)$$

autrement dit, nous négligerons les contraintes visqueuses. Cette hypothèse est justifiée seulement si les vitesses d'écoulement des phases fluides sont faibles. Quant aux variables d'état macroscopiques, comme discuté auparavant (voir § 3.1.2), nous allons supposer qu'elles restent les mêmes que celles décrivant leur comportement à l'échelle microscopique des pores :  $(\nu_\alpha, T, C_\alpha)$  ou  $(p_\alpha, T, C_\alpha)$  avec  $C_\alpha = (c_{1\alpha}, c_{2\alpha}, \dots, c_{q_\alpha-1})$ .

Le fait d'utiliser l'égalité (1.116) suppose déjà que les  $\mu_{k\alpha}^*$  sont les dérivées partielles de l'énergie libre  $f_\alpha(\nu_\alpha, T, C_\alpha)$  par rapports aux concentrations  $c_{k\alpha}$ . En revanche, rien ne permet d'affirmer que la pression mécanique  $p_\alpha$  définie par l'égalité (1.118) est la même que la pression thermodynamique donnée par la dérivée partielle de  $f_\alpha$  par rapport à  $\nu_\alpha$ . De même pour l'entropie  $s_\alpha$ , rien ne garantit que  $s_\alpha = -\partial_T f_\alpha(\nu_\alpha, T, C_\alpha)$ . Nous admettons toutefois que :

$$p_\alpha = -\partial_{\nu_\alpha} f_\alpha(\nu_\alpha, T, C_\alpha), \quad s_\alpha = -\partial_T f_\alpha(\nu_\alpha, T, C_\alpha), \quad \mu_{k\alpha}^* = \partial_{c_{k\alpha}} f_\alpha(\nu_\alpha, T, C_\alpha) \quad (1.119)$$

Cette hypothèse, généralement admise en mécanique des milieux poreux, n'est pourtant pas pleinement convaincante puisque ces égalités ne sont justifiées qu'avec l'hypothèse de l'état local qui, dans le cas précis, n'est pas justifiée car, selon (1.81) et à cause de l'échange de masse entre les phases (le terme  $\hat{\pi}^\alpha$ ), la masse de la phase  $\alpha$  n'est pas conservée comme c'est le cas pour un mélange fluide suivi dans son mouvement barycentrique dans lequel la matière se comporte, d'un point de vue massique, comme si le milieu était localement fermé.

De toutes ces considérations, et en tenant compte des divers bilans déjà établis, la combinaison des équations (1.107) et (1.113) peut conduire à la dissipation volumique  $\varpi$  sous la forme :

$$\begin{aligned} \varpi = & \bar{J} \left( T \dot{\underline{S}} - \dot{\underline{U}} + \underline{J}_{\underline{\sigma}} : \underline{\nabla} \vec{v} + \sum g_\alpha \dot{m}^\alpha + \sum \sum m^\alpha \mu_{k\alpha}^* \dot{c}_{k\alpha} \right) - \vec{\psi} \cdot \vec{\nabla} T / T \\ & - \sum \rho_\alpha \vec{V}^\alpha \cdot \left( \vec{\nabla} g_\alpha + s_\alpha \vec{\nabla} T - \sum \mu_{k\alpha}^* \vec{\nabla} c_{k\alpha} + D \vec{v}_\alpha / D_\alpha t - \vec{g}^\alpha \right) \\ & - \sum \sum \rho_\alpha \vec{J}_k^\alpha \cdot \vec{\nabla}_T (\mu_{k\alpha}^*) - \sum \sum \pi_k^\alpha \mu_{k\alpha}^* - \sum \left( \hat{\pi}^\alpha (g_\alpha - \sum c_{k\alpha} \mu_{k\alpha}^*) + \sum \hat{\pi}_k^\alpha \mu_{k\alpha}^* \right) \end{aligned} \quad (1.120)$$

avec

$$\vec{\psi} = \vec{\Psi}_s + \sum \sum \rho_\alpha T \partial_T \mu_{k\alpha}^* \vec{J}_k^\alpha \quad (1.121)$$

On y voit apparaître dans (1.120) des termes de dissipation bien distingués associés aux phénomènes de conduction thermique, de transport des masses fluides, de diffusion des constituants dans les phases, de réactions chimiques et de changement de phase. En l'absence de ces irréversibilités, il reste la dissipation volumique intrinsèque. La dissipation volumique peut donc être décomposée comme suit :

$$\varpi = \varpi_i + \varpi_\psi + \varpi_V + \varpi_J + \varpi_c \quad (1.122)$$

avec

$$J\varpi_i = T\dot{S} - \dot{U} + J\dot{\underline{\sigma}} : \underline{\nabla} \vec{v} + \sum g_\alpha \dot{m}^\alpha + \sum \sum m^\alpha \mu_{k\alpha}^* \dot{c}_{k\alpha} \quad (1.123)$$

$$\varpi_\psi = -\vec{\psi} \cdot \vec{\nabla} T / T \quad (1.124)$$

$$\varpi_V = -\sum \rho_\alpha \vec{V}^\alpha \cdot (\vec{\nabla} g_\alpha + s_\alpha \vec{\nabla} T - \sum \mu_{k\alpha}^* \vec{\nabla} c_{k\alpha} + D\vec{v}_\alpha / D_\alpha t - \vec{g}) \quad (1.125)$$

$$\varpi_J = -\sum \sum \rho_\alpha \vec{J}_k^\alpha \cdot \vec{\nabla}_T (\mu_{k\alpha}^*) \quad (1.126)$$

$$\varpi_c = -\sum \sum \pi_k^\alpha \mu_{k\alpha}^* - \sum (\hat{\pi}^\alpha (g_\alpha - \sum c_{k\alpha} \mu_{k\alpha}^*) + \sum \hat{\pi}_k^\alpha \mu_{k\alpha}^*) \quad (1.127)$$

Dans ce qui suit, on essayera de dégager les lois d'état à partir de la dissipation intrinsèque et les lois complémentaires à partir des autres dissipations sachant que nous admettons le découplage des dissipations selon la même approche que celle détaillée pour un mélange de fluide (voir § 2.4) :

$$\varpi_i \geq 0, \quad \varpi_\psi \geq 0, \quad \varpi_V \geq 0, \quad \varpi_J \geq 0, \quad \varpi_c \geq 0 \quad (1.128)$$

### 3.3.1 Les lois d'état

En ne considérant que la transformation élastique entre la configuration de référence et la configuration actuelle, nous pouvons avantageusement remplacer le terme  $J\dot{\underline{\sigma}} : \underline{\nabla} \vec{v}$  par  $\underline{\Pi} : \dot{\underline{\Delta}}$  où  $\underline{\Pi} = J\underline{F}^{-1}\dot{\underline{\sigma}}\underline{F}^{-T}$  est le tenseur symétrique de Piola-Kirchhoff, et  $\underline{\Delta} = (\underline{F}^T \underline{F} - \underline{1})/2$  est le tenseur de Green,  $\underline{F}$  étant le gradient de la transformation macroscopique du squelette. En l'absence de dissipations intrinsèques ( $\varpi_i = 0$ ), l'égalité (1.123) permet alors d'écrire :

$$\dot{\mathbb{F}} = \underline{\Pi} : \dot{\underline{\Delta}} - \mathbb{S}\dot{T} + \sum g_\alpha \dot{m}^\alpha + \sum \sum m^\alpha \mu_{k\alpha}^* \dot{c}_{k\alpha} \quad (1.129)$$

avec

$$\mathbb{F} = \sum \mathbb{F}^\alpha, \quad \mathbb{F}^\alpha = m^\alpha f_\alpha \quad (1.130)$$

où  $\mathbb{F}$  est la densité volumique lagrangienne de l'énergie libre. En écrivant  $\mathbb{F} = \mathbb{F}^\sigma + \sum \mathbb{F}^\alpha$  et  $\mathbb{S} = \mathbb{S}^\sigma + \sum \mathbb{S}^\alpha$ , l'égalité (1.129) peut être alors réarrangée sous la forme :

$$\dot{\mathbb{G}}^\sigma - \underline{\Pi} : \dot{\underline{\Delta}} + \mathbb{S}^\sigma \dot{T} + \sum N_\alpha \dot{p}_\alpha = \sum \varpi_i^\alpha J \quad (1.131)$$

avec

$$\varpi_i^\alpha / \rho^\alpha = -\dot{f}_\alpha - p_\alpha \dot{\nu}_\alpha - s_\alpha \dot{T} + \sum \mu_{k\alpha}^* \dot{c}_{k\alpha} \quad (1.132)$$

$$\mathbb{G}^\sigma = \mathbb{F}^\sigma - \sum N_\alpha p_\alpha, \quad N_\alpha = n_\alpha J \quad (1.133)$$

Compte tenu de (1.119), la quantité  $\varpi_i^\alpha$  est nulle. Il devient donc possible, compte tenu de (1.131), de déduire que :

$$\mathbb{G}^\sigma = \underline{\underline{\Pi}} : \underline{\underline{\dot{\Delta}}} - \mathbb{S}^\sigma \dot{T} - \sum N_\alpha \dot{p}_\alpha \quad (1.134)$$

Si nous considérons les variables macroscopiques  $(\underline{\underline{\Delta}}, T, P)$ , où  $P = (p_\alpha, p_\beta, \dots, p_\varphi)$  désigne les pressions des phases fluides, comme indépendantes, elles définissent alors un paramétrage de variables d'état auquel on peut associer le potentiel thermodynamique  $\mathbb{G}^\sigma(\underline{\underline{\Delta}}, T, P)$ . L'égalité (1.134) doit être satisfaite pour toute variation de l'état, on en déduit donc :

$$\underline{\underline{\Pi}} = \partial_{\underline{\underline{\Delta}}} \mathbb{G}^\sigma(\underline{\underline{\Delta}}, T, P), \quad \mathbb{S}^\sigma = -\partial_T \mathbb{G}^\sigma(\underline{\underline{\Delta}}, T, P), \quad N_\alpha = -\partial_{p_\alpha} \mathbb{G}^\sigma(\underline{\underline{\Delta}}, T, P) \quad (1.135)$$

Les équations (1.119) et (1.135), reliant les variables  $(\nu_\alpha, T, C_\alpha)$  et  $(\underline{\underline{\Delta}}, T, P)$  aux variables duales qui leur sont associées  $(p_\alpha, s_\alpha, \mu_{k\alpha}^*)$  et  $(\underline{\underline{\Pi}}, S_\sigma, N_\alpha)$  forment les lois d'état macroscopiques du milieu poreux ; elles dérivent des deux potentiels thermodynamiques  $f_\alpha$  et  $\mathbb{G}^\sigma$ . Nous nous retrouvons donc avec autant de potentiels thermodynamiques que de phases. Il convient cependant de ne pas perdre de vue que les équations (1.135) concernent le “squelette” et non pas la phase solide à l'échelle microscopique des grains.

Les hypothèses formulées pour les phases fluides simplifient grandement les lois d'état de ces phases ; elles sont les mêmes que lorsque les phases sont hors du milieu poreux. Toutefois, et en dépit de toutes ces simplifications, le problème reste encore entier en ce qui concerne le potentiel  $\mathbb{G}^\sigma$ . En effet, les limitations pratiques font que la détermination expérimentale de ce potentiel n'est possible que suivant quelques trajets de sollicitation qui ne donnent finalement accès qu'à des dérivées partielles de  $\mathbb{G}^\sigma$ . C'est ce que nous efforcerons d'analyser dans la suite en partant de la dérivée lagrangienne des relations (1.135) :

$$\dot{\underline{\underline{\Pi}}} = \underline{\underline{H}} : (\underline{\underline{\dot{\Delta}}} - \underline{\underline{A}} \dot{T}) - \sum \underline{\underline{B}}_\alpha \dot{p}_\alpha, \quad \dot{\mathbb{S}}^\sigma = \underline{\underline{H}} : \underline{\underline{A}} : \underline{\underline{\dot{\Delta}}} + \rho_0^\sigma C_\Delta \dot{T} / T - \sum A_{n\alpha} \dot{p}_\alpha \quad (1.136)$$

$$\dot{N}_\alpha = \underline{\underline{B}}_\alpha : \underline{\underline{\dot{\Delta}}} - A_{n\alpha} \dot{T} + \sum \bar{M}_{\alpha\beta} \dot{p}_\beta \quad (1.137)$$

qui font apparaître plusieurs coefficients, de nature tensorielles différentes, qui sont des dérivées partielles de  $\mathbb{G}^\sigma$ . Ils ont les significations physiques suivantes :

- $\underline{\underline{H}}$  : tenseur d'ordre quatre d'élasticité de Hooke. Il relie linéairement l'incrément du tenseur des contraintes  $\underline{\underline{\Pi}}$  à un incrément du tenseur des déformations  $\underline{\underline{\Delta}}$  dans toute évolution à température et pressions de fluides constantes. C'est le tenseur des modules d'élasticité isotherme et drainé (selon l'usage, une évolution est dite drainée si les pressions des phases fluides restent constantes).
- $\underline{\underline{A}}$  : tenseur d'ordre deux de dilatation thermique volumique. Il relie linéairement l'incrément du tenseur des déformations  $\underline{\underline{\Delta}}$  à un incrément de température dans toute évolution à contraintes et pressions de fluides constantes.
- $\underline{\underline{B}}_\alpha$  : tenseur d'ordre deux de couplage hydro-mécanique. Il relie linéairement l'incrément du tenseur des contraintes  $\underline{\underline{\Pi}}$  à un incrément de la pression  $p_\alpha$  de la phase  $\alpha$  dans toute évolution à température, déformation et pressions de fluide  $p_\beta$  ( $\beta \neq \alpha$ ) constantes. Par effet de couplage, il permet aussi de relier linéairement un incrément de  $N_\alpha$  à un incrément de  $\underline{\underline{\Delta}}$  dans toute évolution à température et pressions de fluides constantes.
- $C_\Delta$  : coefficient scalaire qui correspond à une capacité thermique massique à déformation et pressions de fluides constantes.
- $A_{n\alpha}$  : coefficient scalaire qui relie linéairement un incrément de  $N_\alpha$  à un incrément de température dans toute évolution à déformation et pressions de fluides constantes.

- $\bar{M}_{\alpha\beta} = 1/M_{\alpha\beta}$  : coefficient scalaire qui relie linéairement un incrément de  $N_\alpha$  à un incrément de la pression  $p_\beta$  de la phase  $\beta$  dans toute évolution à température, déformation et pressions de fluides  $p_\gamma$  ( $\gamma \neq \beta$ ) constantes. Les coefficients  $M_{\alpha\beta}$  forment les composantes d'une matrice symétrique.

En sommant membre à membre l'égalité (1.137) et sachant que  $N = \sum N_\alpha$ , il vient :

$$\dot{N} = \underline{B} : \underline{\dot{\Delta}} - A_n \dot{T} + \sum \bar{M}_{\alpha} \dot{p}_\alpha \quad (1.138)$$

avec

$$\underline{B} = \sum \underline{B}_\alpha, \quad A_n = \sum A_{n\alpha}, \quad \bar{M}_\alpha = \sum \bar{M}_{\alpha\beta} \quad (1.139)$$

L'avantage de la relation (1.138) est qu'elle est globale et par conséquent mieux accessible à l'expérimentation que les fractions volumiques partielles  $N_\alpha$  définies par les relations (1.137). Toutefois, elle ne représente qu'une seule équation scalaire alors que les relations (1.137) définissent autant d'équations qu'il y a de phases fluides dans le milieu poreux. Un moyen de contourner cette difficulté est de chercher des corrélations explicites entre les coefficients partiels ( $\underline{B}_\alpha, A_{n\alpha}, \bar{M}_{\alpha\beta}$ ) et les coefficients globaux ( $\underline{B}, A_n, \bar{M}_\alpha$ ) ; cela peut passer par l'introduction du degré de saturation  $S_\alpha = n_\alpha/n = N_\alpha/N$ .

En introduisant  $S_\alpha$  dans (1.134), nous pouvons aboutir à l'écriture suivante :

$$\dot{\mathbb{P}} = \underline{\mathbb{P}} : \underline{\dot{\Delta}}/N - \mathbb{S}^\sigma \dot{T}/N - \mathbb{G}^\sigma \dot{N}/N^2 - \sum S_\alpha \dot{p}_\alpha^* \quad (1.140)$$

avec

$$\mathbb{P} = p_\varphi + \mathbb{G}^\sigma/N, \quad p_\alpha^* = p_\alpha - p_\varphi, \quad p_\varphi^* = 0 \quad (1.141)$$

où  $\varphi$  désigne ici la dernière phase fluide présente dans le milieu poreux. Ainsi, si nous considérons les variables  $(\underline{\Delta}, T, N, P^*)$ , avec  $P^* = (p_\alpha - p_\varphi, p_\beta - p_\varphi, \dots)$ , comme variables indépendantes, elles peuvent définir un paramétrage de variables d'état auquel on peut associer le potentiel thermodynamique  $\mathbb{P}(\underline{\Delta}, T, N, P^*)$ . En particulier, il vient :

$$-S_\alpha = \partial_{p_\alpha^*} \mathbb{P}(\underline{\Delta}, T, N, P^*), \quad \alpha \neq \varphi \quad (1.142)$$

Ce qui permet d'écrire :

$$-\dot{S}_\alpha = \underline{L}_\alpha^\Delta : \underline{\dot{\Delta}} + L_\alpha^T \dot{T} + L_\alpha^N \dot{N} + \sum L_{\alpha\beta}^P \dot{p}_\beta^*, \quad \alpha \neq \varphi \quad (1.143)$$

où les coefficients  $L_\alpha$  sont les dérivées partielles de  $\partial_{p_\alpha^*} \mathbb{P}$  par rapport aux variables  $(\underline{\Delta}, T, N, P^*)$  obtenues lors du passage de (1.142) à (1.143). Sachant que  $\sum S_\alpha = 1$ , d'où :  $\dot{S}_\varphi = -\sum_{\alpha \neq \varphi} \dot{S}_\alpha$ ,

et en écrivant  $\dot{S}_\varphi$  sous la même forme que (1.143), on en déduit :

$$\underline{L}_\varphi^\Delta = -\sum_{\alpha \neq \varphi} \underline{L}_\alpha^\Delta, \quad L_\varphi^T = -\sum_{\alpha \neq \varphi} L_\alpha^T, \quad L_\varphi^N = -\sum_{\alpha \neq \varphi} L_\alpha^N \quad (1.144)$$

$$L_{\varphi\beta}^P = L_{\beta\varphi}^P = -\sum_{\alpha \neq \varphi} L_{\alpha\beta}^P \quad (1.145)$$

Or, d'un autre côté, d'après la définition de  $S_\alpha$  et la loi d'évolution de  $N$ , on peut écrire :

$$N \dot{S}_\alpha = (\underline{B}_\alpha - S_\alpha \underline{B}) : \underline{\dot{\Delta}} - (A_{n\alpha} - S_\alpha A_n) \dot{T} + \sum (\bar{M}_{\alpha\beta} - S_\alpha \bar{M}_\beta) \dot{p}_\beta \quad (1.146)$$

En rapprochant les deux égalités (1.143) et (1.146), et en utilisant l'expressions de  $\dot{N}$ , on peut en déduire les relations suivantes :

$$\underline{B}_\alpha = -N \underline{L}_\alpha^\Delta + \tilde{S}_\alpha \underline{B}, \quad A_{n\alpha} = N L_\alpha^T + \tilde{S}_\alpha A_n, \quad \bar{M}_{\alpha\beta} = -N L_{\alpha\beta}^P + \tilde{S}_\alpha \bar{M}_\beta, \quad \tilde{S}_\alpha = S_\alpha - N L_\alpha^N \quad (1.147)$$

avec

$$\bar{M}_\alpha = \tilde{S}_\alpha \bar{M}, \quad \bar{M} = \sum \bar{M}_\alpha \quad (1.148)$$

Remarquons en particulier que si on remplace dans l'égalité (1.138)  $\bar{M}_\alpha$  par son expression donnée par (1.147)<sub>1</sub>, on obtient une nouvelle expression de  $\dot{N}$  :

$$\dot{N} = \underline{B} : \underline{\dot{\Delta}} - A_n \dot{T} + \bar{M} \sum \tilde{S}_\alpha \dot{p}_\alpha \quad (1.149)$$

beaucoup plus intéressante que celle exprimée par (1.138) car, sachant que  $\sum \tilde{S}_\alpha = 1$ , on peut identifier expérimentalement les coefficients globaux  $(\underline{B}, A_n, \bar{M})$  à partir du milieu poreux saturé par une seule phase fluide.

L'introduction du degré de saturation permet ainsi de ramener le problème de la détermination expérimentale des coefficients partiels  $(\underline{B}_\alpha, A_{n\alpha}, \bar{M}_{\alpha\beta})$  à la connaissance d'une part des coefficients globaux  $(\underline{B}, A_n, \bar{M})$  et d'autre part des degrés de saturation  $S_\alpha$  en tant que fonctions de  $(\underline{\Delta}, T, N, P^*)$ ; le problème reste bien sûr entier si ces fonctions sont aussi difficiles à déterminer que les coefficients partiels.

### 3.3.2 Les lois complémentaires

Pour assurer la positivité de la dissipation thermique  $\varpi_\psi = -\vec{\psi} \cdot \vec{\nabla} T/T$  associée à la conduction de la chaleur dans tout le milieu poreux, on introduit la loi de Fourier semblable à celle des milieux non poreux :

$$\vec{\psi} = -\underline{\Lambda} \vec{\nabla} T \quad (1.150)$$

où  $\underline{\Lambda}$  est le tenseur global de conductivité thermique.

Concernant la dissipation  $\varpi_V$ , en écrivant le gradient de l'enthalpie libre  $g_\alpha = g_\alpha(p_\alpha, T, C_\alpha)$  sous la forme :  $\vec{\nabla} g_\alpha = \partial_{p_\alpha} g_\alpha \vec{\nabla} p_\alpha + \partial_T g_\alpha \vec{\nabla} T + \sum \partial_{c_{k\alpha}} g_\alpha \vec{\nabla} c_{k\alpha}$  avec  $\partial_{p_\alpha} g_\alpha = \nu_\alpha$ ,  $\partial_T g_\alpha = -s_\alpha$  et  $\partial_{c_{k\alpha}} g_\alpha = \mu_{k\alpha}^*$ , il vient :

$$\varpi_V = -\sum \vec{V}^\alpha \cdot (\vec{\nabla} p_\alpha + \rho_\alpha (D\vec{v}_\alpha/D_\alpha t - \vec{g})) \quad (1.151)$$

Pour avoir la positivité de  $\varpi_V$ , il suffit alors de généraliser la loi de Darcy et d'écrire, pour chaque phase  $\alpha$  :

$$\vec{V}^\alpha = -\frac{\underline{K}_\alpha}{\eta_\alpha} \left( \vec{\nabla} p_\alpha + \rho_\alpha (D\vec{v}_\alpha/D_\alpha t - \vec{g}) \right) \quad (1.152)$$

qui utilise la viscosité dynamique  $\eta_\alpha$  de la phase fluide  $\alpha$  et un tenseur de perméabilité intrinsèque  $\underline{K}_\alpha$  caractérisant le vide de l'espace poreux occupé par la phase  $\alpha$ .

En ce qui concerne la dissipation  $\varpi_J = -\sum \sum \rho_\alpha \vec{J}_k^\alpha \cdot \vec{\nabla} T(\mu_{k\alpha}^*)$ , pour assurer sa positivité, il suffit d'avoir :

$$\vec{J}_k^\alpha = -\sum_j \underline{D}_{kj\alpha} \vec{\nabla} T(\mu_{j\alpha}^*) \quad (1.153)$$

avec des conditions restrictives sur les coefficients  $\underline{D}_{kj\alpha}$  afin d'avoir une forme quadratique définie positive. Dans le cas particulier d'une phase  $\alpha$  avec seulement deux constituants  $k$  et  $j$ , et en notant par  $c$  la fraction massique du constituant  $k$  et par  $\vec{J}$  le vecteur  $\vec{J}_k^\alpha$ , il vient :  $\vec{J} = -(\partial_{cp_\alpha}^2 g_\alpha) \underline{D}_{kk\alpha} \vec{\nabla} p_\alpha - (\partial_c^2 g_\alpha) \underline{D}_{kk\alpha} \vec{\nabla} c$ . Si en outre le constituant  $k$  à une faible concentration  $c$  de telle sorte que le volume massique de la phase  $\nu_\alpha = \partial_{p_\alpha} g_\alpha$  soit très peu influencé par  $c$  ( $\partial_c \nu_\alpha = \partial_{cp_\alpha}^2 g_\alpha \approx 0$ ), nous pouvons négliger le transport par gradient de pression et retrouver, en posant  $\underline{D}_\alpha = (\partial_c^2 g_\alpha) \underline{D}_{kk\alpha}$ ,  $\partial_c^2 g_\alpha$  étant strictement positive, une forme

semblable à la loi de Fick pour un mélange binaire dans le cas d'une vitesse de référence barycentrique :

$$\vec{J} = -\underline{D}_\alpha \vec{\nabla} c \quad (1.154)$$

Quant à la dissipation  $\varpi_c$ , sachant que le terme  $\hat{\pi}^\alpha(g_\alpha - \sum c_{k\alpha}\mu_{k\alpha}^*) + \sum \hat{\pi}_k^\alpha \mu_{k\alpha}^*$  peut s'écrire grâce à la relation d'Euler et à la relation (1.90)<sub>2</sub> sous la forme  $\sum \hat{\pi}_k^\alpha \mu_{k\alpha}$ , il vient :

$$\varpi_c = -\sum \sum \pi_k^\alpha \mu_{k\alpha}^* - \sum \sum \hat{\pi}_k^\alpha \mu_{k\alpha} \quad (1.155)$$

Cette forme regroupe deux termes qui peuvent être traités séparément : un lié aux réactions chimiques qui peuvent se produire entre les constituants au sein d'une même phase et un deuxième relatif aux échanges de masse entre les phases. Dans le cas particulier de deux phases  $\alpha$  et  $\beta$  échangeant un seul constituant  $k$ , on aboutit, compte tenu de (1.86)<sub>2</sub>, à la relation :

$$\varpi_c = \hat{\pi}_k^\alpha (\mu_{k\beta} - \mu_{k\alpha}) \quad (1.156)$$

qui fait apparaître la différence des potentiels chimiques du constituant  $k$  dans les deux phases. Pour assurer la positivité de  $\varpi_c$ , il suffit d'introduire alors un coefficient  $\tau_k^{\alpha\beta} \geq 0$  tel que :

$$\tau_k^{\alpha\beta} \hat{\pi}_k^\alpha = \mu_{k\beta} - \mu_{k\alpha} \quad (1.157)$$

Le cas  $\tau_k^{\alpha\beta} = 0$  correspond à un changement de phase sans dissipation, ce qui se traduit alors par l'égalité des potentiels chimiques.

### 3.4 Équation de la chaleur

Compte tenu de (1.121) et en écrivant que  $\mathbb{S} = \mathbb{S}^\sigma + \sum \mathbb{S}^\alpha$ , l'équation de l'entropie (1.113) devient :

$$\bar{J}T\dot{\mathbb{S}}^\sigma + \sum \bar{J}T\dot{\mathbb{S}}^\alpha + \sum T\vec{\nabla} \cdot (\rho_\alpha s_\alpha \vec{V}^\alpha + \sum \rho_\alpha \partial_{c_{k\alpha}} s_\alpha \vec{J}_k^\alpha) + \vec{\nabla} \cdot \vec{\psi} = r + \varpi - \varpi_\psi \quad (1.158)$$

qui est une forme encore insuffisamment explicite de l'équation de la chaleur : pour parvenir à l'équation définitive il faut introduire les équations d'état et la loi complémentaire de conduction thermique de Fourier.

En partant de la définition de  $\mathbb{S}^\alpha$ , il vient :  $\bar{J}T\dot{\mathbb{S}}^\alpha = \rho^\alpha T \dot{s}_\alpha + \bar{J}\dot{m}^\alpha T s_\alpha$ . Dans le cas du squelette, suite à l'hypothèse retenue au moment de la formulation des lois de comportement quant à son caractère de système matériellement fermé, on a bien  $\dot{m}^\sigma = 0$ , et par conséquent, en combinant les relations (1.136)<sub>1</sub> et (1.136)<sub>2</sub>, on peut exprimer  $\bar{J}T\dot{\mathbb{S}}^\sigma$  sous la forme :

$$\bar{J}T\dot{\mathbb{S}}^\sigma = \rho^\sigma T \dot{s}_\sigma = \frac{\rho^\sigma}{\rho_0^\sigma} T \underline{A} : \underline{\dot{\Pi}} + \rho^\sigma C_\sigma \dot{T} + \sum \frac{\rho^\sigma}{\rho_0^\sigma} (\underline{A} : \underline{B}_\alpha - A_{n\alpha}) T \dot{p}_\alpha \quad (1.159)$$

avec

$$C_\sigma = C_\Delta + \frac{1}{\rho_0^\sigma} T \underline{A} : \underline{H} : \underline{A} \quad (1.160)$$

où  $C_\sigma$  représente la capacité thermique à contraintes et pressions de fluides constantes.

D'autre part, on a pour les phases fluides, en écrivant que l'entropie massique  $s_\alpha$  est fonction de l'état  $(p_\alpha, T, C_\alpha)$  :

$$\rho^\alpha T \dot{s}_\alpha = -\frac{\rho^\alpha}{\rho_\alpha} T A_{p\alpha} \dot{p}_\alpha + \rho^\alpha C_{p\alpha} \dot{T} + \sum \rho^\alpha T (\partial_{c_{k\alpha}} s_\alpha) \dot{c}_{k\alpha} \quad (1.161)$$

où  $C_{p\alpha} = T\partial_T s_\alpha(p_\alpha, T, C_\alpha)$  et  $A_{p\alpha} = -\partial_T \rho_\alpha(p_\alpha, T, C_\alpha)/\rho_\alpha$  sont respectivement la capacité thermique et la dilatation thermique volumique à pression et compositions constantes de la phase fluide  $\alpha$ .

De ces considérations et, moyennant quelques manipulations élémentaires des équations, on parvient à la forme suivante de l'équation de la chaleur :

$$\begin{aligned} & \rho C_p \dot{T} + \sum \left\{ \left( \frac{\rho^\sigma}{\rho_0^\sigma} (\underline{\underline{A}} : \underline{\underline{B}}_\alpha - A_{n\alpha}) - \frac{\rho^\alpha}{\rho_\alpha} A_{p\alpha} \right) T \dot{p}_\alpha + \vec{\nabla}^\alpha \cdot (\rho_\alpha C_{p\alpha} \vec{\nabla} T - A_{p\alpha} T \vec{\nabla} p_\alpha) \right\} \\ & + \frac{\rho^\sigma}{\rho_0^\sigma} T \underline{\underline{A}} : \underline{\underline{\dot{\Pi}}} = \varpi_V + r + \vec{\nabla} \cdot (\underline{\underline{\Lambda}} \vec{\nabla} T) - \sum \sum (\hat{\pi}_k^\alpha \bar{h}_{k\alpha} + \pi_k^\alpha \partial_{c_{k\alpha}} h_\alpha + \rho_\alpha \vec{J}_k^\alpha \cdot \vec{\nabla} (\partial_{c_{k\alpha}} h_\alpha)) \end{aligned} \quad (1.162)$$

avec

$$\rho C_p = \rho^\sigma C_\sigma + \sum \rho^\alpha C_{p\alpha} \quad (1.163)$$

$$\bar{h}_{k\alpha}(p_\alpha, T, C_\alpha) = h_\alpha + \partial_{c_{k\alpha}} h_\alpha - \sum c_{j\alpha} \partial_{c_{j\alpha}} h_\alpha \quad (1.164)$$

où nous avons considéré une dissipation intrinsèque  $\varpi_i$  nulle et inséré la loi complémentaire de conduction de Fourier.



# Chapitre 2

## Les lois de comportement

---

Mes travaux dans ce domaine s'articulent autour de quatre axes :

- comportement thermo-mécanique des roches salines en lien avec l'exploitation du sel gemme et le stockage de fluides dans les cavités salines ;
- comportement anisotrope des roches en lien avec le stockage profond des déchets radioactifs ;
- comportement dynamique des roches en lien avec les processus industriels de fragmentation des roches ;
- comportement thermodynamique des fluides en lien avec les nouvelles stratégies d'exploitation du sous-sol pour le stockage massif de l'énergie.

Aujourd'hui, l'évolution du marché du stockage en cavités salines amène les opérateurs à un développement accru du nombre de cavités et à une modification du mode d'exploitation en augmentant les fréquences des cycles injection/soutirage. Face à cette évolution, la compréhension du comportement rhéologique du sel gemme devient d'une importance capitale et les industriels qui se contentaient, il y a quelques années, d'une modélisation globale simplifiée, cherchent de nos jours des modèles de plus en plus fins pour décrire correctement le comportement de leurs ouvrages. C'est dans ce contexte que j'ai assuré l'encadrement de la thèse de Paule Labaune [38] sur l'élaboration d'une nouvelle loi de comportement des roches salines (Rouabhi et al. [3], Labaune and Rouabhi [39], Labaune et al. [40]) capable de mieux interpréter les travaux récents au niveau expérimentation en laboratoire et instrumentation *in situ*. Actuellement, la recherche se poursuit avec la thèse de Mejda Azabou et dans le cadre d'un projet de recherche financé par le programme CITEPH et supporté par Storengy et Géostock.

Concernant le comportement anisotrope des roches, j'ai surtout travaillé sur les argilites (de Tournemire et de Bure) aussi bien dans des projets européens et internationaux tels que MODEX-REP [41] et DECOVALEX [42], que dans le cadre de collaboration directe avec l'IRSN ou l'ANDRA. Ainsi, j'ai pu élaborer une nouvelle loi de comportement pour l'argilite de Tournemire (Rouabhi et al. [2]) et assurer l'encadrement de la thèse de Mohamed Mahjoub [43] sur l'effet de l'anisotropie initiale et induite sur les propriétés de transport (Mahjoub et al. [44], Mahjoub and Rouabhi [45, 46]). Cette dernière thématique est toujours d'actualité au sein de l'équipe pour des applications de type forage pétrolier ou géothermie.

Quant au comportement dynamique des roches, problématique traitée depuis mes travaux de thèse (Rouabhi et al. [1]), elle intègre actuellement des applications innovantes telles que le forage par percussion (thèse de Houssam Dannawy) ou encore la fragmentation par pulse électrique (collaboration avec l'université de Dresde (Allemagne) et Soletanche Bachy).

Le dernier axe, aujourd'hui en très fort développement, concerne divers fluides qu'on cherche à stocker en souterrain (gaz naturel, air, hélium, hydrogène, dioxyde de carbone...).

Ma contribution dans ce domaine ne s'arrête pas à l'intégration des lois d'état et de transport de fluides dans nos logiciels dédiés aux structures souterraines de stockage tels que Geo1d ou Demether, mais également à l'élaboration, en cas de besoin, de nouvelles lois d'état. C'est ainsi que, dans le cadre du projet ANR Search (2009-2014) dédié au Stockage d'Electricité par Air comprimé avec Récupération de la CHaleur de compression [47], j'ai pu proposer une loi de comportement pour l'air humide qui a été validée par la suite dans le cadre de la thèse que j'ai co-encadrée de Anis Murr [48]. J'ai également travaillé sur la construction d'une méthodologie numérique permettant de retrouver le potentiel thermodynamique des mélanges de gaz en tant que fluides divariants lorsque la composition ne varie pas trop dans le temps.

Afin d'illustrer cet axe de recherche, je vais détailler dans ce qui suit les lois de comportement respectivement des roches salines et de l'aire humide.

## 1 Lois de comportement des roches salines

### 1.1 Hypothèses principales

Les lois de comportement des roches salines sont établies à partir d'essais de laboratoire sur des échantillons (éprouvettes) cylindriques et reposent sur deux hypothèses principales : la représentativité des échantillons et l'homogénéité de l'état thermodynamique.

Pour les modèles de comportement phénoménologiques (Norton-Hoff, Munson-Dawson([49], [50]), Lemaitre ([51]), etc), que les logiciels industriels modernes de calcul des structures utilisent, la représentativité des échantillons est parfois limitée par les performances du dispositif expérimental : la taille de l'éprouvette est dictée, non pas par des considérations physiques, mais par la machine de l'essai qui doit respecter, pour des raisons pratiques d'encombrement et de coût, certaines contraintes techniques. Ceci est surtout vrai lorsque les éprouvettes de sel contiennent des insolubles de différentes tailles. Dans ce cas, l'idéal serait d'adapter à chaque fois la taille de l'éprouvette à la taille de ses hétérogénéités : elle doit comporter un nombre suffisamment grand d'hétérogénéités pour que la réponse globale du matériau soit indépendante de l'influence d'une hétérogénéité par rapport à une autre ; dans une campagne d'essais sur le même sel et pour que toutes les éprouvettes soient testées dans les mêmes conditions, afin de limiter les dispersions des résultats liées aux dimensions, cela peut se traduire par un choix qui fixe la même taille à celle correspondant à la plus grande des éprouvettes. En pratique, si cette taille est incompatible avec les dimensions du dispositif expérimental, il est parfois possible d'accepter cette incompatibilité mais en contre partie, et avant de se confier pleinement aux prédictions du modèle, il convient de le valider par des confrontations à des mesures *in situ*. Cette approche est illustrée par Tijani et al. [52] dans le cadre d'une confrontation entre mesures *in situ* et calcul utilisant une loi de comportement établie sur la base d'essais de fluage sur des éprouvettes contenant environ 30 % d'insolubles de différentes tailles.

Concernant l'homogénéité de l'état thermodynamique (contrainte, température, etc), elle rentre dans la démarche classique de traitement des essais de laboratoire. C'est une simplification qui a sa raison d'être mais qui n'est pas nécessairement justifiée. Sa raison d'être est de faciliter l'analyse des résultats car, en cas d'homogénéité, l'état peut être déterminé directement à partir des mesures à la frontière de l'éprouvette évitant ainsi la résolution d'un problème inverse délicat qui nécessite le recours à des calculs numériques d'identification de paramètres associés à des lois de comportement pré-établies. En effet, lors des essais triaxiaux classiques, le contact des plateaux de la presse avec l'éprouvette peut générer une

hétérogénéité des contraintes à l'intérieur de l'éprouvette et qui peut gêner les mesures surfaciques et amène, par conséquent, à commettre des erreurs non seulement d'ordre quantitatif mais aussi d'interprétation des phénomènes physiques mis en jeu. Cette hétérogénéité se manifeste macroscopiquement d'une part par la perte de la forme cylindrique de l'éprouvette, et d'autre part, pour des faibles pressions de confinement, par une fissuration orientée suivant l'axe de l'éprouvette témoignant de l'existence de contraintes "parasites" de traction ; dans ce cas, les jauges collées sur la surface de l'éprouvette ne mesurent pas seulement les déformations associées aux contraintes compressives mais aussi à celles causées par l'ouverture des fissures créées. Cependant, l'expérience montre que, généralement, cela ne remet pas en cause la forme de la loi de comportement déduite des essais de laboratoire, seuls les paramètres associés à la loi sont à considérer avec précaution : souvent ils ont besoin d'être légèrement modifiés pour bien reproduire les mesures *in situ*. Hadj-Hassen et al. [53] donnent un exemple qui permet d'interpréter correctement les convergences à l'échelle d'une mine de sel en ne modifiant que légèrement un seul des paramètres de la loi de comportement.

Dans la suite, je vais adopter ces deux hypothèses pour l'élaboration de la nouvelle loi de comportement du sel gemme. En particulier, je vais supposer que le phénomène de dilatance est intrinsèque à la roche et qu'il n'est pas simplement un artefact structural lié aux conditions d'adhérence des plateaux de la presse à l'échantillon (phénomène de frettage) comme dans l'approche de Tijani [54].

## 1.2 La nécessité d'une nouvelle loi

Dans la pratique des cavités salines, on distingue souvent deux problèmes : la perte de volume et la stabilité mécanique de la cavité.

Le premier, lié à la déformabilité du sel, est celui sur lequel il y a eu le plus de travaux de recherche car il rentre directement dans la maîtrise du volume du stock : une perte significative du volume peut mettre en cause la faisabilité même du stockage. Ces travaux sont essentiellement basés sur des essais de fluage qui sont historiquement justifiés par les sollicitations lentes que peuvent subir les cavités salines. Aujourd'hui, avec le développement de sollicitations rapides, le besoin de disposer d'un modèle qui peut rendre compte à la fois des essais triaxiaux à vitesses imposées - on les appellera, par la suite, simplement essais triaxiaux - et des essais de fluage devient crucial surtout que les résultats des essais triaxiaux ne sont généralement pas exploités lors de la formulation de la loi de comportement comme ce sera expliqué ci-après.

Le deuxième problème, plus compliqué à résoudre, est celui sur lequel il y a eu le plus de tâtonnement ; sur quel critère pratique la stabilité d'un ouvrage, creusé dans un matériau qui peut subir sans dommage excessif des déformations irréversibles importantes, peut être jugée ? un critère en déformation... , un critère en vitesse de déformation... , un critère en contrainte... L'assimilation du sel à un liquide visqueux (Tijani [51]) n'a fait que compliquer davantage la situation puisque d'une part les zones "plastiques" peuvent s'étendre jusqu'à l'infini, et d'autre part, en cas de contraintes initiales anisotropes donnant lieu à un déviateur significatif, le massif salin devait être en train de fluer, avec des vitesses de déformation non nulles, avant même la création de la cavité. En l'absence d'une méthodologie claire et scientifiquement robuste, les ingénieurs ont utilisé pendant des années et sans conviction véritable, chacun de son côté et en fonction des besoins, l'un ou l'autre des critères. Aujourd'hui, la situation semble converger vers un critère en contrainte basé sur les mesures des déformations volumiques du sel pendant les essais triaxiaux, ce sont ces mêmes déformations

qui ont toujours été négligées devant la prépondérance des déformations plastiques déviatoriques. Ce critère, dit de dilatance, exprime le fait qu’au cours d’un essai triaxial, où toutes les charges appliquées sont compressives, le volume de l’éprouvette peut augmenter à partir d’une certaine frontière dans l’espace des contraintes qui délimite le comportement contractant du sel. C’est ainsi que les essais triaxiaux, habituellement utilisés pour la détermination des constantes élastiques (module de Young et coefficient de Poisson), se trouvent propulsés au coeur d’une méthodologie aujourd’hui appliquée par plusieurs chercheurs y compris mes collègues du Centre de Géosciences et moi-même : après un calcul utilisant une loi de comportement basée sur les essais de fluage, il s’agit de surveiller au cours du temps les zones dans lesquelles ce critère est violé et à vérifier que ces zones restent limitées. Même si cette démarche semble logique, elle est incohérente : pour un matériau, combiner plusieurs essais de laboratoire afin d’identifier sa loi de comportement est une démarche saine et robuste, sauf qu’ici on ne combine pas les essais pour fabriquer une seule loi avec un seul jeu de paramètre, on les combine pour fabriquer plusieurs lois avec plusieurs jeux de paramètres. Mais, si cette démarche est aujourd’hui utilisée c’est parce que, en dépit de leur multiplicité, les modèles actuels sont incapables de bien décrire les résultats des essais à la fois triaxiaux “rapides” et de fluage. En effet, si un modèle est apte à reproduire correctement le comportement thermo-mécanique du sel, il sera en particulier en mesure de décrire aussi le phénomène de dilatance et ce fameux critère ne sera par conséquent qu’un résultat de ce modèle, résultat fonction forcément de la vitesse de sollicitation puisque le modèle concerne un matériau très visqueux ; son calage sur différents essais (fluage et autres) doit fournir le même jeu de paramètres. Un dernier point qui mérite d’être souligné est relatif à cette notion de “stabilité” et son lien avec le critère de dilatance. Pendant les essais triaxiaux, le phénomène de dilatance n’est généralement accompagné d’aucune fissuration macroscopique des échantillons ; cette fissuration est dans la plupart du temps observée après des déformations déviatoriques très importantes qui ne sont pas habituellement atteintes autour des ouvrages. Le critère de dilatance est à considérer donc comme un critère pessimiste qu’il est prudent de ne pas dépasser car il annonce l’apparition d’une micro-fissuration qui, même si mécaniquement peut ne pas être préjudiciable, peut avoir des conséquences hydrauliques (augmentation de la perméabilité) importantes surtout dans les problèmes de stockage où le caractère confinant de la roche est aussi important que l’effondrement de l’ouvrage.

C’est face à ces incohérences et aux nouveaux besoins exprimés par nos partenaires industriels, que j’ai proposé l’élaboration d’une nouvelle loi de comportement qui, en plus d’intégrer intrinsèquement la notion de dilatance, est en mesure d’interpréter correctement les différents types d’essais de laboratoire y compris cycliques en contraction/extension.

### 1.3 La nouvelle loi

#### 1.3.1 Le cadre des transformations finies

Il s’agit de repositionner le cadre théorique de développement des lois de comportement et d’identifier les hypothèses principales pour qu’il soit thermodynamiquement cohérent. Ce cadre n’est certainement pas le seul mais face aux difficultés théoriques que pose l’étude des transformations finies et l’abondance des publications avec diverses argumentations et contre-argumentations (Green et Naghdi [55], Lee [56], Mandel [57], Casey et Naghdi [58], Naghdi [59], Lubarda [60], Miehe [61], Sidoroff et Dogui [62], Scheidler et Wright ([63], [64]), Dafalias ([65], [66]) et beaucoup d’autres) il peut constituer un socle de base pertinent eu égard aux différentes exigences des lois de comportement.

Soit  $\underline{\underline{F}}$  le gradient de la transformation totale qui fait passer le point matériel de sa position  $\vec{x}_0$  dans la configuration de référence  $\Omega_0$  sous une contrainte  $\underline{\underline{\sigma}}_0$  et à la température  $T_0$  à sa position  $\vec{x}$  dans la configuration actuelle  $\Omega$  sous une contrainte  $\underline{\underline{\sigma}}$  et à la température  $T$ .

Pour décrire le comportement élasto-viscoplastique ou élasto-plastique, la décomposition multiplicative de  $\underline{\underline{F}}$  en une partie élastique  $\underline{\underline{F}}_e$  et une partie inélastique  $\underline{\underline{F}}_p$  est généralement adoptée (Lee [56]) :

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}}_e \underline{\underline{F}}_p \quad (2.1)$$

Cette décomposition utilise la notion de la configuration intermédiaire  $\hat{\Omega}$  qui suppose une décharge virtuelle qui ramène instantanément l'élément de matière autour de la position  $\vec{x}$  à une position  $\vec{x}^\wedge$  sous la contrainte et la température initiales  $\underline{\underline{\sigma}}_0$  et  $T_0$  telle que  $d\vec{x} = \underline{\underline{F}}_e d\vec{x}^\wedge$ . Le tenseur  $\underline{\underline{F}}_p$  est tel que  $d\vec{x}^\wedge = \underline{\underline{F}}_p d\vec{x}_0$ . Les tenseurs  $\underline{\underline{F}}_e$  et  $\underline{\underline{F}}_p$  ne sont pas à interpréter comme les gradients des transformations respectivement  $\vec{x}^\wedge(\vec{x})$  et  $\vec{x}^\wedge(\vec{x}_0)$ , seul le tenseur  $\underline{\underline{F}}$  est un vrai gradient de déformation pour tout  $\vec{x}_0 \in \Omega_0$ .

De la décomposition (2.1), en dérivant par rapport à  $t$ , on déduit le tenseur gradient des vitesses  $\underline{\underline{\nabla}} \vec{v} = \dot{\underline{\underline{F}}} \underline{\underline{F}}^{-1}$  :

$$\underline{\underline{\nabla}} \vec{v} = \dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1} + \underline{\underline{F}}_e \dot{\underline{\underline{F}}}_p \underline{\underline{F}}_p^{-1} \underline{\underline{F}}_e^{-1} \quad (2.2)$$

Dans un changement de référentiel euclidien de la forme  $\vec{x}^* = \underline{\underline{Q}}(t) \vec{x}$  où  $\underline{\underline{Q}}(t)$  est un tenseur orthogonal de rotation ( $\underline{\underline{Q}}^T \underline{\underline{Q}} = \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{Q}}^T = \underline{\underline{1}}$  et  $\det(\underline{\underline{Q}}) = 1$ ) tel que  $\underline{\underline{Q}}(0) = \underline{\underline{1}}$ , le gradient  $\underline{\underline{F}}$  se transforme en  $\underline{\underline{F}}^* = \underline{\underline{F}}_e^* \underline{\underline{F}}_p^* = \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{F}} = \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{F}}_e \underline{\underline{F}}_p$ . Ainsi, les transformations de  $\underline{\underline{F}}_e$  et de  $\underline{\underline{F}}_p$  doivent être cohérentes avec la condition :  $\underline{\underline{F}}_e^* \underline{\underline{F}}_p^* = \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{F}}_e \underline{\underline{F}}_p$ . Si on introduit la rotation locale de la configuration intermédiaire  $\hat{\underline{\underline{Q}}}$  telle que  $d\vec{x}^* = \hat{\underline{\underline{Q}}}(t) d\vec{x}^\wedge$ , la décomposition qui reste cohérente avec cette condition est donc de la forme :

$$\underline{\underline{F}}_e^* = \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{F}}_e \hat{\underline{\underline{Q}}}^T, \quad \underline{\underline{F}}_p^* = \hat{\underline{\underline{Q}}} \underline{\underline{F}}_p \quad (2.3)$$

On déduit :

$$\dot{\underline{\underline{F}}}^* \underline{\underline{F}}^{*-1} = \dot{\underline{\underline{Q}}} \underline{\underline{Q}}^T + \underline{\underline{Q}} \dot{\underline{\underline{F}}} \underline{\underline{F}}^{-1} \underline{\underline{Q}}^T \quad (2.4)$$

$$\dot{\underline{\underline{F}}}_e^* \underline{\underline{F}}_e^{*-1} = \dot{\underline{\underline{Q}}} \underline{\underline{Q}}^T + \underline{\underline{Q}} (\dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1} - \underline{\underline{F}}_e \hat{\underline{\underline{Q}}}^T \dot{\hat{\underline{\underline{Q}}}} \underline{\underline{F}}_e^{-1}) \underline{\underline{Q}}^T \quad (2.5)$$

$$\underline{\underline{F}}_e^* \dot{\underline{\underline{F}}}_p^* \underline{\underline{F}}_p^{*-1} \underline{\underline{F}}_e^{*-1} = \underline{\underline{Q}} (\underline{\underline{F}}_e \dot{\underline{\underline{F}}}_p \underline{\underline{F}}_p^{-1} \underline{\underline{F}}_e^{-1} + \underline{\underline{F}}_e \hat{\underline{\underline{Q}}}^T \dot{\hat{\underline{\underline{Q}}}} \underline{\underline{F}}_e^{-1}) \underline{\underline{Q}}^T \quad (2.6)$$

On voit que la rotation arbitraire de la configuration intermédiaire intervient dans chacun des termes du second membre de l'équation (2.2) et que pour  $\dot{\hat{\underline{\underline{Q}}}} = \underline{\underline{0}}$  la partie symétrique de  $\dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1}$  devient un tenseur objectif au sens  $(\dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1})^S = \underline{\underline{Q}} (\dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1}) \underline{\underline{Q}}^T$ ,  $(\ )^S$  désigne la partie symétrique d'un tenseur (dans la suite,  $(\ )^A$  désignera sa partie antisymétrique). Pour pallier l'indétermination de la rotation de la configuration intermédiaire et avoir des grandeurs objectives, essentielles pour l'écriture des lois de comportement, le choix le plus naturel est celui pour lequel  $\hat{\underline{\underline{Q}}} = \underline{\underline{1}}$ . Ce choix correspond à la configuration isocline de Mandel (1973) qui a surtout pour elle la simplicité du formalisme, car il est possible de choisir d'autres configurations (Mandel [57], Lubarda [60]). Avec ce choix, le tenseur  $\underline{\underline{F}}_p$  devient un invariant ( $\underline{\underline{F}}_p^* = \underline{\underline{F}}_p$ ) et la rotation de la configuration actuelle est reportée uniquement sur  $\underline{\underline{F}}_e$ .

Pour un milieu matériellement simple, le cadre général pour définir les lois de comportement est celui d'une représentation fonctionnelle où le tenseur des contraintes de Cauchy  $\underline{\underline{\sigma}}$  serait fonction de l'historique des variables observables  $T$  et  $\underline{\underline{F}}$ . Toutefois, la complexité de ce

cadre conduit souvent à lui substituer la représentation par les variables internes. Dans cette représentation, l'état thermodynamique actuel est généralement défini par la donnée des grandeurs observables (température, déformation) et d'un nombre fini de grandeurs cachées appelées variables d'écouissage. En suivant Mandel [57], le tenseur des déformations qui intervient dans l'état thermodynamique est celui de Green dans le passage de la configuration intermédiaire à la configuration actuelle :

$$\underline{\underline{\Delta}}_e = \frac{1}{2} \left( \underline{\underline{F}}_e^T \underline{\underline{F}}_e - \underline{\underline{1}} \right) \quad (2.7)$$

Il s'agit du tenseur des déformations élastiques, sa vitesse  $\dot{\underline{\underline{\Delta}}}_e = \underline{\underline{F}}_e^T (\dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1})^S \underline{\underline{F}}_e$ , invariante avec l'hypothèse de la configuration isocline, n'est pas forcément la transmuée par la transformation  $\underline{\underline{F}}_e^{-1}$  d'une vitesse eulérienne représentant la vraie vitesse des déformations élastiques et cette vitesse ne coïncide avec le terme  $(\dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1})^S$  que sous des hypothèses bien précises. C'est ce qui résultera de l'analyse thermodynamique ci-après. On suppose que les variables d'écouissage sont soit invariantes soit objectives selon leur signification physique. Elles sont désignées par une seule notation tensorielle symbolique  $\hat{\underline{\underline{\xi}}}$  quel que soit leur ordre tensoriel. La configuration intermédiaire est considérée isocline.

Compte tenu du choix des variables d'état, et en l'absence de phénomènes dissipatifs liés au comportement inélastique ( $\dot{\underline{\underline{F}}}_p = \underline{\underline{0}}, \dot{\underline{\underline{\xi}}} = \underline{\underline{0}}$ ), la dissipation volumique intrinsèque  $\varpi_i$  est nulle :

$$\varpi_i = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{v}} - \rho \partial_{\underline{\underline{\Delta}}_e} f : \dot{\underline{\underline{\Delta}}}_e - \rho (s + \partial_T f) \dot{T} = 0 \quad (2.8)$$

avec  $\rho$  la masse volumique (par rapport à la configuration actuelle),  $f$  l'énergie libre massique et  $s$  l'entropie massique. En remplaçant dans (2.8)  $\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{v}}$  par  $:\underline{\underline{F}}_e^{-1} \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{F}}_e^{-T} : \dot{\underline{\underline{\Delta}}}_e$  car  $\dot{\underline{\underline{F}}}_p = \underline{\underline{0}}$ , il vient :

$$\left( \hat{\underline{\underline{\Pi}}} / \hat{\rho} - \partial_{\underline{\underline{\Delta}}_e} f \right) : \dot{\underline{\underline{\Delta}}}_e - (s + \partial_T f) \dot{T} = 0 \quad (2.9)$$

avec  $\hat{\underline{\underline{\Pi}}}$  et  $\hat{\rho}$  sont respectivement le tenseur symétrique de Piola-Kirchhoff et la masse volumique par rapport à la configuration intermédiaire,  $\hat{\underline{\underline{\Pi}}}$  vérifie :

$$\hat{\underline{\underline{\Pi}}} = J_e \underline{\underline{F}}_e^{-1} \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{F}}_e^{-T}, \quad J_e = \det(\underline{\underline{F}}_e) = \hat{\rho} / \rho \quad (2.10)$$

L'équation (2.9) doit être satisfaite pour toute variation de l'état, d'où :

$$\hat{\underline{\underline{\Pi}}} / \hat{\rho} = \partial_{\underline{\underline{\Delta}}_e} f, \quad s = -\partial_T f \quad (2.11)$$

Notons qu'il est aussi possible de définir l'état thermodynamique par  $(\hat{\underline{\underline{\Pi}}} / \hat{\rho}, T)$  associé au potentiel thermodynamique de Gibbs  $g = f - \underline{\underline{\Delta}}_e : \hat{\underline{\underline{\Pi}}} / \hat{\rho}$  et aboutir à :

$$\underline{\underline{\Delta}}_e = -\partial_{(\hat{\underline{\underline{\Pi}}} / \hat{\rho})} g, \quad s = -\partial_T g \quad (2.12)$$

Lorsqu'on ajoute aux variables  $(\underline{\underline{\Delta}}_e, T)$  ou  $(\hat{\underline{\underline{\Pi}}} / \hat{\rho}, T)$  les variables d'écouissage  $\hat{\underline{\underline{\xi}}}$  afin de représenter les mécanismes dissipatifs, la dissipation intrinsèque  $\varpi_i$  devient :

$$\varpi_i = -\rho \partial_{\hat{\underline{\underline{\xi}}}} f : \hat{\underline{\underline{\xi}}}^T + \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{F}}_e \dot{\underline{\underline{F}}}_p \underline{\underline{F}}_p^{-1} \underline{\underline{F}}_e^{-1} \geq 0 \quad (2.13)$$

Dans cette égalité, il y a le terme  $\underline{\underline{F}}_e \dot{\underline{\underline{F}}}_p \underline{\underline{F}}_p^{-1} \underline{\underline{F}}_e^{-1}$  qui est objectif, mais aussi  $\hat{\underline{\underline{\xi}}}$  qui, pour une variable d'écouissage  $\hat{\underline{\underline{\xi}}}$  qui n'est pas invariante par changement de référentiel mais



seulement objective, n'est pas objectif. Afin d'avoir une vitesse objective, il est alors essentiel de transformer cette variable en une autre variable dont la vitesse est objective. Plusieurs transformations peuvent être utilisées mais nous pouvons garder la même transformation que pour  $\hat{\underline{\underline{\Pi}}}$  en définissant  $\hat{\underline{\underline{\xi}}}$  comme la transmuée par la transformation  $\underline{\underline{F}}_e^T$  de  $\underline{\underline{\xi}}$  :

$$\hat{\underline{\underline{\xi}}} = J_e \underline{\underline{F}}_e^{-1} \underline{\underline{\xi}} \underline{\underline{F}}_e^{-T} \quad (2.14)$$

Il vient :

$$\partial_{\hat{\underline{\underline{\xi}}}} f : \dot{\hat{\underline{\underline{\xi}}}}^T = \partial_{\underline{\underline{\xi}}} f : \overset{\nabla}{\underline{\underline{\xi}}}^T \quad (2.15)$$

où  $\overset{\nabla}{\underline{\underline{\xi}}} = \dot{\underline{\underline{\xi}}} - \underline{\underline{F}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1} \dot{\underline{\underline{\xi}}} - \underline{\underline{\xi}} (\dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1})^T + \text{tr}(\dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1}) \underline{\underline{\xi}}$  est la dérivée objective de Truesdell de  $\underline{\underline{\xi}}$  dans la transformation  $\underline{\underline{F}}_e$ , et  $\text{tr}()$  est la trace.

Revenons à l'équation (2.11)<sub>1</sub> et dérivons  $\hat{\underline{\underline{\Pi}}}$  par rapport à  $t$  ( $\hat{\underline{\underline{\Pi}}}$  est invariant car  $\underline{\underline{\sigma}}$  est objectif), il vient :

$$\dot{\hat{\underline{\underline{\Pi}}}} = \hat{\rho} \partial_{\underline{\underline{\Delta}}_e}^2 f : \dot{\underline{\underline{\Delta}}}_e + \hat{\rho} (\partial_{T\underline{\underline{\Delta}}_e}^2 f) \dot{T} + (\partial_{\hat{\underline{\underline{\xi}}}} (\hat{\rho} \partial_{\underline{\underline{\Delta}}_e} f)) : \dot{\hat{\underline{\underline{\xi}}}}^T \quad (2.16)$$

Notons que, lorsque la déformation inélastique s'accompagne de variation de volume, la masse volumique  $\hat{\rho}$  peut dépendre des variables d'érouissage. D'un autre côté, en introduisant le tenseur de Kirchhoff  $\underline{\underline{\tau}} = J_e \underline{\underline{\sigma}}$  et en dérivant par rapport à  $t$  la relation (2.10)<sub>1</sub>, il vient :  $\dot{\hat{\underline{\underline{\Pi}}}} = \underline{\underline{F}}_e^{-1} (\dot{\underline{\underline{\tau}}} - \dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1} \underline{\underline{\tau}} - \underline{\underline{\tau}} \underline{\underline{F}}_e^{-T} \dot{\underline{\underline{F}}}_e^T) \underline{\underline{F}}_e^{-T}$ . En décomposant  $\dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1}$  en partie symétrique et en partie antisymétrique, on obtient :

$$\dot{\underline{\underline{\tau}}} - (\dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1})^A \underline{\underline{\tau}} + \underline{\underline{\tau}} (\dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1})^A = \underline{\underline{H}} : (\dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1})^S + \partial_{T\underline{\underline{\tau}}} \dot{T} + \partial_{\hat{\underline{\underline{\xi}}}} \underline{\underline{\tau}} : \overset{\nabla}{\underline{\underline{\xi}}} \quad (2.17)$$

où on a écrit, en considérant la transformation (2.14) et  $\underline{\underline{\tau}}$  comme fonction de  $(\underline{\underline{F}}_e, T, \hat{\underline{\underline{\xi}}})$ , que :

$$\underline{\underline{F}}_e (\hat{\rho} (\partial_{T\underline{\underline{\Delta}}_e}^2 f)) \underline{\underline{F}}_e^T = \partial_{T\underline{\underline{\tau}}}, \quad \underline{\underline{F}}_e (\partial_{\hat{\underline{\underline{\xi}}}} (\hat{\rho} \partial_{\underline{\underline{\Delta}}_e} f)) : \dot{\hat{\underline{\underline{\xi}}}}^T \underline{\underline{F}}_e^T = \partial_{\hat{\underline{\underline{\xi}}}} \underline{\underline{\tau}} : \overset{\nabla}{\underline{\underline{\xi}}} = \partial_{\hat{\underline{\underline{\xi}}}} \underline{\underline{\tau}} : \overset{\nabla}{\underline{\underline{\xi}}} \quad (2.18)$$

Le tenseur  $\underline{\underline{H}}$  d'ordre 4 est celui des modules d'élasticité dans la configuration actuelle tel que pour tout tenseur symétrique  $\underline{\underline{a}}$  d'ordre 2, on a :

$$\underline{\underline{H}} : \underline{\underline{a}} = \underline{\underline{F}}_e \left( (\hat{\rho} \partial_{\underline{\underline{\Delta}}_e}^2 f) : (\underline{\underline{F}}_e^T \underline{\underline{a}} \underline{\underline{F}}_e) \right) \underline{\underline{F}}_e^T + \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{\tau}} + \underline{\underline{\tau}} \underline{\underline{a}} \quad (2.19)$$

Par ailleurs, le gradient des vitesses  $\underline{\underline{\nabla}} \vec{v}$  peut être décomposé en parties symétrique et antisymétrique :

$$\underline{\underline{\nabla}} \vec{v} = \underline{\underline{\varepsilon}}(\vec{v}) + \underline{\underline{W}}, \quad \underline{\underline{\varepsilon}}(\vec{v}) = (\underline{\underline{\nabla}} \vec{v})^S, \quad \underline{\underline{W}} = (\underline{\underline{\nabla}} \vec{v})^A \quad (2.20)$$

avec

$$\underline{\underline{\varepsilon}}(\vec{v}) = (\dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1})^S + (\underline{\underline{F}}_e \dot{\underline{\underline{F}}}_p \underline{\underline{F}}_p^{-1} \underline{\underline{F}}_e^{-1})^S, \quad \underline{\underline{W}} = \underline{\underline{w}}_p + (\dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1})^A, \quad \underline{\underline{w}}_p = (\underline{\underline{F}}_e \dot{\underline{\underline{F}}}_p \underline{\underline{F}}_p^{-1} \underline{\underline{F}}_e^{-1})^A \quad (2.21)$$

En injectant le tenseur taux de rotation  $\underline{\underline{W}}$  dans (2.17), on obtient :

$$\overset{\circ}{\underline{\underline{\tau}}} = \underline{\underline{H}} : (\dot{\underline{\underline{F}}}_e \underline{\underline{F}}_e^{-1})^S + \partial_{T\underline{\underline{\tau}}} \dot{T} + \partial_{\hat{\underline{\underline{\xi}}}} \underline{\underline{\tau}} : \overset{\nabla}{\underline{\underline{\xi}}} + \underline{\underline{\tau}} \underline{\underline{w}}_p - \underline{\underline{w}}_p \underline{\underline{\tau}} \quad (2.22)$$

où  $\overset{\circ}{\underline{\underline{\tau}}} = \dot{\underline{\underline{\tau}}} + \underline{\underline{\tau}} \underline{\underline{W}} - \underline{\underline{W}} \underline{\underline{\tau}}$  est la dérivée objective de Jaumann dans la transformation  $\underline{\underline{F}}$ .

De la relation (2.22) et à l'instar des modèles hypo-élastiques (Truesdell [67]), si nous identifions la vitesse des déformations élastiques,  $\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_e$ , et celle des déformations thermiques,  $\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_{th}$ , comme

$$\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_e = \underline{H}^{-1} : \underline{\dot{\underline{\tau}}}, \quad \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_{th} = \underline{A}\dot{T} \quad (2.23)$$

où  $\underline{A} = -\underline{H}^{-1} : \partial_{T\underline{\tau}}$  est le tenseur des dilatations thermiques, et que nous admettons, comme pour les petites déformations, que la partie restante du tenseur vitesse des déformations totales  $\underline{\varepsilon}(\underline{\vec{v}})$  est de nature inélastique :

$$\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_{in} = \underline{\varepsilon}(\underline{\vec{v}}) - \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_e - \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_{th} \quad (2.24)$$

on obtient :

$$\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_e = (\underline{\dot{F}}_e \underline{F}_e^{-1})^S - \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_{th} + \underline{H}^{-1} : \partial_{\underline{\xi}\underline{\tau}}^{\nabla} : \underline{\xi} + \underline{H}^{-1} : (\underline{\tau}\underline{w}_p - \underline{w}_p\underline{\tau}) \quad (2.25)$$

$$\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_{in} = (\underline{F}_e \underline{\dot{F}}_p \underline{F}_p^{-1} \underline{F}_e^{-1})^S - \underline{H}^{-1} : \partial_{\underline{\xi}\underline{\tau}}^{\nabla} : \underline{\xi} - \underline{H}^{-1} : (\underline{\tau}\underline{w}_p - \underline{w}_p\underline{\tau}) \quad (2.26)$$

Supposons que  $f$  peut s'écrire sous la forme  $f(\underline{\Delta}_e, T, \hat{\underline{\xi}}) = (f_1(\underline{\Delta}_e, T) + f_2(T, \hat{\underline{\xi}}))/\hat{\rho}$ , on déduit :  $\hat{\rho}\partial_{\underline{\Delta}_e} f = \partial_{\underline{\Delta}_e} f_1(\underline{\Delta}_e, T)$ , d'où  $\partial_{\hat{\underline{\xi}}}(\hat{\rho}\partial_{\underline{\Delta}_e} f) = \underline{0}$  et par conséquent  $\partial_{\underline{\xi}\underline{\tau}} = \underline{0}$ , autrement dit,

nous pouvons interpréter le terme en  $\underline{\xi}$  dans (2.26) comme étant la partie des déformations inélastiques due à l'endommagement des propriétés élastiques, et en désignant par  $\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_p$  le tenseur vitesse des déformations plastiques, il vient :

$$\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_{in} = \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_d + \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_p, \quad \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_d = -\underline{H}^{-1} : \partial_{\underline{\xi}\underline{\tau}}^{\nabla} : \underline{\xi}, \quad \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_p = (\underline{F}_e \underline{\dot{F}}_p \underline{F}_p^{-1} \underline{F}_e^{-1})^S - \underline{H}^{-1} : (\underline{\tau}\underline{w}_p - \underline{w}_p\underline{\tau}) \quad (2.27)$$

Ainsi, le terme  $(\underline{\dot{F}}_e \underline{F}_e^{-1})^S$  est à interpréter comme la vitesse des déformations élastiques uniquement dans les conditions suivantes : la transformation est isotherme, pas d'endommagement des propriétés élastiques ( $\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_d = \underline{0}$ ) et la rotation plastique  $\underline{w}_p = (\underline{F}_e \underline{\dot{F}}_p \underline{F}_p^{-1} \underline{F}_e^{-1})^A$  est nulle. La condition  $\underline{w}_p = \underline{0}$  n'est pas une condition constitutive mais simplement une condition cinématique. Elle reste toujours un des principaux sujets de recherche dans la théorie des transformations finies surtout pour les matériaux présentant une anisotropie initiale et/ou induite.

On suppose dans la suite que  $\underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_d = \underline{0}$  et  $\underline{w}_p = \underline{0}$ . Lorsque les déformations thermo-élastiques restent infinitésimales, la décomposition polaire de  $\underline{F}_e$  en le produit  $\underline{F}_e = \underline{R}_e \underline{U}_e$  d'un tenseur de rotation  $\underline{R}_e$  et d'un tenseur de déformation  $\underline{U}_e$  permet d'écrire que :  $\underline{U}_e \approx \underline{1}$ ,  $\underline{F}_e \approx \underline{R}_e$ ,  $\underline{F}_e^{-1} \approx \underline{R}_e^T$ ,  $\underline{\dot{F}}_e \underline{F}_e^{-1} \approx \underline{\dot{R}}_e \underline{R}_e^T$  et  $\det(J_e) \approx 1$ , et on obtient :

$$\underline{\hat{\Pi}} = \underline{R}_e^T \underline{\sigma} \underline{R}_e, \quad \underline{\hat{\xi}} = \underline{R}_e^T \underline{\xi} \underline{R}_e, \quad \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_p = \underline{R}_e (\underline{\dot{F}}_p \underline{F}_p^{-1})^S \underline{R}_e^T \quad (2.28)$$

$$\underline{\overset{\circ}{\underline{\tau}}} = \underline{\overset{\circ}{\underline{\sigma}}} = \underline{\overset{\circ}{\underline{\sigma}}} + \underline{\underline{\sigma}}\underline{W} - \underline{W}\underline{\underline{\sigma}}, \quad \underline{\overset{\nabla}{\underline{\xi}}} = \underline{\overset{\circ}{\underline{\xi}}} = \underline{\overset{\circ}{\underline{\xi}}} + \underline{\underline{\xi}}\underline{W} - \underline{W}\underline{\underline{\xi}}, \quad \underline{W} = \underline{\dot{R}}_e \underline{R}_e^T \quad (2.29)$$

Si en plus les rotations élastiques restent infinitésimales ( $\underline{R}_e \approx \underline{1}$ ), autrement dit, toute la transformation élastique  $\underline{F}_e$  devient infinitésimale, on aboutit à :

$$\underline{\hat{\Pi}} = \underline{\sigma}, \quad \underline{\hat{\xi}} = \underline{\xi}, \quad (2.30)$$

$$\underline{\overset{\circ}{\underline{\tau}}} = \underline{H} : (\underline{\varepsilon}(\underline{\vec{v}}) - \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_{th} - \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_p), \quad \underline{\overset{\circ}{\underline{\varepsilon}}} = (\underline{\nabla}\underline{\vec{v}})^S, \quad \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_p = (\underline{\dot{F}}_p \underline{F}_p^{-1})^S, \quad \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}}_{th} = \underline{A}\dot{T} \quad (2.31)$$



avec des lois d'évolution pour  $\underline{\underline{\varepsilon}}_p$  et  $\underline{\underline{\xi}}$  qui peuvent être définies en fonction de l'état thermodynamique  $(\underline{\underline{\sigma}}, T, \underline{\underline{\xi}})$  :

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_p = \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_p(\underline{\underline{\sigma}}, T, \underline{\underline{\xi}}), \quad \dot{\underline{\underline{\xi}}} = \dot{\underline{\underline{\xi}}}(\underline{\underline{\sigma}}, T, \underline{\underline{\xi}}) \quad (2.32)$$

C'est cette formulation qui est adoptée dans bon nombre de codes de calcul et il convient de ne pas perdre de vue ni les principales hypothèses qui étaient essentielles à sa formulation ni le fait que ces lois doivent en plus vérifier le principe d'objectivité. En ce qui concerne ce dernier point, une loi de comportement de la forme  $g(\underline{\underline{\sigma}}, T)$ , où  $g$  est l'enthalpie libre, ne vérifie le principe d'objectivité que lorsque pour tout  $(\underline{\underline{\sigma}}, T)$  et pour toute rotation  $\underline{\underline{Q}}$  on a :  $g(\underline{\underline{Q}}\underline{\underline{\sigma}}\underline{\underline{Q}}^T, T) = g(\underline{\underline{\sigma}}, T)$ . La fonction  $g$  est alors isotrope et ne dépend de  $\underline{\underline{\sigma}}$  que via ses invariants. Lorsque le matériau présente une anisotropie initiale ou induite, la bonne loi doit comporter une variable tensorielle reconnue dans tous les référentiels comme caractérisant les directions de l'anisotropie. Par conséquent, en cas d'anisotropie on doit prévoir que parmi les variables internes  $\underline{\underline{\xi}}$  certaines gèrent l'orientation de l'anisotropie et que les tenseurs d'élasticité  $\underline{\underline{H}}$  et de dilatation thermique  $\underline{\underline{A}}$  dépendent de  $\underline{\underline{\xi}}$ . Il en est d'ailleurs de même du tenseur de conductivité thermique et de perméabilité.

### 1.3.2 Les lois d'évolution

Rappelons d'emblée la difficulté principale qu'on souhaite pallier en développant de nouvelles lois d'évolution pour les variables viscoplastiques. Il s'agit de pouvoir enrichir les modèles viscoplastiques des roches salines de type Lemaitre par au moins la prise en compte du phénomène de dilatance viscoplastique et de l'effet du régime des contraintes (extension/contraction). On se limitera au cas isotrope, sans plasticité instantanée et à des variables d'érouissage scalaires. L'état thermodynamique sera défini par  $(\underline{\underline{\sigma}}, T, \underline{\underline{\xi}})$ .

Avant de présenter les nouvelles lois, commençons tout d'abord par présenter quelques outils mathématiques qui nous seront utiles dans la suite. Introduisons pour cela les variables scalaires suivantes :

$$p = -\text{tr}(\underline{\underline{\sigma}})/3, \quad q = \sqrt{3/2}\|\underline{\underline{\sigma}}'\|, \quad \zeta_p = -\int_0^t \text{tr}(\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_p) d\tau, \quad \gamma_p = \int_0^t \sqrt{2/3}\|\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_p'\| d\tau \quad (2.33)$$

La signification physique de ces variables est immédiate :  $p$  : contrainte moyenne,  $q$  : déviateur,  $\zeta_p$  : déformation volumique viscoplastique (positive en contraction),  $\gamma_p$  : distorsion viscoplastique, sachant que pour un tenseur  $\underline{\underline{a}}$ ,  $\underline{\underline{a}}' = \underline{\underline{a}} - \text{tr}(\underline{\underline{a}})\underline{\underline{1}}/3$  est sa partie déviatorique. En plus des invariants  $p$  et  $q$ , introduisons aussi l'angle de Lode  $\theta$  de sorte que pour toute fonction  $P$  isotrope de  $\underline{\underline{\sigma}}$  on a :  $P(\underline{\underline{\sigma}}) = P(p, q, \theta)$ , son gradient par rapport à  $\underline{\underline{\sigma}}$  peut s'écrire alors sous la forme :

$$\partial_{\underline{\underline{\sigma}}} P = -(\partial_p P / \sqrt{3})\underline{\underline{I}} + (\sqrt{3/2} \partial_q P)\underline{\underline{J}} + (\sqrt{3/2} \partial_\theta P / q)\underline{\underline{K}} \quad (2.34)$$

où on a utilisé le fait que :

$$\partial_{\underline{\underline{\sigma}}} p = -\underline{\underline{I}}/\sqrt{3}, \quad \partial_{\underline{\underline{\sigma}}} q = \sqrt{3/2}\underline{\underline{J}}, \quad q \partial_{\underline{\underline{\sigma}}} \theta = \sqrt{3/2}\underline{\underline{K}} \quad (2.35)$$

avec

$$\underline{\underline{I}} = \underline{\underline{1}}/\sqrt{3}, \quad \underline{\underline{J}} = \underline{\underline{\sigma}}'/\|\underline{\underline{\sigma}}'\|, \quad \underline{\underline{K}} = \left( \sqrt{2}\underline{\underline{I}} + \ell\underline{\underline{J}} - \sqrt{6}\underline{\underline{J}}^2 \right) / \sqrt{1 - \ell^2} \quad (2.36)$$

$$\ell = \sqrt{6} \text{tr}(\underline{\underline{J}}^3) = 3\sqrt{6} \det(\underline{\underline{J}}) = \cos(3\theta) \quad (2.37)$$

Le triplet  $(\underline{I}, \underline{J}, \underline{K})$  forme une base orthonormée du sous-espace vectoriel  $\mathfrak{S}$  des tenseurs symétriques d'ordre 2 ayant la même base propre que  $\underline{\sigma}$ . Dans la suite, on utilisera indifféremment et suivant le contexte soit l'invariant  $\theta \in [0, \pi/3]$  soit l'invariant  $\ell \in [-1, 1]$  sachant que leurs valeurs extrêmes correspondent à des régimes triaxiaux de contrainte respectivement d'extension ( $\theta = 0$  et  $\ell = 1$ ) et de contraction ( $\theta = \pi/3$  et  $\ell = -1$ ). Une autre base orthonormée intéressante pour  $\mathfrak{S}$  peut être construite à partir des vecteurs propres  $\vec{n}_i$  de  $\underline{\sigma}$  et en particulier à partir de la famille libre des trois tenseurs  $(\underline{1}, \underline{n}_1, \underline{n}_2)$  avec  $\underline{n}_i = \vec{n}_i \otimes \vec{n}_i$  : il s'agit de la base  $(\underline{I}, \underline{J}, \underline{K})$  telle que  $\underline{J} = (3\underline{n}_1 - \underline{1})/\sqrt{6}$  et  $\underline{K} = (\underline{n}_2 - \underline{n}_3)/\sqrt{2}$ , sa relation avec la base précédente est telle que :  $\underline{J} = \cos(\theta)\underline{\hat{J}} + \sin(\theta)\underline{\hat{K}}$  et  $\underline{K} = -\sin(\theta)\underline{\hat{J}} + \cos(\theta)\underline{\hat{K}}$ .

En tant que fonction isotrope de  $\underline{\sigma}$ , le tenseur  $\dot{\underline{\varepsilon}}_p$  admet la même base propre que  $\underline{\sigma}$  et on peut l'exprimer sous la forme :  $\dot{\underline{\varepsilon}}_p = \sqrt{3/2}\dot{\gamma}_p\underline{N} - \dot{\zeta}_p\underline{I}/\sqrt{3}$  avec  $\underline{N} = \cos(\theta_\varepsilon)\underline{\hat{J}} + \sin(\theta_\varepsilon)\underline{\hat{K}}$  où  $\theta_\varepsilon$  est l'angle de Lode de  $\dot{\underline{\varepsilon}}_p$ . En écrivant  $\underline{\sigma}$  sous la forme  $\underline{\sigma} = \sqrt{2/3}q\underline{J} - \sqrt{3}p\underline{I}$ , la puissance par unité de volume  $\underline{\sigma} : \dot{\underline{\varepsilon}}_p$  s'écrit alors

$$\underline{\sigma} : \dot{\underline{\varepsilon}}_p = p\dot{\zeta}_p + q\dot{\gamma}_p \cos(\theta - \theta_\varepsilon) \quad (2.38)$$

qui n'est égale à  $p\dot{\zeta}_p + q\dot{\gamma}_p$  que pour  $\theta = \theta_\varepsilon$ . D'après (2.13), cette puissance ne représente qu'une partie de la puissance intrinsèque  $\varpi_i$ . Par conséquent, sa positivité n'est pas exigée, ce qui compte c'est la positivité de  $\varpi_i$  qui peut être assurée par un choix judicieux de  $f$ .

Signalons enfin que lorsque  $\dot{\underline{\varepsilon}}_p(\underline{\sigma})$  dérive d'un potentiel  $P$  isotrope de  $\underline{\sigma}$  ( $\dot{\underline{\varepsilon}}_p = \dot{\lambda}\partial_{\underline{\sigma}}P$ ), il est forcément compatible avec la théorie de représentation des fonctions isotropes qui exige une écriture de la forme :  $\dot{\underline{\varepsilon}}_p(\underline{\sigma}) = \alpha_1\underline{1} + \alpha_2\underline{\sigma} + \alpha_3\underline{\sigma}^2$  où les  $\alpha_i$  sont des fonctions quelconques des invariants de  $\underline{\sigma}$ . À l'inverse, autrement dit la compatibilité des fonctions  $\alpha_i$  avec  $\dot{\underline{\varepsilon}}_p = \dot{\lambda}\partial_{\underline{\sigma}}P$  n'est assurée en revanche que sous la condition nécessaire sur les  $\alpha_i$  suivante (Betten [68]) :

$$\left(3\partial_{a_3}\alpha_2 - 2\partial_{a_2}\alpha_3\right)\alpha_1 + \left(\partial_{a_1}\alpha_3 - 3\partial_{a_3}\alpha_1\right)\alpha_2 + \left(2\partial_{a_2}\alpha_1 - \partial_{a_1}\alpha_2\right)\alpha_3 = 0 \quad (2.39)$$

où les  $a_i = \text{tr}(\underline{\sigma}^i)$ ,  $i = 1, 2, 3$  sont les invariants de  $\underline{\sigma}$ .

### 1.3.2.a Le tenseur des déformations viscoplastiques

L'approche classique de la viscoplasticité (Lemaitre et Chaboche [69], Bérèst [70], Besson et al [71]...) consiste en l'introduction d'un seul potentiel viscoplastique  $P$  et d'une seule fonction multiplicative  $\dot{\lambda} \geq 0$  tel que :  $\dot{\underline{\varepsilon}}_p = \dot{\lambda}\partial_{\underline{\sigma}}P$ , les deux grandeurs  $P$  et  $\dot{\lambda}$  sont des fonctions de l'état thermodynamique  $(\underline{\sigma}, T, \xi)$ . Cette approche est très restrictive puisqu'on ne peut pas distinguer clairement la dépendance du mécanisme de distorsion par rapport aux mécanismes de contractance et de dilatance. La solution des potentiels multiples (Mandel [72], Loret [73]...) offre, quant à elle, plus de flexibilité surtout lorsque les fonctions multiplicatives  $\dot{\lambda}$  sont aussi indépendantes. Il va de soi qu'avec cette approche le nombre de paramètres à identifier sera plus grand, mais comme sera discuté plus tard (voir § 1.4) ceci ne doit pas nous préoccuper outre mesure ; le problème le plus important étant celui de l'interdépendance des mécanismes. Dans le cadre de ce travail, cette interdépendance a été constatée empiriquement suite à des analyses sur des essais de laboratoire.

En considérant les mécanismes associés à la distorsion, à la contractance et à la dilatance, la nouvelle loi d'évolution de  $\underline{\varepsilon}_p$  s'écrit :

$$\dot{\underline{\varepsilon}}_p = \dot{\lambda}_\gamma\partial_{\underline{\sigma}}P_\gamma + \dot{\lambda}_c\partial_{\underline{\sigma}}Q_c + \dot{\lambda}_d\partial_{\underline{\sigma}}Q_d \quad (2.40)$$

avec

$$\dot{\lambda}_\gamma = \dot{\lambda}_\gamma(\underline{\sigma}, T, \xi) \geq 0, \quad P_\gamma = P_\gamma(\underline{\sigma}, T, \xi) = P_\gamma(\underline{\sigma}', T, \xi) = P_\gamma(q, \theta, T, \xi) \quad (2.41)$$

$$\dot{\lambda}_c = \dot{\lambda}_c(\underline{\sigma}, T, \xi) \geq 0, \quad Q_c = Q_c(\underline{\sigma}, T, \xi) = Q_c(p, T, \xi) \quad (2.42)$$

$$\dot{\lambda}_d = \dot{\lambda}_d(\underline{\sigma}, T, \xi) \geq 0, \quad Q_d = Q_d(\underline{\sigma}, T, \xi) = Q_d(p, T, \xi) \quad (2.43)$$

En utilisant (2.35), il vient :

$$\dot{\underline{\varepsilon}}_p = \dot{\lambda}_\gamma \partial_{\underline{\sigma}} P_\gamma - (\dot{\lambda}_c \partial_p Q_c + \dot{\lambda}_d \partial_p Q_d) \underline{I} / \sqrt{3} \quad (2.44)$$

L'avantage de l'équation (2.44) réside dans sa flexibilité et dans la grande liberté quant aux choix des potentiels et des multiplicateurs. Toutefois, l'identification explicite de ces grandeurs reste aujourd'hui très difficile surtout par les moyens classiques de laboratoire ; des hypothèses sur l'interdépendance des mécanismes sont donc nécessaires. On suppose que :

$$\dot{\lambda}_\gamma = \sqrt{3/2} \dot{\gamma}_p / \|\partial_{\underline{\sigma}} P_\gamma\|, \quad \dot{\lambda}_c = \langle \dot{\zeta}_p \rangle, \quad Q_c = p, \quad \dot{\lambda}_d = \langle -\dot{\zeta}_p \rangle, \quad Q_d = -p \quad (2.45)$$

et que les grandeurs  $\dot{\gamma}_p$  et  $\dot{\zeta}_p$  sont des fonctions connues de l'état thermodynamique :

$$\dot{\gamma}_p = \dot{\gamma}_p(\underline{\sigma}, \xi), \quad \dot{\zeta}_p = \dot{\zeta}_p(\underline{\sigma}, \xi) \quad (2.46)$$

Ce qui permet de ré-écrire l'équation (2.44) sous la forme :

$$\dot{\underline{\varepsilon}}_p = \sqrt{3/2} \dot{\gamma}_p \underline{N} - \dot{\zeta}_p \underline{I} / \sqrt{3} \quad (2.47)$$

avec

$$\underline{N} = \partial_{\underline{\sigma}} P_\gamma / \|\partial_{\underline{\sigma}} P_\gamma\| \quad (2.48)$$

Le potentiel  $P_\gamma$  dont dépend le tenseur déviatorique unitaire  $\underline{N}$  peut être déduit des formes générales proposées dans la littérature (Lade [74], Zienkiewicz et Pande [75], Eekelen [76], Loret [77], Bardet [78], Bigoni et Piccolroaz [79]...) des surfaces de charge ou des potentiels plastiques isotropes pour la mécanique des sols et des roches. En ne gardant que l'influence de  $q$  et de  $\theta$ ,  $P_\gamma$  peut prendre alors la forme suivante :  $P_\gamma(q, \theta) = q/\varrho(\theta)$ . Il vient :

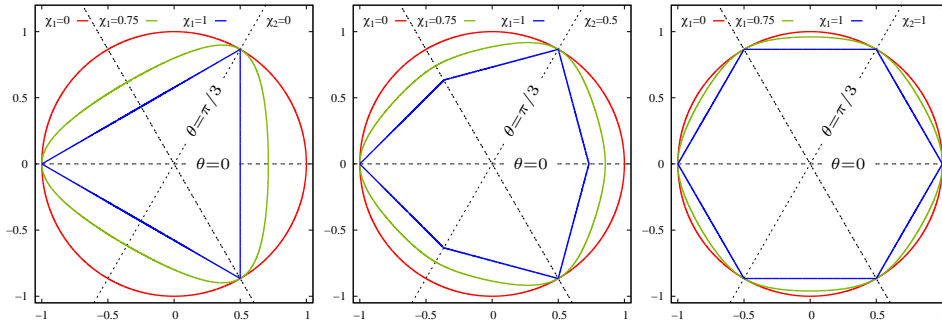
$$\underline{N} = \left( \underline{J} - (\varrho'/\varrho) \underline{K} \right) / \sqrt{1 + (\varrho'/\varrho)^2} \quad (2.49)$$

sachant que pour un scalaire  $a(x)$ ,  $a'$  est sa dérivée par rapport à son argument  $x$ . Pour la fonction déviatorique  $\varrho(\theta)$ , nous pouvons utiliser celle à deux paramètres donnée par Bigoni et Piccolroaz [79] :

$$\varrho(\theta) = I(-1)/I(\ell), \quad I(\ell) = \cos \left( \chi_2 \pi / 6 - \arccos(\chi_1 \ell) / 3 \right) \quad (2.50)$$

que nous avons cherché à normaliser par rapport à la contraction triaxiale de sorte que  $\varrho(\pi/3) = 1$  et  $\varrho(0) = I(-1)/I(1)$ . Pour  $\chi_2 \in [0, 2]$ ,  $\varrho(\theta)$  est toujours convexe indépendamment du paramètre  $\chi_1$ . La figure 2.1 illustre la forme de la section déviatorique pour quelques valeurs de  $\chi_1$  et  $\chi_2$ .

Notons enfin que, en utilisant la relation (2.47), nous pouvons aboutir à une puissance par unité de volume  $\underline{\sigma} : \dot{\underline{\varepsilon}}_p$  de la forme  $\underline{\sigma} : \dot{\underline{\varepsilon}}_p = p \dot{\zeta}_p + q \dot{\gamma}_p \underline{J} : \underline{N}$ , ce qui permet de déduire, connaissant (2.38) et (2.49), que  $\theta_\varepsilon = \theta_\varepsilon(\theta) = \theta + \arccos \left( 1 / \sqrt{1 + (\varrho'/\varrho)^2} \right)$ . Comme  $\varrho(\theta)$  doit vérifier des conditions de symétrie, sa dérivée  $\varrho'$  doit s'annuler pour  $\theta = 0$  (extension triaxiale) et  $\theta = \pi/3$  (contraction triaxiale), ce qui correspond pour ces deux cas à  $\theta_\varepsilon = \theta$ .


 Figure 2.1: Forme de la section déviatorique pour 3 valeurs de  $\chi_1$  et 3 valeurs de  $\chi_2$ .

### 1.3.2.b Les variables d'écouissage

Nous supposons une seule variable d'écouissage : la distorsion plastique  $\gamma_p$ , et à l'instar des modèles élastoplastiques en mécanique des sols, nous allons admettre que le rapport  $d\zeta_p/d\gamma_p$  est fonction connue de l'état thermodynamique :  $d\zeta_p/d\gamma_p = \varphi(\underline{\sigma}, T, \gamma_p)$ . D'où :

$$\dot{\zeta}_p = \varphi(\underline{\sigma}, T, \gamma_p) \dot{\gamma}_p \quad (2.51)$$

Le multiplicateur  $\dot{\gamma}_p$  étant positif, le signe de  $\dot{\zeta}_p$  est donc celui de la fonction  $\varphi$  qui peut éventuellement changer de signe (dilatance viscoplastique). La loi d'évolution de  $\gamma_p$  est de la forme :

$$\frac{d\gamma_p^{1/\alpha}}{dt} = \left( \psi(\underline{\sigma}, T, \gamma_p) \right)^{1/\alpha} \quad (2.52)$$

Il s'agit d'une généralisation de la loi classique de Lemaitre dont la réponse est en  $t^\alpha$  pendant un essai de fluage monophasique en température et en déviateur.

Des expressions de  $\varphi$  et  $\psi$ , obtenues par ajustement sur des essais triaxiaux et des essais de fluage classiques, sont données dans les références suivantes : Rouabhi et al. [3], Labaune [38], Labaune and Rouabhi [39] et Labaune et al. [40].

Dans le cadre des projets en cours (Géodénergies STOPIL-H2, CITHEP 20-2018...), il est prévu d'enrichir le mécanisme de distorsion de Lemaitre par au moins un deuxième mécanisme qui permettra d'une part d'améliorer les prédictions à long terme du mécanisme de Lemaitre, et d'autre part de tenir compte, comme pour  $\dot{\zeta}_p$ , d'un éventuel changement de signe au niveau de la loi d'évolution associée. Ce changement de signe est essentiel pour reproduire d'une part le phénomène d'hésitation au fluage (Munson et al [50]) observé pendant les essais de fluage (augmentation de la hauteur de l'éprouvette suite à une baisse instantanée du déviateur : fluage "inverse"), et d'autre part les essais de fluage cycliques en contraction/extension tels que réalisés par Mellegard et al [80], et Roberts et al [81]. Notons que le fluage inverse est particulièrement intéressant lors de l'interprétation des essais rapides d'étanchéité des cavités salines (Bérest et al [82]), son importance à moyen et long termes reste en revanche négligeable (Tijani [54]).

## 1.4 Le calage des paramètres

### 1.4.1 Commentaires généraux

Le problème de calage des paramètres d'une loi viscoplastique, telle que la nôtre, qui a pour ambition de prédire l'évolution des structures sur des dizaines d'années, voire des centaines, n'est pas réellement ni la dispersion naturelle des échantillons, ni le nombre de paramètres, ni même la gamme des sollicitations, mais le temps.

Dès l'étape de modélisation, nous savons déjà pertinemment que nous manipulons des matériaux naturels et qu'il est difficile d'avoir des échantillons représentatifs quasi-identiques, et pourtant, nous avons choisi une approche phénoménologique qui place ces échantillons au cœur de cette modélisation. Il convient alors, au moment de l'étape de calage, d'accepter les différences au niveau des jeux de paramètres d'un échantillon à un autre. Si ces différences sont toutefois flagrantes et qu'il est impossible de les expliquer par des considérations seulement liées aux hétérogénéités de la structure géologique, cela pourrait mettre en péril le fondement de l'approche déterministe utilisant un jeu unique de paramètres et il conviendrait même de songer à d'autres approches de type probabiliste par exemple. Cependant, dans la pratique des roches salines, les différences significatives sont souvent associées à des différences de faciès (couche géologique). Les différences modérées sont généralement absorbées soit par un ajustement global qui impose un jeu unique de paramètres pour toutes les éprouvettes, soit par des ajustements individuels suivis par des moyennes sur chaque paramètre.

Certains spécialistes proposent des modèles avec une demi-douzaine de mécanismes et une trentaine de paramètres. Mais ces modèles sont le plus souvent calés sur des essais insuffisants pour aboutir, pour le même sel, à un jeu unique de paramètres car ces essais ne sont pas assez variés en nature (écrouissage rapide, essais cycliques, fluage, triaxialité...). Dans ce genre de situations (manque de données expérimentales suffisantes), il est préférable d'utiliser des lois de comportement sobres (faible nombre de paramètres). Toutefois, le nombre de paramètres dans un modèle n'est pas un problème en soi à partir du moment où les essais de laboratoire ne laissent pas d'indétermination quant aux mécanismes pris en compte dans la modélisation : l'ajustement des paramètres associés à un mécanisme n'est pertinent que si le mécanisme en question est bien présent dans les mesures. Il n'en est pas de même peut-être des implications numériques quand il s'agit d'ajuster des lois fortement non linéaires, mais ceci ne doit pas justifier de lésiner sur le nombre de paramètres. Si intrinsèquement le modèle a besoin de plusieurs paramètres pour intégrer différents mécanismes, cela doit passer avant tout par un choix judicieux de la chronologie et des chemins de sollicitation pouvant montrer, toute choses égales par ailleurs, l'effet d'une telle ou telle sollicitation. L'exemple de l'effet de la pression de confinement dans les essais triaxiaux en est l'illustration parfaite. En effet, dans la nouvelle loi, pour bien caler sur des essais triaxiaux, il était nécessaire d'introduire son effet dans la loi d'évolution de la variable interne  $\gamma_p$  (équation 2.52), ce qui a conduit à l'introduction d'un seuil fonction de la contrainte moyenne à partir duquel les déformations viscoplastiques apparaissent. Cette notion de seuil est en revanche problématique pour les essais de fluage qui ont toujours été considérés comme indépendants de la pression de confinement. La vérification à partir de données existantes de ce point particulier était pratiquement impossible puisqu'il est très rare, malgré l'abondance des essais sur le sel, de trouver pour un essai de fluage et sur la même éprouvette des paliers de chargement qui concernent aussi bien la pression axiale que la pression latérale ; nous pouvons trouver plusieurs confinements sur plusieurs éprouvettes mais cette fois-ci il est délicat d'occulter les différences liées à la dispersion naturelle des éprouvettes pour remonter uniquement à l'effet de la pression de confinement. Par ailleurs, l'essai triaxial proprement dit étant réalisé en gardant la pression latérale constante (égale à celle de la pression à la fin de la phase isotrope) et en modifiant la pression axiale. Par conséquent, pour des essais avec des pressions de confinement différentes d'une éprouvette à une autre, on se retrouve à chaque fois avec un état de départ différent, ce qui pourrait avoir une incidence sur l'ensemble des résultats de l'essai et par conséquent sur le calage des paramètres. Notons enfin que ces remarques sur le rôle de la pression de confinement dans les essais triaxiaux classiques

peuvent être formulées aussi pour les essais triaxiaux dits à pression moyenne constante.

La gamme des variables pilotables pendant les essais de laboratoire constitue bien sûr un aspect des plus délicats à réussir, mais elle est reliée, avant tout, aux moyens technologiques mis en oeuvre. Les progrès en métrologie et en asservissement des machines d'essai, permettant aujourd'hui de réaliser des essais aussi compliqués que ceux destinés à l'étude des couplages thermo-hydro-chimico-mécaniques dans les milieux poreux, ne cessent d'évoluer rendant possibles des mesures de plus en plus précises. Certes, il reste encore des progrès à faire dans la maîtrise réelle non seulement des chemins de sollicitation mais aussi dans l'interprétation des résultats, mais ceci reste du domaine du possible comme, d'ailleurs, la détermination d'une loi complète valable sur de très larges gammes de sollicitation qui évitent son fonctionnement en mode extrapolateur pouvant être dangereux dans une approche phénoménologique ; le cadre d'une recherche appliquée, forcément d'une ampleur limitée, restreint souvent le choix des gammes des sollicitations à celles du problème industriel (Tijani [54]), mais comme les applications autour des cavités salines se diversifient de jour en jour, cela ne peut être que bénéfique pour cette détermination.

Venons-en maintenant à la variable temps. Elle est différente des autres variables pilotables : sa gamme de variation ne peut être que limitée, comparée aux durées de vie des ouvrages souterrains tels que les cavités salines qui doivent faire l'objet d'études non seulement pendant les phases création - exploitation (quelques dizaines d'années) mais également après leur abandon (sur plusieurs siècles d'après Bérest et al [83]). Ainsi, dans une approche phénoménologique basée sur des essais de laboratoire où le caractère interpolateur est souhaité pour toutes les variables, on se retrouve complètement désarmé face à l'intervalle de temps à respecter pendant les essais qui ne durent, dans le meilleur des cas, que quelques mois, voire quelques jours. Pendant ces essais, activer l'ensemble des micro-mécanismes physiques, qui ont probablement des temps caractéristiques très différents, pour que le calage d'une loi macroscopique, aussi "fine" soit-elle, soit robuste et permettant des prédictions fiables, est sans doute un défi, dans l'absolu insurmontable, mais face auquel il convient pourtant de ne pas abdiquer en pensant à des re-calages sur des mesures *in situ* de longues durées, à des approches de modélisation à l'échelle microscopique, etc.

Afin d'illustrer les conséquences pratiques du problème de calage lié à la durée des essais sur l'évolution à long terme des ouvrages creusés dans un massif salin, prenons l'exemple suivant qui consiste dans une première étape à identifier les paramètres du modèle de Lemaitre sur un essai de fluage réalisé en trois paliers de 14 jours chacun avec un déviateur de 5, 10 et 15 MPa respectivement. Les paramètres à caler sont  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $K$  tels que, pendant un essai de fluage à déviateur  $q$  constant, la déformation viscoplastique axiale est égale à  $(q/K)^\beta t^\alpha$ , où  $t$  est le temps. La figure 2.2 montre, en plus des mesures, deux calages : un premier calage sur les 35 premiers jours (mesures A) et un deuxième calage sur les 42 jours (mesures A+B), soit 7 jours de différence entre les deux calages. Les ajustements obtenus sur chaque durée sont satisfaisants. L'étape suivante consiste à utiliser l'un ou l'autre jeu de paramètres dans un calcul de structure. Pour cela, considérons le cas d'une cavité sphérique et regardons les conséquences des deux calages sur par exemple sa perte de volume. La figure 2.3 montre cette perte en fonction du temps : la différence entre les deux calculs, qui s'accroît avec le temps, est loin d'être négligeable dès les premières années de prévision. Ceci n'est bien sûr qu'un exemple illustratif et il convient de ne pas généraliser ces observations à d'autres essais qui peuvent assurer des prédictions bien meilleures. Cependant, il est clair que, pendant les essais de fluage multi-paliers, une durée minimale pour chaque palier est à considérer : elle doit être fonction non seulement de la fluabilité du sel et du niveau de la sollicitation mais

aussi des capacités prédictives de la loi à caler.

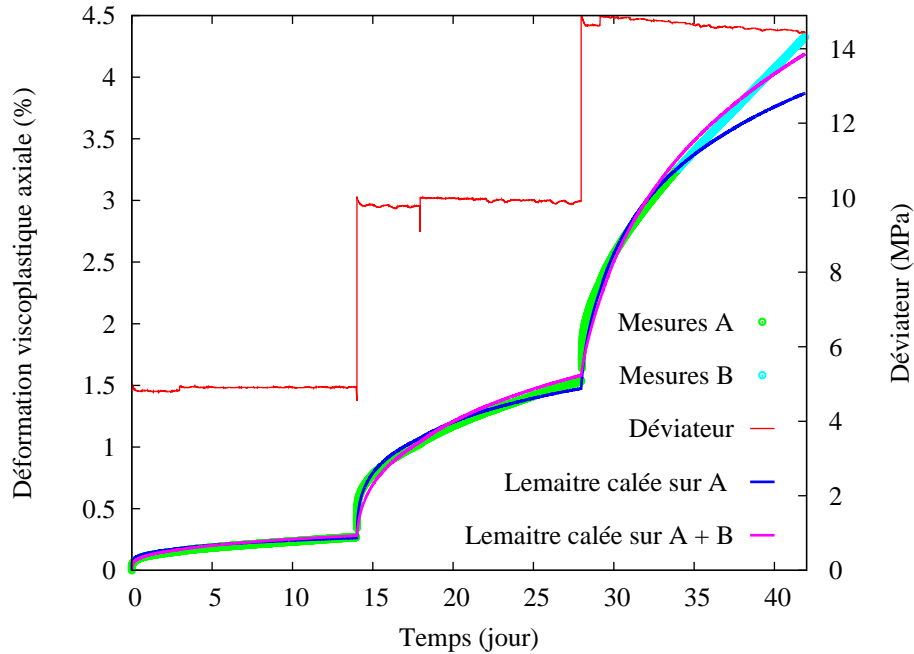


Figure 2.2: Essai de fluage multi-paliers avec deux ajustements de la loi de Lemaitre : un premier ajustement sur 35 jours (mesures A) et un deuxième ajustement sur les 42 jours (mesures A+B). Premier calage :  $\alpha = 0.23$ ,  $\beta = 2.45$  et  $K = 0.252$ , deuxième calage :  $\alpha = 0.31$ ,  $\beta = 2.45$  et  $K = 0.267$ , les unités sont : jour, micromètre/mètre et MPa.

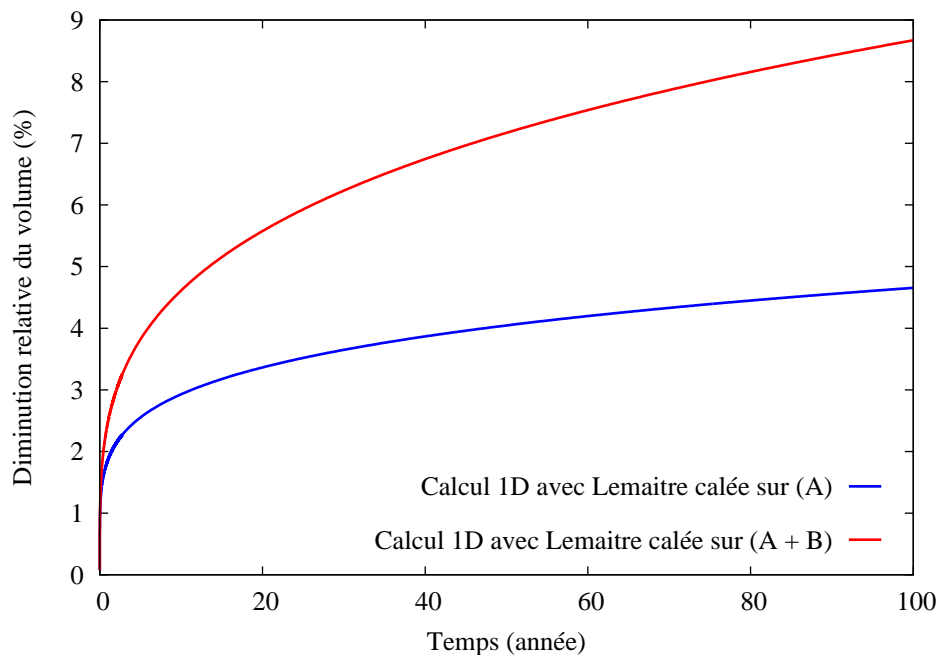


Figure 2.3: Calculs mécaniques (module d'Young de 26000 MPa, coefficient de Poisson de 0.3 et modèle de Lemaitre) d'une cavité sphérique, creusée dans un massif infini (la pression à l'infini est de 22 MPa) et soumise à sa paroi à une pression constante de 12 MPa.



### 1.4.2 Identification des paramètres de la nouvelle loi

L'identification des paramètres est faite généralement à partir des essais triaxiaux de compression sous une pression latérale  $P$  et une force axiale  $F$  telle que  $\underline{\underline{\sigma}} = -P\underline{\underline{1}} - (Q - P)\underline{\underline{e}}_z$ , avec  $Q = F/S$ ,  $S$  est la section idéalisée de l'éprouvette,  $\underline{\underline{e}}_z = \overrightarrow{e}_z \otimes \overrightarrow{e}_z$ ,  $\overrightarrow{e}_z$  est l'axe de révolution de l'éprouvette. Le tenseur des déformations  $\underline{\underline{\varepsilon}}$  est tel que  $\underline{\underline{\varepsilon}} = \varepsilon_{\theta\theta}\underline{\underline{1}} + (\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{\theta\theta})\underline{\underline{e}}_z$ . En notant par :  $p = (Q + 2P)/3$ ,  $q = Q - P$ ,  $\zeta = -\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) = -2\varepsilon_{\theta\theta} - \varepsilon_{zz}$  et  $\gamma = (2/3)(\varepsilon_{\theta\theta} - \varepsilon_{zz})$ , et en considérant un état de référence ( $t = 0$ ) tel que  $Q = P = P_0$ , il vient :

$$\zeta = \frac{3(1 - 2\nu)}{E}(p - P_0) + \zeta_p \quad (2.53)$$

$$\gamma = \frac{2(1 + \nu)}{3E}q + \int_0^t \text{sgn}(q)\dot{\gamma}_p d\tau \quad (2.54)$$

où  $E$  et  $\nu$  sont respectivement le module d'Young et le coefficient de Poisson,  $\text{sgn}$  est la fonction signe.

L'identification des paramètres doit être faite en plusieurs étapes car il est difficile d'ajuster l'ensemble des paramètres du modèle en une seule opération. La déformation déviatorique  $\gamma$  est indépendante de celle volumique  $\zeta$ , nous pouvons alors caler dans une première étape  $\gamma$  exactement de la même manière que le calage classique des lois de type Lemaitre. Le calage des paramètres relatifs à  $\zeta$  fait intervenir quant à lui  $\gamma_p$  comme une donnée qui peut être déduite des mesures expérimentales ou fournie d'une manière théorique par le calage de la première étape. Il va de soi qu'il est préférable d'utiliser la première méthode puisque le calage des paramètres introduits pour décrire le comportement volumique reste complètement indépendant du modèle déviatorique. Ainsi, nous pouvons procéder comme suit :

- calage des paramètres élastiques à partir des cycles de charge/décharge puis calcul de  $\gamma_p$  et de  $\zeta_p$  à partir des mesures  $(p, q, \gamma, \zeta)$  ;
- pour  $\underline{\underline{\sigma}}$  et  $T$  connues, calage de la fonction  $\psi$  ;
- pour  $\underline{\underline{\sigma}}$ ,  $T$  et  $\gamma_p$  connues, calage de la fonction  $\varphi$ .

Remarquons que nous avons appliqué cette approche à plusieurs essais et nous avons obtenu des résultats très satisfaisants Labaune [38].

### 1.4.3 Intérêt pratique des essais triaxiaux à pression moyenne constante

Compte tenu des relations entre les pressions  $(P, Q)$  et les invariants ( $p = (Q + 2P)/3$ ,  $q = Q - P$ ), et sachant que dans la pratique on a  $0 \leq P \leq P_m$  et  $0 \leq Q \leq Q_m$  où  $P_m$  et  $Q_m$  sont les valeurs maximales admissibles par la presse, on se retrouve dans le diagramme  $(p, q)$  avec une zone exploitable plus réduite que celle accessible à partir du diagramme  $(P, Q)$  comme le montre la figure 2.4.

En effet, la zone complète (la zone hachurée en vert dans la figure 2.4(a)) n'est totalement accessible qu'avec des essais sous confinement constant. Les essais à pression moyenne constante ne permettent de parcourir que la zone  $p \leq P_m$  qui contient toute la partie extension mais uniquement une portion de la zone contraction ; la zone hachurée en rouge dans la figure 2.4(b) n'est par accessible à moins de faire le chargement en trois étapes (isotrope jusqu'à  $p = P_m$ , déviatorique à confinement constant jusqu'à la pression moyenne souhaitée, puis déviatorique à pression moyenne constante).

Cependant les essais à contrainte moyenne constante présentent un certain avantage lors de l'analyse des résultats car la déformation volumique  $\zeta$  est égale à sa partie non élastique  $\zeta_p$ .



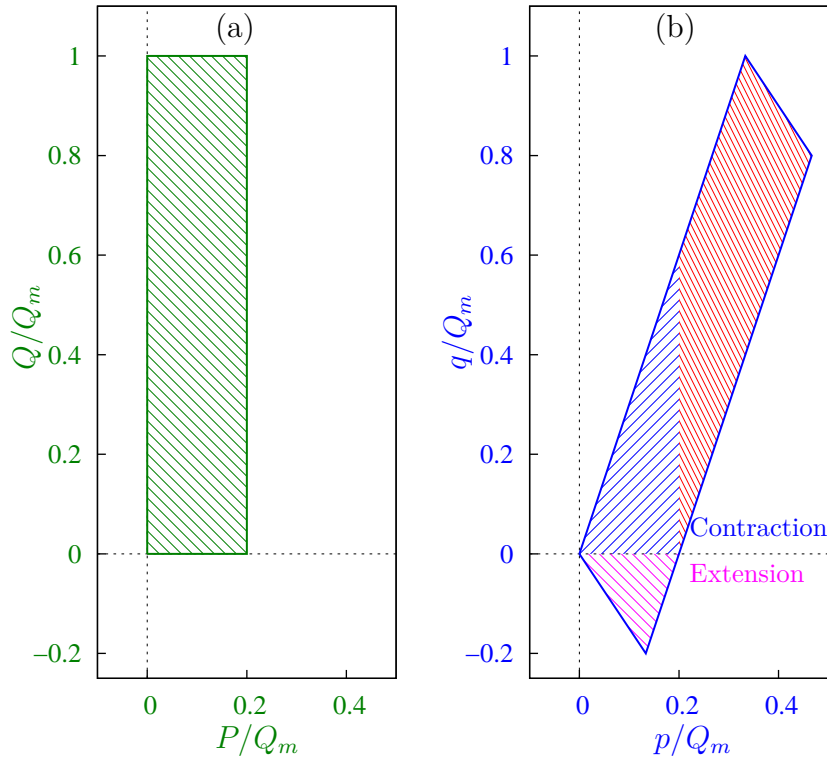


Figure 2.4: Domaines des pressions accessibles pendant les essais triaxiaux : (a) dans le digramme  $(P/Q_m, Q/Q_m)$ , (b) dans le digramme  $(p/Q_m, q/Q_m)$ ; c'est relatif à un rapport  $P_m/Q_m$  de 0.2, ce qui peut correspondre à une réalité pratique avec  $P_m = 60$  MPa et  $Q_m = 300$  MPa.

Ce type d'essai est proposé dans la littérature (voir par exemple DeVries et al [84]) afin de déterminer, pour  $p$  donnée, le seuil, en termes de déviateur, délimitant le comportement irréversible contractant du sel gemme.

Nous pouvons bien sûr retrouver la notion de seuil de dilatance en considérant pour les fonctions  $\psi$  et  $\varphi$  des équations respectivement (2.51) et (2.52) par exemple les fonctions suivantes (Rouabhi et al. [3]) :  $\varphi = ((p/N)^n - \gamma_p) / ((p/M)^m + \gamma_p)$  et  $\psi = (q/K)^\beta$ . En effet, pendant un essai de contraction triaxiale où  $q$  varie linéairement en fonction du temps  $q = \dot{q}t$ ,  $\dot{q}$  vitesse de chargement, nous pouvons écrire que :  $\gamma_p = (K/(1 + \beta/\alpha)/\dot{q})^\alpha (q/K)^{\alpha+\beta}$ . D'un autre côté, par construction  $d\zeta_p/d\gamma_p$  s'annule pour  $\gamma_p = (p/N)^n$ , il vient donc :  $q = K((1 + \beta/\alpha)\dot{q}/K)^{1/(1+\beta/\alpha)} (p/N)^{n/(\alpha+\beta)}$ , ce qui définit dans le diagramme  $(p, q)$  effectivement une courbe qui sépare le comportement dilatant de celui contractant, sauf que cette courbe n'est nullement intrinsèque puisqu'elle dépend de la vitesse de chargement  $\dot{q}$  et que ses paramètres ne sont pas non plus indépendants de ceux utilisés dans la loi de comportement. Par conséquent, la démarche utilisant cette courbe en post-traitement dans les calculs de dimensionnement d'ouvrages creusés dans un massif salifère comme critère qu'il est prudent de ne pas dépasser n'est pas forcément justifiée et peut-être convient-il mieux de la remplacer par celle basée simplement sur le signe de la vitesse des déformations volumiques  $\dot{\zeta}_p$  qui a surtout pour elle la cohérence avec le modèle rhéologique.

## 1.5 Commentaires sur la mesure des déformations volumiques

La mesure des déformations volumiques au cours des essais mécaniques sur le sel gemme présente actuellement un grand intérêt pour les applications pratiques puisqu'elle sert de base, comme expliqué précédemment, au dimensionnement des cavités salines. Aujourd'hui, elle

est essentiellement basée sur deux méthodes différentes : une méthode que l'on peut qualifier de locale basée soit sur les jauges de déformation ou sur les colliers extensométriques circonférentiels (de type chaînette par exemple), et une méthode que l'on peut qualifier de globale basée sur la mesure de la variation de volume du fluide utilisé dans la cellule triaxiale pour appliquer la pression de confinement. Chacune de ces méthodes présente des inconvénients : les jauges peuvent se décoller, les colliers demandent un encombrement important des cellules, le volume d'huile est sensible aux variations de la température, etc. Leur combinaison, pendant le même essai, peut aboutir à de sérieuses difficultés lors de l'interprétation des résultats comme montré dans Rouabhi et al. [3]. Ces difficultés sont essentiellement dues au fait que les déformations volumiques mesurées sont généralement faibles et tout écart par rapport à l'idéalité, causé par exemple par le phénomène de frettage (Rouabhi et al. [3]) ou encore par l'existence d'insolubles (Azabou et al. [85]), peut les perturber significativement.

Afin d'apporter un éclairage sur la réalité de ces mesures, je vais présenter dans ce qui suit quelques résultats numériques montrant, toutes choses égales par ailleurs, l'effet des conditions aux bords sur les différentes méthodes de mesure des déformations volumiques. La comparaison est fondée sur la nouvelle loi dont les paramètres sont déduits à partir d'un calage sur des mesures obtenues à partir d'essais triaxiaux utilisant une approche d'interprétation qui suppose l'homogénéité des déformations à l'intérieur de l'éprouvette.

Considérons pour cela une éprouvette lors d'un essai mécanique de laboratoire et désignons par  $\Omega_0$  sa configuration de référence et par  $\Omega$  sa configuration actuelle (voir figure 2.5(b)). Dans la base cylindrique orthonormée  $(\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_z)$ ,  $\Omega_0$  est telle que  $\vec{x}_0 = r_0 \vec{e}_r + z_0 \vec{e}_z$  avec  $r_0 \in [0, \mathcal{R}_0]$ ,  $z_0 \in [-\mathcal{H}_0/2, \mathcal{H}_0/2]$ ,  $\mathcal{R}_0$  et  $\mathcal{H}_0$  étant respectivement le rayon et la hauteur de l'éprouvette avant sa déformation. Quant à  $\Omega$ , elle est telle que  $\vec{x} = r(r_0, z_0, t) \vec{e}_r + z(r_0, z_0, t) \vec{e}_z$  avec  $r \in [0, \mathcal{R}(z_0, t)]$  et  $z \in [-\mathcal{H}(t)/2, \mathcal{H}(t)/2]$ ,  $\mathcal{H}(t)$  étant la hauteur actuelle de l'éprouvette et  $\mathcal{R}(z_0, t) = r(\mathcal{R}_0, z_0, t)$ .

On introduit :

- $\varepsilon_{rr}$ ,  $\varepsilon_{\theta\theta}$  et  $\varepsilon_{zz}$  : composantes respectivement radiale, tangentielle et verticale du tenseur des déformations  $\underline{\underline{\varepsilon}}$  ;
- $\zeta = -\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) = -(\varepsilon_{rr} + \varepsilon_{\theta\theta} + \varepsilon_{zz})$  : la vraie déformation volumique locale ;
- $\varepsilon = -2\varepsilon_{\theta\theta} - \varepsilon_{zz}$  : la déformation volumique locale approchée ;
- $\varepsilon_{\mathcal{R}} = (\mathcal{R} - \mathcal{R}_0)/\mathcal{R}_0$  : la déformation circonférentielle au milieu de l'éprouvette ;
- $\varepsilon_{\mathcal{L}} = (\mathcal{L} - \mathcal{L}_0)/\mathcal{L}_0$  : l'écartement relatif entre deux points matériels de la surface latérale de l'éprouvette séparés de  $\mathcal{L}_0$  dans  $\Omega_0$  et de  $\mathcal{L}$  dans  $\Omega$  ;
- $\varepsilon_{\mathcal{V}} = (\mathcal{V} - \mathcal{V}_0)/\mathcal{V}_0$  : la déformation volumique déduite à partir de la mesure du volume total de l'éprouvette ;
- $\varepsilon_{\mathcal{V}}(\mathcal{L}_0) = 1 - (1 + \varepsilon_{\mathcal{R}})^2(1 + \varepsilon_{\mathcal{L}})$  : la déformation volumique déduite à partir des mesures  $\varepsilon_{\mathcal{R}}$  et  $\varepsilon_{\mathcal{L}}$ .

Les déformations locales  $\varepsilon_{\theta\theta}$  et  $\varepsilon_{zz}$  peuvent être mesurées par des jauges collées à l'échantillon. Les déformations  $\varepsilon_{\mathcal{R}}$  et  $\varepsilon_{\mathcal{L}}$  peuvent être, quant à elles, mesurées par des extensomètres circonférentiels et axiaux. Enfin, la variation du volume du fluide de confinement permet, lorsque le mouvement du piston et la température sont bien contrôlés, de mesurer la variation relative du volume globale de l'éprouvette  $\varepsilon_{\mathcal{V}}$ . La convention choisie ici pour le signe des déformations volumiques est telle qu'une diminution du volume se traduit par un nombre positif.

Les conditions réelles de contact entre les plateaux de la presse et l'éprouvette étant inconnues, on se limitera donc aux deux cas extrêmes : le glissement parfait et l'adhérence

parfaite, et dans les deux cas nous considérons une pression latérale  $P$  de 10 MPa et une vitesse de déformation axiale globale de 50 %/jour. Les simulations numériques, réalisées en isotherme et en grandes déformations à l'aide du logiciel VIPLEF, concernent une éprouvette cylindrique d'élanement 2 soumise un chargement triaxial en contraction.

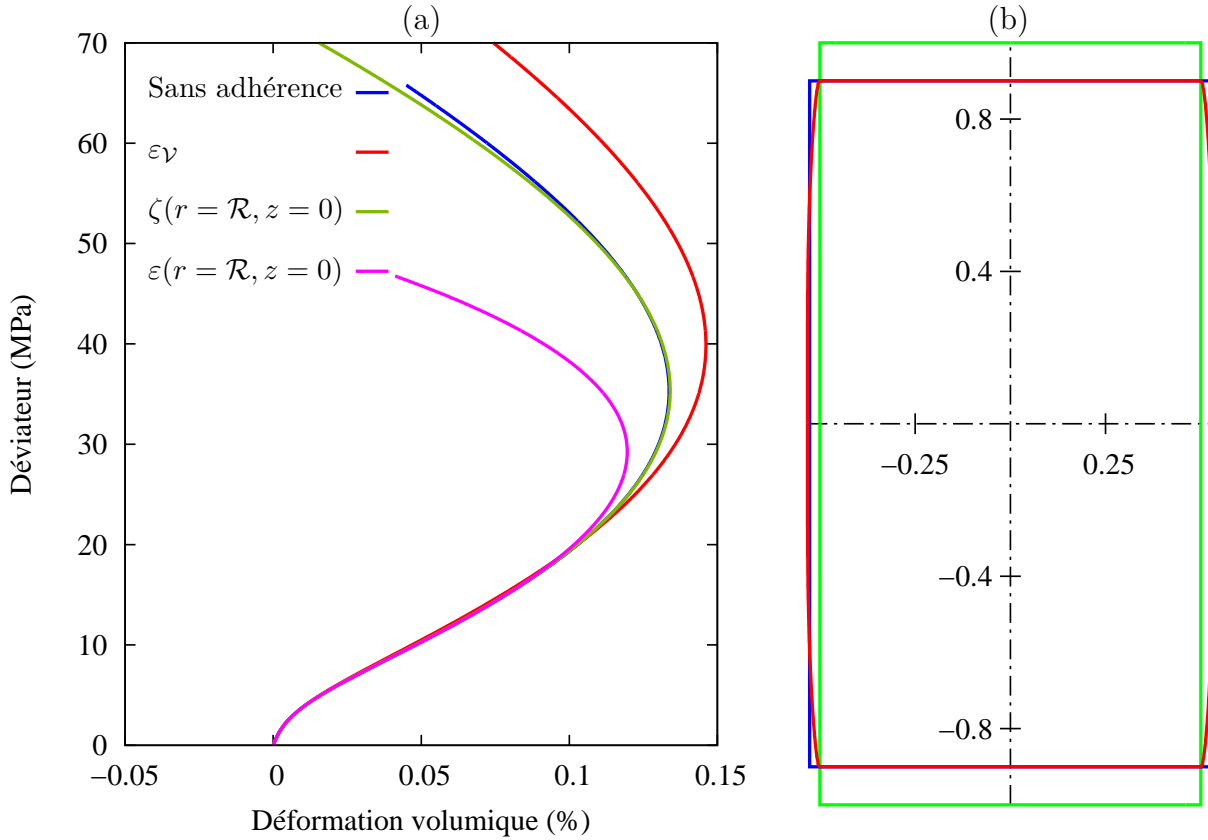


Figure 2.5: (a) déformations volumiques déduites par différentes mesures, (b) géométrie de l'éprouvette avant déformation (en vert) et à la fin de l'essai ( $t = 0.2$  jour) : en bleu pour le cas sans adhérence et en rouge pour le cas avec adhérence.

La figure 2.5(a) montre le déviateur des contraintes en fonction de la déformation volumique déduite par plusieurs mesures. Dans le cas sans adhérence (glissement parfait), la transformation entre  $\Omega_0$  et  $\Omega$  est homogène et toutes les mesures sont cohérentes. La situation se complique en cas d'adhérence comme l'illustre la figure 2.5(a) qui montre trois mesures différentes de la déformation volumique : seule la mesure locale  $\zeta$  au milieu de l'éprouvette est cohérente avec l'hypothèse de la transformation homogène, les deux autres mesures  $\varepsilon_V$  et  $\varepsilon$  donnent des résultats très différents. Si nous considérons alors comme réponse intrinsèque du matériau la mesure donnée par  $\zeta$ , cela nous conduit à constater que la mesure globale  $\varepsilon_V$  surestime le niveau du déviateur pour lequel on observe une dilatance macroscopique de l'éprouvette et que la mesure locale  $\varepsilon$ , déduite des déformations tangentielle  $\varepsilon_{\theta\theta}$  et axiale  $\varepsilon_{zz}$  comme si elles étaient mesurées par des jauges, sous estime, quant à elle, ce niveau de déviateur. Le résultat concernant  $\varepsilon_V$  et  $\varepsilon$  est très représentatif de ce que l'on observe au laboratoire ; la seule différence ici est qu'elles sont comparées à une troisième mesure  $\zeta$  qui est quasiment indépendante des conditions de frottement au niveau des plateaux de la presse. Malheureusement, cette grandeur n'est pas accessible actuellement aux mesures classiques du laboratoire : c'est la composante  $\varepsilon_{rr}$  qui pose problème.

La figure 2.6(a) montre, pour l'éprouvette avec adhérence, en plus des grandeurs de la figure

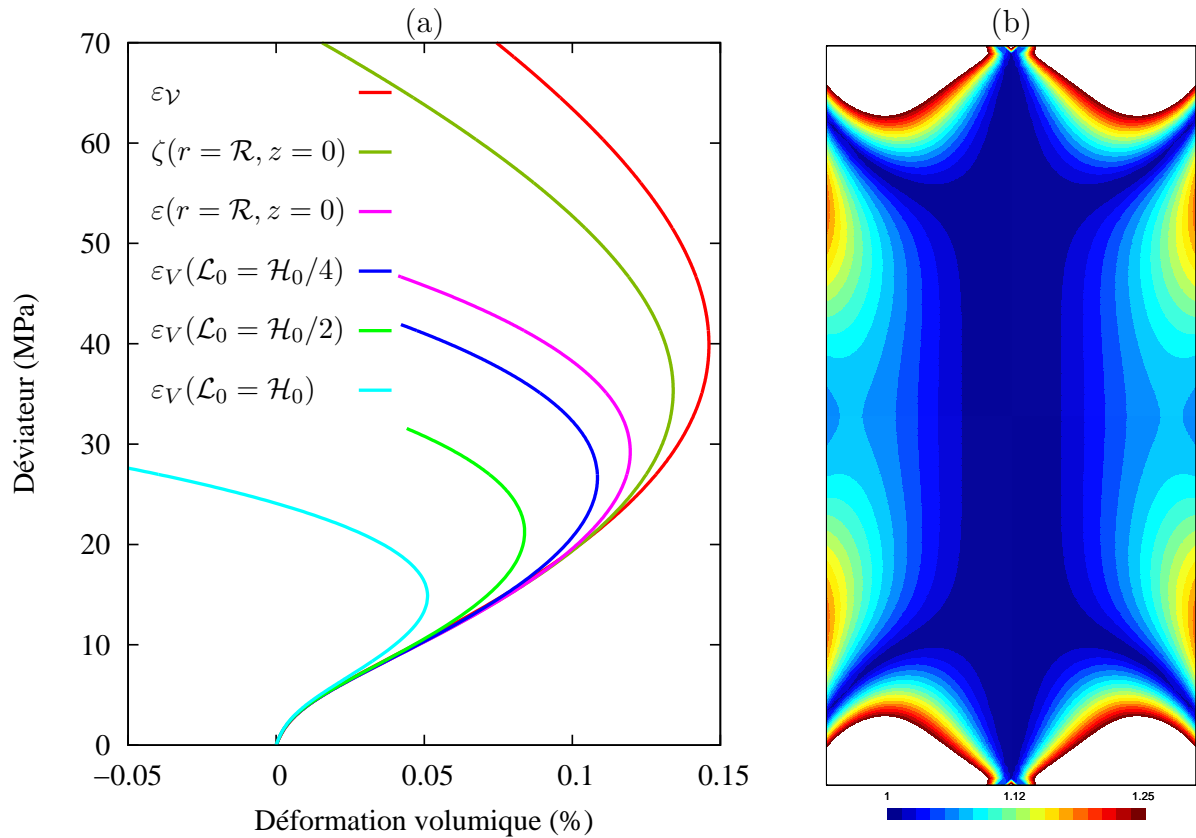


Figure 2.6: Éprouvette avec adhérence : (a) déformations volumiques déduites par différentes mesures , (b) champ de la variable  $2 \cos(\theta)$  ( $t = 0.2$  jour).

2.5(a), les mesures  $\varepsilon_V$  obtenues en considérant trois mesures de la déformation axiale : la déformation axiale globale de l'éprouvette ( $\mathcal{L}_0 = \mathcal{H}_0$ ), la déformation basée sur une longueur  $\mathcal{L}_0 = \mathcal{H}_0/2$  et la déformation basée sur une longueur  $\mathcal{L}_0 = \mathcal{H}_0/4$ . Ces différentes mesures axiales, comme précisé précédemment, sont obtenues généralement par des capteurs extensométriques accrochés à la paroi latérale de l'éprouvette. On remarque une différence très significative entre les différentes mesures. La mesure qui s'écarte le plus de  $\zeta$  est celle utilisant la déformation axiale globale ; plus on se rapproche du centre de l'éprouvette, meilleure est la mesure. Ceci est dû à la répartition hétérogène des contraintes dans l'éprouvette comme l'illustre la figure 2.6(b) qui donne le champ de la variable  $2 \cos(\theta)$  qui, lors d'un essai triaxial en contraction, doit rester unitaire. Profitons de cette figure pour aussi remarquer que  $2 \cos(\theta)$  n'est proche de 1 que dans un volume (donc quantité de matière) nettement plus petite que le volume totale de l'éprouvette.

Il ressort donc de ces simulations qu'il est nécessaire de bien distinguer ces différentes mesures surtout dans la démarche qui consiste à établir à partir de ces courbes déviateur - déformation volumique un critère de dimensionnement fondé sur le seuil apparent de contractance - dilatance. Dans une telle démarche et avec un esprit conservateur de dimensionnement, l'ingénieur peut éventuellement se résoudre à accepter la plus pessimiste mais ce sera certainement au détriment soit d'un fonctionnement non optimal soit de la faisabilité même de l'ouvrage. La mesure par jauges placées au milieu de l'éprouvette est certainement la plus intéressante mais il reste cependant à résoudre le problème de leur décollement précoce.

## 2 Lois de comportement de l'air humide

Ce travail s'inscrit dans le cadre de la problématique du stockage massif de l'énergie en souterrain. Le caractère fluctuant et intermittent des énergies renouvelables impose le recours à des solutions de stockage de type CAES ou AA-CAES (El Murr [48], Ter-Gazarian [86], Cavallo [87], Succar et Williams [88], Kepplinger et al [89]) qui s'appuient sur le stockage de l'air ambiant dans de très grands volumes souterrains (cavités minées revêtues ou cavités salines) fonctionnant dans de larges gammes de température (de 5 °C à 650 °C) et de pression (jusqu'à 20 MPa). Dans ces gammes, le comportement thermodynamique de l'air ambiant n'a pas fait l'objet de suffisamment d'études théoriques et surtout de laboratoire, et en l'absence de modélisations fiables calées sur des mesures expérimentales, nous proposons dans ce qui suit une modélisation qui a pour objectif d'approcher le problème de détermination des propriétés thermodynamiques de l'air humide, y compris en présence de gouttelettes d'eau liquide.

L'idée principale de cette modélisation est de considérer que le système air sec - eau est un mélange idéal des constituants eau pur (liquide et vapeur) et air sec. Les lois utilisées pour ces deux corps sont celles proposées respectivement par Wagner et Prub [90] et Lemmon et al [91]. Pour ces deux lois, le potentiel thermodynamique, en termes de l'énergie libre massique  $f(\rho, T)$ , fonction de la masse volumique  $\rho$  et de la température absolue  $T$ , est sous la forme :

$$f(\rho, T)/T = Q_1 \ln \tau + Q_2 \ln \bar{\rho} + Q_3 + \sum_{i=1}^{n_a} A_i \alpha_i(\tau) + \sum_{i=1}^{n_b} B_i \beta_i(\bar{\rho}) \gamma_i(\tau) + \sum_{i=1}^{n_c} C_i \lambda_i(\bar{\rho}, \tau) \quad (2.55)$$

avec :  $\bar{\rho} = \rho/\rho_0$ ,  $\tau = T_0/T$  et  $(\rho_0, T_0)$  : un état de référence. Pour chaque corps, les fonctions  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ ,  $\gamma_i$  et  $\lambda_i$  et les constantes  $Q_i$ ,  $A_i$ ,  $B_i$  et  $C_i$  sont connues.

### 2.1 Introduction

Considérons le cas d'un mélange de  $q$  constituant. D'après le cadre des mélanges de fluides isotropes définie au chapitre 1, on peut associer à ce mélange une enthalpie libre  $g$ , fonction de l'état thermodynamique qui peut être défini par la pression  $p$ , la température  $T$  et les concentrations massiques  $C = (c_1, c_2, \dots, c_{q-1})$ , telle que  $g(p, T, C) = \sum c_k g_k(p, T, C)$  où  $g_k$  est l'énergie libre massique correspondant à la contribution du constituant  $k$  dans le mélange.

Un modèle simple pour construire le potentiel thermodynamique  $g(p, T, C)$  est de considérer que les fonctions partielles  $g_k(p, T, C)$  sont celles des constituants purs hors mélange  $g_k^\circ(p_k, T)$  où  $p_k$  est une pression partielle fonction de l'état  $(p, T, C)$  :

$$g(p, T, C) = \sum c_k g_k^\circ(p_k(p, T, C), T) \quad (2.56)$$

Il s'agit d'un mélange idéal dans le sens où l'égalité (2.56) ne contient aucun terme représentant l'interaction entre les constituants. Le problème principal revient à la détermination des  $q$  inconnues  $p_k$ . Pour cela, commençons tout d'abord par calculer les dérivées partielles de  $g$  par rapport à l'état  $(p, T, C)$  :

$$\begin{cases} p \partial_p g &= p \nu &= \sum c_j \nu_j p_j + \sum c_j \nu_j (p \partial_p p_j - p_j) \\ -\partial_T g &= s &= \sum c_j s_j^\circ - \sum c_j \nu_j \partial_T p_j \\ \partial_{c_k} g &= \mu_k - \mu_q &= g_k^\circ - g_q^\circ + \sum c_j \nu_j \partial_{c_k} p_j \end{cases} \quad (2.57)$$

où  $\nu$  et  $s$  sont respectivement l'entropie massique et le volume massique du mélange, les

grandeurs partielles  $\nu_k$  et  $s_k$  sont définies par :

$$\nu_k = \partial_{p_k} g_k^\circ(p_k, T), \quad s_k^\circ = -\partial_T g_k^\circ(p_k, T) \quad (2.58)$$

Le volume massique  $\nu_k$  est tel que, si on peut associer au constituant  $k$ , de masse  $\mathcal{M}_k$ , un volume  $\mathcal{V}_k$ ,  $\nu_k = \mathcal{V}_k/\mathcal{M}_k$ .

Ainsi, si nous voulons assurer l'additivité de  $s$ , la deuxième équation du système (2.57) montre qu'il suffit d'avoir la condition  $\sum c_j \nu_j \partial_T p_j = 0$ . Dans ce cas, l'additivité de l'enthalpie  $h = g + Ts$  se trouve alors immédiatement assurée puisque nous avons déjà celle de  $g$ . Pour avoir l'additivité de l'énergie libre  $f = g - p\nu$ , il suffit, par conséquent, d'avoir celle de  $p\nu$ . Il en résulte, d'après la première équation du système (2.57), qu'il faut aussi avoir la condition  $\sum c_j \nu_j (p \partial_p p_j - p_j) = 0$ . D'un autre côté, en identifiant le potentiel chimique  $\mu_k$  à  $g_k^\circ$ , nous avons, d'après la troisième équation du système (2.57), les  $q - 1$  conditions supplémentaires suivantes<sup>1</sup> :  $\sum c_j \nu_j \partial_{c_k} p_j = 0$ .

Avec toutes ces considérations, nous avons donc restreint la recherche du potentiel thermodynamique  $g$  à celui qui vérifie les conditions suivantes :

$$\begin{cases} g(p, T, C) = \sum c_k g_k^\circ(p_k, T) \\ g - p \partial_p g = f(p, T, C) = \sum c_k f_k^\circ(p_k, T) \\ g - T \partial_T g = h(p, T, C) = \sum c_k h_k^\circ(p_k, T) \end{cases} \quad (2.59)$$

Les grandeurs relatives à un constituant  $k$  sont des fonctions connues de la température  $T$  et des pressions partielles  $p_k(p, T, C)$  qui vérifient les conditions suivantes :

$$\begin{cases} \sum c_j \nu_j p \partial_p p_j = \sum c_j \nu_j p_j \\ \sum c_j \nu_j \partial_T p_j = 0 \\ \sum c_j \nu_j \partial_{c_k} p_j = 0, \quad k = 1 \text{ à } q - 1 \end{cases} \quad (2.60)$$

Pour des constituants non miscibles, nous pouvons admettre que  $p_k = p \forall k$ , dans ce cas, les inconnues  $p_k$  se trouvent immédiatement fixées, les coefficients  $c_k$  n'interviennent que de manière linéaire et les conditions (2.60) deviennent superflues.

En revanche, pour les constituants miscibles, le problème est différent. Dans ce cas, l'hypothèse qui consiste à supposer que chaque constituant  $k$  occupe le même volume  $\mathcal{V}$  est généralement admise. Le volume massique  $\nu_k$  est alors tel que  $\nu_k = \mathcal{V}_k/\mathcal{M}_k = \mathcal{V}/\mathcal{M}_k$ , ce qui permet d'écrire les  $q - 1$  relations suivantes :

$$c_k \nu_k = \nu \quad \text{pour } k = 1 \text{ à } q - 1 \quad (2.61)$$

La  $q$ -ième relation permettant de calculer les  $q$  fonctions inconnues  $p_k$  est donnée par les  $q + 1$  conditions du système (2.60). En effet, dans ce cas, ces conditions deviennent :

$$\begin{cases} p \partial_p \left( \sum p_j \right) = \sum p_j \\ \partial_T \left( \sum p_j \right) = 0 \\ \partial_{c_k} \left( \sum p_j \right) = 0, \quad k = 1 \text{ à } q - 1 \end{cases} \quad (2.62)$$

1. En effet, dans ce cas, on a :  $\mu_k - \mu_q = g_k^\circ - g_q^\circ, \forall k \leq q - 1$ . En multipliant cette égalité par  $c_k$  et en sommant par rapport à  $k$ , sachant que  $g = \sum c_k \mu_k$  et  $\sum c_k = 1$ , on obtient  $\mu_q = g_q^\circ$  et par conséquent  $\mu_k = g_k^\circ$ .

Ce qui se traduit par l'unique égalité :  $\sum p_k = p$ , égalité largement admise lorsqu'il s'agit d'un mélange de gaz. Compte tenu de (2.61), les  $q$  pressions se retrouvent déterminées en fonction de  $(p, T, C)$  via le système algébrique suivant :

$$\begin{cases} c_k \partial_{p_k} g_k^\circ(p_k, T) = c_q \partial_{p_q} g_k^\circ(p_q, T) \\ \sum p_k = p \end{cases} \quad (2.63)$$

C'est à partir de cette base théorique que j'ai développé le modèle pour l'air humide qui se trouve davantage compliqué du fait que l'un des constituant ( $H_2O$ ) change de phase ; on se retrouve en présence d'une phase liquide non miscible avec une phase gazeuse composée de constituants miscibles.

## 2.2 Le modèle proposé

On considère un mélange d'air sec (a) et d'eau pure (w). L'air sec a une température critique de 132.53 K et reste, par conséquent, uniquement en phase gazeuse puisque le domaine de température qui nous occupe est au delà de cette valeur. En revanche, l'eau peut changer de phase. Ainsi, dans le mélange, l'air sec peut être en présence soit de la vapeur d'eau (v), soit de l'eau liquide (l) en suspension (brouillard), soit de l'eau avec ses deux phases. Le mélange sera considéré toujours gazeux pour des températures supérieures à la température critique de l'eau pure  $T_w^c = 653.10$  K. On suppose en outre que la dissolution des composants de l'air sec dans la phase liquide de l'eau est négligeable ; la phase liquide du mélange sera formée uniquement de l'eau.

La masse totale occupant un volume  $\mathcal{V}$  de ce mélange est  $\mathcal{M} = \sum \mathcal{M}_k$ ,  $k = (a, v, l)$ . En introduisant les fractions massiques  $a = \mathcal{M}_a / (\mathcal{M}_a + \mathcal{M}_v)$  et  $c = \mathcal{M}_a / \mathcal{M}$ , la composition  $C = (c_a, c_v, c_l)$  du mélange peut être alors exprimée en fonctions de ces seules fractions :

$$c_a = c, \quad c_v = c/a - c, \quad c_l = 1 - c/a \quad (2.64)$$

Contrairement à la fraction massique  $c$ , qui peut être contrôlée indépendamment de la température et de la pression, la fraction massique  $a$  dépend de l'état thermodynamique du mélange car l'échange de matière entre les deux phases de l'eau empêche de contrôler la masse de la phase gazeuse. La composition  $C$  décrivant le mélange se réduit donc au seul paramètre indépendant  $c_a = c$ . Les coefficients  $c_v$  et  $c_l$  deviennent fonctions de l'état et pour qu'ils restent des quantités positives il faut que  $c$  vérifie l'inégalité :  $c \leq a$ . L'égalité  $a(p, T, c) = c$  décrit la saturation du mélange (air sec, vapeur d'eau) : toute quantité d'eau supplémentaire ne peut apparaître que sous forme liquide.

En cas de changement de phase de l'eau, le volume  $\mathcal{V}$  est la somme d'un volume  $\mathcal{V}_{av}$  occupé par l'air sec et la vapeur d'eau, et d'un volume  $\mathcal{V}_l$  occupé par l'eau liquide :  $\mathcal{V} = \mathcal{V}_{av} + \mathcal{V}_l$ . Ainsi, l'introduction de ces volumes permet de définir les volumes massique  $\nu_k$  suivant :

$$\nu_a = \mathcal{V}_{av} / \mathcal{M}_a, \quad \nu_v = \mathcal{V}_{av} / \mathcal{M}_v, \quad \nu_l = \mathcal{V}_l / \mathcal{M}_l \quad (2.65)$$

L'égalité des volumes de l'air sec et de la vapeur d'eau permet d'écrire une première relation entre  $\nu_a$  et  $\nu_v$  :  $c_a \nu_a = c_v \nu_v$ . Quant à la partition du volume total en volume liquide et volume gazeux, elle permet d'écrire une relation entre soit  $\nu_l$  et  $\nu_a$  soit  $\nu_l$  et  $\nu_v$  :  $\nu = c_l \nu_l + c_a \nu_a$  ou encore  $\nu = c_l \nu_l + c_v \nu_v$ . Ces relations montrent qu'on peut exprimer un des volumes massiques en fonction des deux autres ; il nous faut donc deux équations supplémentaires.

Calculons pour cela les dérivées partielles des potentiels thermodynamiques soit par rapport à l'état  $(\nu, T, c)$  pour l'énergie libre  $f(\nu, T, c) = \sum c_k f_k^\circ(\nu_k(\nu, T, c), T)$ , soit par rapport à



l'état  $(p, T, c)$  pour l'enthalpie libre  $g(p, T, c) = \sum c_k g_k^\circ(p_k(\nu, T, c), T)$  :

$$\begin{cases} -\partial_\nu f = p = p_l & + (p_a + p_v - p_l) \partial_\nu (c_a \nu_a) + (g_v^\circ - g_l^\circ) \partial_\nu c_l \\ -\partial_T f = s = \sum c_k s_k^\circ & + (p_a + p_v - p_l) \partial_T (c_a \nu_a) + (g_v^\circ - g_l^\circ) \partial_T c_l \\ \partial_c f = & g_a^\circ - g_v^\circ - (p_a + p_v - p_l) \partial_c (c_a \nu_a) - (g_v^\circ - g_l^\circ) \partial_c c_l \end{cases} \quad (2.66)$$

$$\begin{cases} \partial_p g = \nu = & \nu \partial_p p_l + c_a \nu_a \partial_p (p_a + p_v - p_l) - (g_v^\circ - g_l^\circ) \partial_p c_l \\ -\partial_T g = s = \sum c_k s_k^\circ & - \nu \partial_T p_l - c_a \nu_a \partial_T (p_a + p_v - p_l) + (g_v^\circ - g_l^\circ) \partial_T c_l \\ \partial_c g = & g_a^\circ - g_v^\circ + \nu \partial_c p_l + c_a \nu_a \partial_c (p_a + p_v - p_l) - (g_v^\circ - g_l^\circ) \partial_c c_l \end{cases} \quad (2.67)$$

Ces dérivées font apparaître naturellement les termes  $p_a + p_v - p_l$  et  $g_v^\circ - g_l^\circ$ . Cela nous invite donc à ajouter comme équations supplémentaires les équations d'équilibre à la fois mécanique et thermodynamique comme on pouvait s'y attendre. Avec ces conditions, on assure, d'un côté l'additivité de l'entropie, et d'un autre côté l'égalité entre la pression totale et la pression de la phase liquide.

Que ce soit en termes de volumes massiques  $(\nu_a, \nu_v, \nu_l)$  ou en termes de pressions partielles  $(p_a, p_v, p_l)$ , le problème revient donc à la résolution du système suivant :

$$\begin{cases} g_v^\circ = g_l^\circ \\ p_a + p_v = p_l \end{cases} \quad (2.68)$$

avec la condition sur la pression totale et celle sur les volumes :

$$\begin{cases} p_l = p \\ c(1 - \nu_l/\nu_v) \nu_a + (1 - c) \nu_l = \nu \end{cases} \quad (2.69)$$

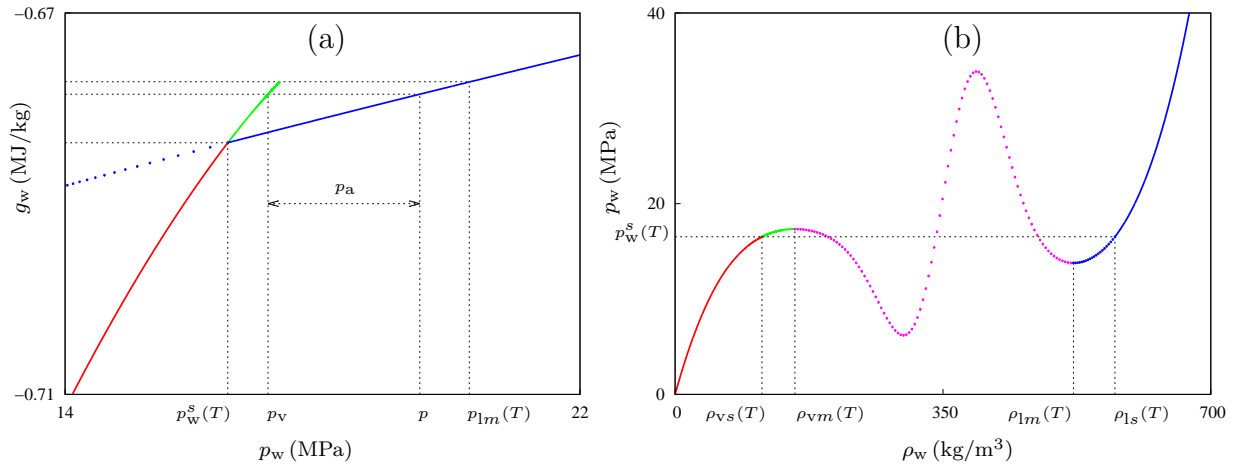


Figure 2.7: (a) enthalpie libre de l'eau pure  $g_w$  en fonction de la pression  $p_w$ , (b) pression de l'eau pure  $p_w$  en fonction de la masse volumique  $\rho_w$ .  $T = 350^\circ\text{C}$ .

La figure 2.7(a) donne l'enthalpie libre de l'eau pure  $g_w$  en fonction de la pression  $p_w$  pour une température fixée inférieure à la température critique. Les grandeurs partielles  $g_v^\circ$  et  $g_l^\circ$ , qui ne sont en fait que les restrictions de  $g_w$  sur le domaine vapeur et liquide, sont présentées chacune par une courbe. Le point d'intersection de ces deux courbes correspond à la pression de saturation  $p_w^s(T)$ . La courbe exprimant la pression  $p_w$  de l'eau pure, en tant que fonction, pour  $T$  fixée, de  $\rho_w$ , est donnée par la figure 2.7(b). Elle présente plusieurs portions mais seules les portions à l'extérieur de l'intervalle  $]\rho_{vm}(T), \rho_{lm}(T)[$  sont à considérer puisqu'elles respectent la condition  $(\partial_{\rho_w} p_w > 0)$ , correspondant à la stabilité mécanique (positivité du



coefficient de compressibilité isotherme), et pour lesquelles on arrive à identifier une enthalpie libre pour chaque phase comme le montre la figure 2.7(a).

En l'absence d'air sec ( $p_a = 0$ ), le système (2.68) traduit seulement l'équilibre chimique et mécanique nécessaire à la coexistence des phases liquide et vapeur de l'eau pure : il n'y a qu'une seule pression  $p_v = p_l = p_w(\rho_{vs}(T), T) = p_w^s(T)$  et qu'une seule enthalpie libre  $g_v^o = g_l^o = g_w^o(p_w^s(T), T)$ . En présence d'air sec, l'égalité des enthalpies libres et l'introduction d'une pression  $p_a \neq 0$  nous amène à travailler dans l'intervalle  $]\rho_{vs}(T), \rho_{vm}(T)[$ , l'intervalle  $[\rho_{lm}(T), \rho_{ls}(T)[$  conduirait à une pression de la phase liquide inférieure à la pression de la phase vapeur : cette situation est exclue car nous nous intéressons uniquement au cas où le liquide est en boule dans la phase gazeuse. Par conséquent, pour une pression totale  $p$  donnée (qui est aussi la pression de la phase liquide), la figure 2.7(a) nous conduit à distinguer les trois mélanges :

- 1)  $p \leq p_w^s(T)$  : le mélange est composé de l'air sec et de la vapeur d'eau ;
- 2)  $p \geq p_{lm}(T)$  : le mélange est composé de l'air sec et de l'eau liquide ;
- 3)  $p \in ]p_w^s(T), p_{lm}(T)[$  : le mélange est composé de l'air sec, de la vapeur d'eau et de l'eau liquide. C'est seulement dans ce cas que la résolution du système (2.68) est nécessaire.

L'étude de ces trois cas permettent finalement, sachant les définitions des  $\nu_k$  données par les relations (2.65), de calculer, en fonction de l'état thermodynamique, le potentiel thermodynamique adéquat ( $f$  ou  $g$ ) dont dérive toutes les propriétés thermodynamiques d'équilibre.

## 2.3 Étude de quelques propriétés thermodynamiques

Dans la littérature de la thermodynamique de l'air humide, le modèle le plus complet est celui de Feistel et al [92]. Ce modèle qui traite seulement le mélange air sec et vapeur d'eau n'est applicable, cependant, que dans des gammes réduites de pression et de température ( $p$  jusqu'à 5 MPa et  $T$  entre  $-80$  °C et  $200$  °C). Alors que les gammes qui nous occupent dépassent largement celles citées, nous allons, en l'absence d'autres matières plus fournies, nous contenter ici de la comparaison avec les résultats de ce modèle ; cela permettra de valider déjà une partie de l'approche proposée. Les résultats d'un modèle simple basé sur l'hypothèse des gaz parfaits seront également présentés.

Cette comparaison sera relative aux grandeurs physiques suivantes : la saturation, la masse volumique et la capacité thermique à pression constante.

### 2.3.1 La saturation

Il s'agit de trouver la concentration massique  $c = a$  à partir de laquelle il y a apparition de l'eau sous forme liquide dans un mélange initialement composé d'air sec et de vapeur d'eau. La figure 2.8 montre, pour différentes valeurs de la pression, l'humidité absolue  $\omega = (\mathcal{M}_v + \mathcal{M}_l)/\mathcal{M}_a = (1 - a)/a$ , dont l'utilisation en pratique est beaucoup plus fréquente que la concentrations  $c$ , en fonction de la température. Sur cette figure nous avons également représenté les résultats du troisième modèle fondé d'un côté sur l'hypothèse des gaz parfaits, et d'un autre côté sur une pression de vapeur d'eau dans le mélange égale à la pression de vapeur saturante de l'eau liquide :  $p_v = p_w^s(T)$ . D'où :  $a(p, T) = (1 - p/p_w^s(T))/(1 - p/p_w^s(T) - \varepsilon)$ ,  $\varepsilon = 0.621945$  étant le rapport des masses molaires de l'eau et de l'air sec.

Lorsque la pression est faible, l'hypothèse des gaz parfaits est pertinente, et les trois modèles

donnent pratiquement les mêmes résultats (courbes correspondant à 0.1 et 1 MPa). En revanche, le troisième modèle s'écarte sensiblement des deux autres, qui donnent quant à eux des résultats très proches, au fur et à mesure que la pression augmente. Les résultats de Feistel et al ne sont pas représentés pour des pressions supérieures à 5 MPa car le modèle est hors domaine de validité.

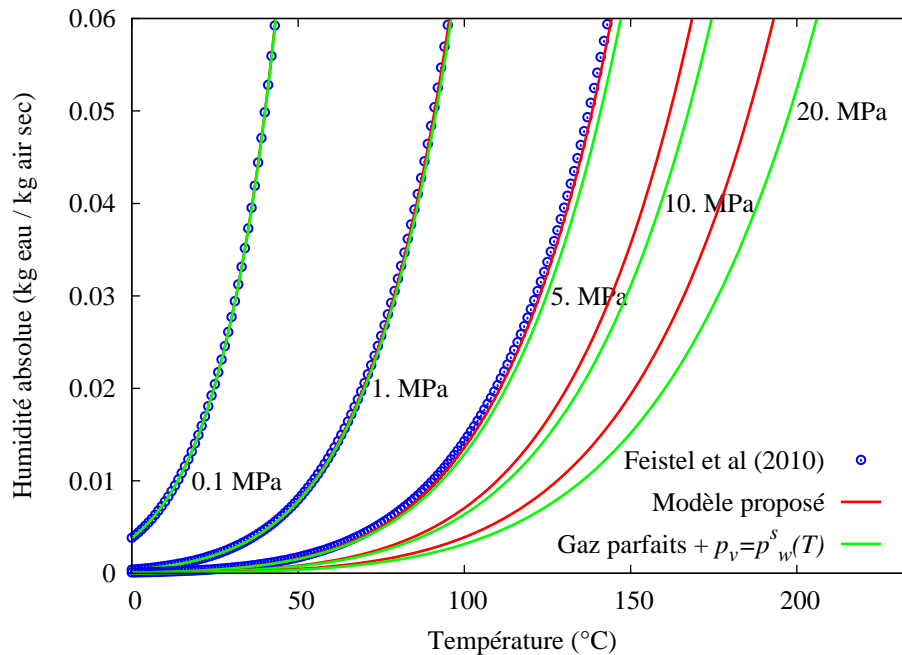


Figure 2.8: courbes de saturation : comparaison entre trois modèles.

### 2.3.2 La masse volumique

La figure 2.9(a) représente, pour différentes valeurs de la pression et pour une concentration  $c = 0.9$ , la masse volumique  $\rho$  en fonction de la température. On remarque que, pour une pression fixée, la courbe présente, à la température qui sépare le mélange (air sec + vapeur d'eau) de celui (air sec + vapeur d'eau + eau liquide), un changement de pente et non une discontinuité comme pour le cas de l'eau pure (figure 2.10(a)). La présence de l'air, dont la masse volumique ne présente aucune discontinuité dans la gamme des températures étudiée, a servi donc à lisser cette discontinuité. Notons que ces points de changement de pente sont d'autant plus clairs que si on représente le facteur de compressibilité  $Z = p/(\rho T)$  (figure 2.9(b)).

La figure 2.10(a) représente, pour une pression  $p = 5$  MPa, en plus de la masse volumique calculée par le modèle proposé, les masses volumiques de l'eau pure et de l'air sec. Cette figure montre en particulier que le changement de phase dans le mélange a lieu à une température différente de celle de l'eau pure.

La figure 2.10(b) permet de comparer, pour une pression  $p = 5$  MPa, une concentration  $c = 0.9$  et dans le cas d'un mélange sans présence d'eau liquide, la masse volumique avec celles de l'air humide de Feistel et al et de l'air humide en tant que gaz parfait. Cette figure montre une différence significative entre le modèle gaz parfait et les deux autres modèles qui intègrent l'humidité. La comparaison avec le modèle de Feistel et al est très satisfaisante.

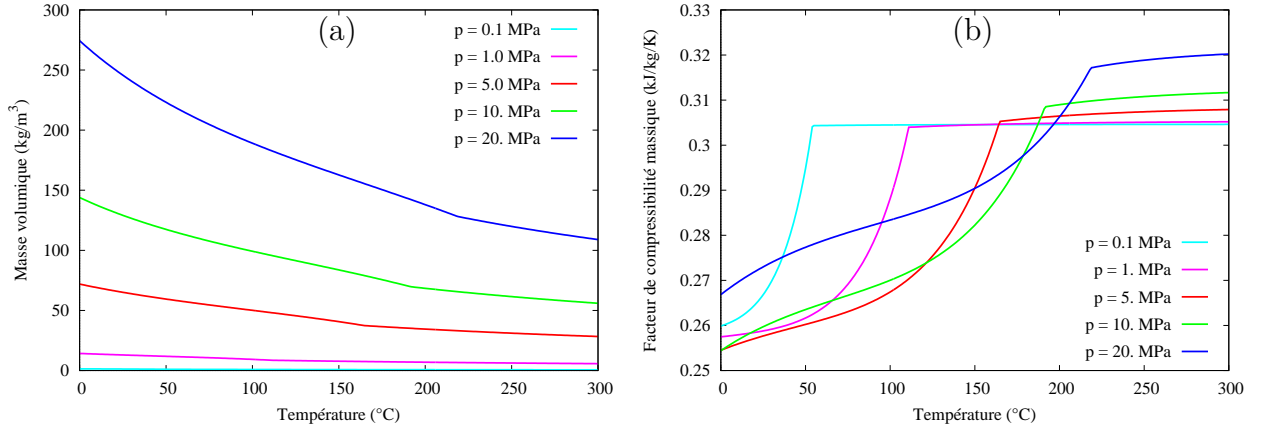


Figure 2.9: (a)  $\rho$  fonction de  $T$ , (b)  $Z$  fonction de  $T$ .  $c = 0.9$  et plusieurs valeurs de  $p$ .

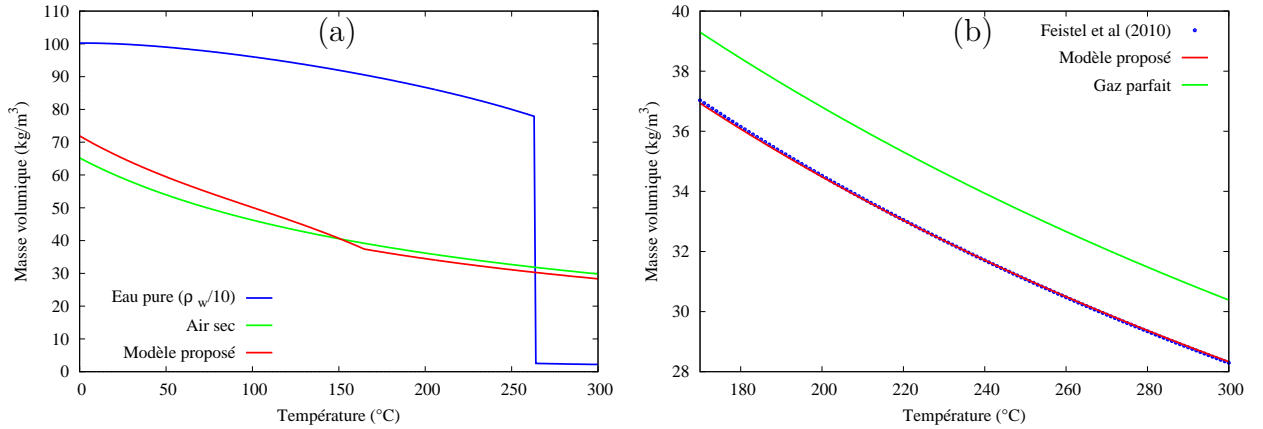


Figure 2.10: (a) comparaison de  $\rho$  avec celles de l'eau pure et de l'air sec, (b) comparaison entre trois modèles.  $c = 0.9$  et  $p = 5$  MPa.

### 2.3.3 La capacité thermique à pression constante

La capacité thermique à pression et composition fixées est définie par :  $C_p = \partial_T h(p, T, c)$ . Le développement de cette équation donne  $C_p$  sous la forme d'une somme de trois termes,  $C_p = \sum c_k C_{pk} + (c_a \partial_{p_a} h_a^\circ - c_v \partial_{p_v} h_v^\circ) \partial_T p_a - (h_v^\circ - h_l^\circ) \partial_T c_l$ , dont la signification physique est relativement aisée à dégager : lors d'une petite variation  $dT$  de la température, à  $p$  et  $c$  fixés, la masse  $\mathcal{M} = \sum \mathcal{M}_k$  a besoin d'une énergie thermique  $\mathcal{M} C_p dT$  qui sert à chauffer les masses  $\mathcal{M}_k = c_k \mathcal{M}$ , sans changement ni des  $c_k$  ni des  $p_k$ , d'où le terme  $\sum c_k C_{pk}$ , à faire varier les pressions  $p_a$  et  $p_v$  d'où le terme  $(c_a \partial_{p_a} h_a^\circ - c_v \partial_{p_v} h_v^\circ) \partial_T p_a$  car  $\partial_T p_v = -\partial_T p_a$ , et à faire en sorte qu'une petite masse  $d\mathcal{M}_l = -\partial_T c_l \mathcal{M} dT$  change de phase en passant de l'état liquide à l'état vapeur. La quantité  $h_v^\circ - h_l^\circ$  n'est autre que l'enthalpie de vaporisation de l'eau pure (chaleur latente de changement de phase). Notons que si, pour les constituants gazeux (air et vapeur), on fait l'hypothèse de gaz parfait à capacité thermique constante, le terme  $(c_a \partial_{p_a} h_a^\circ - c_v \partial_{p_v} h_v^\circ) \partial_T p_a$  disparaît.

En dérivant par rapport à  $T$  l'égalité  $g_v^\circ(p_v, T) = g_l^\circ(p_l, T)$ , il vient :  $\nu_v \partial_T p_a = s_l^\circ - s_v^\circ$ . Sachant que  $T(s_v^\circ - s_l^\circ) = h_v^\circ - h_l^\circ$ , on obtient donc :

$$C_p(p, T, c) = \sum c_k C_{pk} + \left[ (c_v \partial_{p_v} h_v^\circ - c_a \partial_{p_a} h_a^\circ) / (\nu_v T) - \partial_T c_l \right] (h_v^\circ - h_l^\circ) \quad (2.70)$$

La figure 2.11(a) représente, pour différentes valeurs de la pression et pour une concentration  $c = 0.9$ , la capacité thermique  $C_p$  en fonction de la température. Dans ce cas, le changement

de phase de l'eau à l'échelle du mélange se traduit par une forte discontinuité qui induit, pour le mélange en présence d'eau liquide, des variations importantes de  $C_p$  en fonction de la température.

La figure 2.11(b) permet de comparer, pour une pression  $p = 5$  MPa, une concentration  $c = 0.9$  et dans le cas d'un mélange sans présence d'eau liquide, la capacité thermique  $C_p$  avec celles de l'air humide en tant que gaz parfait à capacité thermique constante et de l'air humide de Feistel et al. La comparaison avec le modèle de Feistel et al est satisfaisante. Le modèle gaz parfait donne, quant à lui, un résultat un peu éloigné des deux autres.

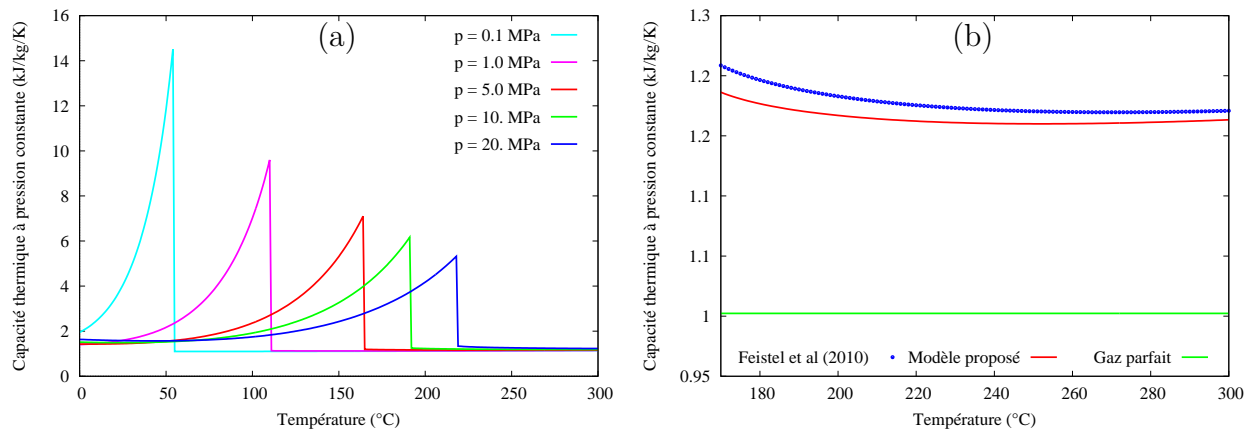


Figure 2.11: (a)  $C_p$  en fonction de  $T$  pour plusieurs valeurs de la pression, (b) comparaison entre trois modèles pour  $p = 5$  MPa.  $c = 0.9$ .

# Chapitre 3

## Le stockage souterrain d'énergie

---

Suite à la récente émergence de nouvelles stratégies d'exploitation des cavités souterraines par cycles rapides injection/soutirage, les aspects thermodynamiques sont devenus très importants [93]. Face à la complexité du problème posé et à la diversité des disciplines scientifiques couvertes par ce domaine, j'ai pu apporter une solution à ce problème dans sa globalité en développant le logiciel Demether (Rouabhi [94, 95]) qui permet de résoudre les problèmes thermodynamiques associés aux cavités salines depuis leur création jusqu'à leur abandon. Ce nouveau logiciel est pleinement utilisé aujourd'hui non seulement en interne du Centre mais également par nos partenaires industriels qui nous donnent accès à des bases de mesures *in situ* indispensables pour la validation et le développement du logiciel.

Le logiciel Demether, succédant à un premier logiciel Chales dédié à la phase de lessivage, a pour ambition d'aborder le problème associé au système complet : puits, cavité et massif rocheux. Lors de la réalisation du logiciel Chales, j'ai montré (Rouabhi et al. [96]) qu'il est illusoire de vouloir aborder numériquement le problème complet (contraste entre les dimensions du puits, de la cavité et du massif, difficultés de simuler la variation de la forme de la cavité durant la phase de lessivage. . .) sans faire des hypothèses simplificatrices qui peuvent ramener le problème réel à un couplage entre un ensemble de problèmes moins complexes.

Comme le montre la figure 3.1, le système complet (puits, cavité, massif rocheux) est ainsi décomposé en quatre zones reliées entre elles par des lois de conservation (masse, énergie. . .) et d'interface (coefficients d'échange, dissolution. . .) et régies chacune par des équations (conservation et comportement) dans lesquelles j'ai adopté des hypothèses adéquates (Rouabhi et al. [4]). Le puits (zone 1) est découpé en compartiments où des fluides différents peuvent circuler en même temps afin de simuler le fonctionnement de la cavité depuis son lessivage jusqu'à son abandon. Il échange de l'énergie thermique avec le massif autour du puits (zone 2) et de l'énergie thermique et de la matière avec la cavité (zone 3). Les bilans de masse et d'énergie dans la cavité sont non seulement perturbés par les échanges avec le puits mais également par les échanges de matière (la dissolution du sel) et d'énergies thermique et mécanique avec le massif autour de la cavité (zone 4) qui peut subir de grandes déformations.

À part le fait de faciliter considérablement la résolution numérique du problème complet, cette décomposition en zones permet aussi de bien identifier les verrous scientifiques propres à chaque zone et de mieux cibler les actions de recherche. Actuellement, ces actions sont menées dans le cadre de la thèse de Mejda Azabou, dont j'assure le co-encadrement, concernant la validation de la nouvelle loi de comportement des roches salines (zone 4) développée dans le cadre de la thèse de Paule Labaune (Labaune [38], Labaune and Rouabhi [39], Labaune et al. [40]), et la thèse d'Aurélien Soubeyran autour de la thermodynamique de la cavité (zone 3) lors du stockage du CO<sub>2</sub> et du O<sub>2</sub> où il est question d'étudier les interactions qui s'opèrent entre ces gaz et la saumure présente dans la cavité (Soubeyran et al. [97]).

La loi de comportement des roches salines a été abordée dans le chapitre 2. Le modèle du

massif autour du puits est abordé dans Rouabhi et al. [96]. Le modèle du massif autour de la cavité a été abordé par Tijani [54]. Par conséquent et afin d'illustrer cet axe de recherche, je vais détailler dans ce qui suit uniquement le modèle puits et le modèle cavité. Ces deux modèles utilisent des résultats du premier chapitre.

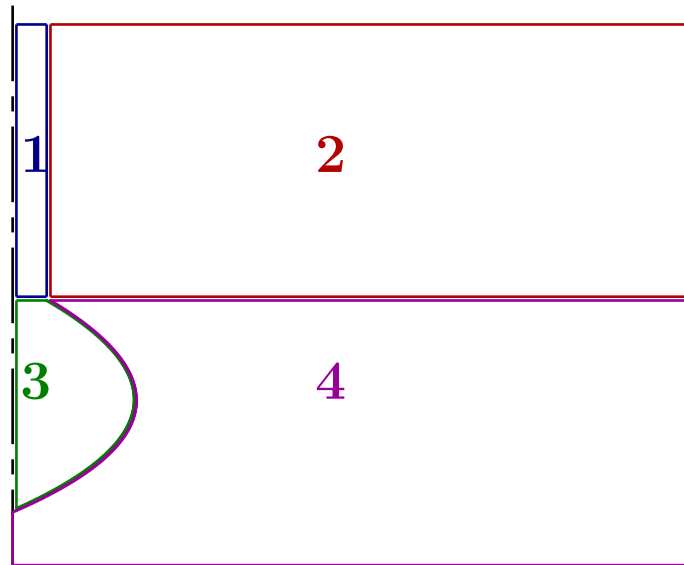


Figure 3.1: Décomposition en zones du système complet.

## 1 Le modèle Puits

Le développement de ce modèle ne profite pas uniquement à la thématique portant sur le stockage souterrain d'énergie, mais également aux autres thématiques telles que la congélation artificielle des terrains (Vitel et al. [98]) et le forage, que ce soit pour l'exploitation des hydrocarbures ou pour la géothermie profonde, menées au sein des équipes GIG et SHR du Centre de Géosciences.

Il est important de souligner que ce modèle ne convient pas à la modélisation de la phase transitoire du remplissage des tubes que nous supposons négligeable. Il permet, en revanche, de traiter les discontinuités artificielles liées à d'éventuels sauts de section le long de l'axe du puits. Ce traitement permet en particulier de bien appréhender les conditions d'interface entre le puits et la cavité notamment lorsque nous assimilons cet interface à un changement brutal de section.

### 1.1 Géométrie

Soit  $\mathcal{C}$  l'arc de courbe, de longueur  $L$ , représentant la ligne moyenne du puits et admettant une représentation paramétrique régulière paramétrée par son abscisse curviligne  $x$  et orientée dans le sens des  $x$  croissants :  $\mathcal{C} = \{ \vec{x} \in \mathbb{R}^3 / \vec{x} = \vec{x}_c(x), x \in [0, L] \}$ . L'application  $\vec{x}_c(x)$ , une bijection entre  $[0, L]$  et  $\mathcal{C}$  (arc de courbe simple), est supposée de classe  $C^2$  dont la dérivée  $\vec{t}(x) = \vec{x}_c'(x)$  est le vecteur unitaire tangent à  $\mathcal{C}$  au point  $\vec{x}_c(x)$ <sup>1</sup>. Soit  $\Omega(x_1, x_2) = \{ \vec{x} \in \mathbb{R}^3 / \vec{x} = \vec{x}_c(x) + \vec{\tau}, \vec{\tau} \cdot \vec{t} = 0 ; x \in [x_1, x_2] \}$  un tronçon arbitraire du puits compris entre les abscisses curvilignes  $x_1$  et  $x_2$ . Son intersection avec le plan de normal

1. Pour une fonction  $f(x)$ , la notation  $f'$  désigne la dérivée de  $f$  par rapport à  $x$ .

$\vec{t}(x)$  et passant par  $x$  est la section droite  $\Sigma(x)$  de centre d'inertie  $\vec{x}_c(x)$  ( $\int_{\Sigma(x)} \vec{\tau} d\mathcal{A} = \vec{0}$ ). Cette section est une surface plane bornée de  $\mathbb{R}^3$  pouvant être mise en bijection avec une surface de référence  $S(x_1, x_2)$  bornée de  $\mathbb{R}^2$  associée au tronçon  $[x_1, x_2]$  :  $\Sigma(x) = \left\{ \vec{x} \in \mathbb{R}^3 / \vec{x} = \vec{x}_c(x) + \vec{\tau}(x, \xi, \eta), \vec{\tau} \cdot \vec{t} = 0 ; (\xi, \eta) \in S(x_1, x_2) \right\}$ .

Sur  $\Sigma(x)$ , la différentielle de  $\vec{x}$  s'écrit :  $d\vec{x} = \partial_\xi \vec{\tau} d\xi + \partial_\eta \vec{\tau} d\eta$ , par conséquent l'élément de surface  $d\mathcal{A}$  sur  $\Sigma(x)$  peut être calculé en utilisant le jacobien de la transformation  $J_\Sigma$  tel que :  $d\mathcal{A} = |J_\Sigma| d\xi d\eta$  avec  $J_\Sigma \vec{t} = \partial_\xi \vec{\tau} \wedge \partial_\eta \vec{\tau}$ . Le caractère bijectif de la transformation de  $S(x_1, x_2)$  en  $\Sigma(x)$  impose à  $J_\Sigma$  de ne jamais s'annuler et donc de garder le même signe que nous choisissons positif ( $J_\Sigma > 0$ ). Dans  $\Omega(x_1, x_2)$ , la différentielle de  $\vec{x}$  s'écrit :  $d\vec{x} = (\vec{t} + \vec{\tau}') dx + \partial_\xi \vec{\tau} d\xi + \partial_\eta \vec{\tau} d\eta$ , par conséquent, l'élément de volume  $d\mathcal{V}$  de  $\Omega(x_1, x_2)$  est tel que :  $d\mathcal{V} = |(\vec{t} + \vec{\tau}') \cdot (\partial_\xi \vec{\tau} \wedge \partial_\eta \vec{\tau})| dx d\xi d\eta = |J_\Omega| d\mathcal{A} dx$  avec  $J_\Omega = 1 + \vec{\tau}' \cdot \vec{t}$ . Le vecteur  $\vec{\tau}$  étant orthogonal à  $\vec{t}$ , on en déduit, après dérivation :  $\vec{\tau}' \cdot \vec{t} = -\vec{\tau} \cdot \vec{t}'$ . Il vient :  $J_\Omega = 1 - \vec{\tau} \cdot \vec{t}'$ . Comme  $|\vec{\tau} \cdot \vec{t}'| \leq \|\vec{\tau}\|/R_C(x)$  où  $R_C(x)$  est le rayon de courbure de  $\mathcal{C}$  au point  $\vec{x}_c(x)$ , on imposera alors à la section droite  $\Sigma(x)$  d'avoir un rayon maximal tel que  $\max \|\vec{\tau}'\| < R_C(x)$ , il s'en suit donc que  $J_\Omega > 0$ . Par ailleurs, comme  $\vec{x}_c(x)$  est centre d'inertie de  $\Sigma(x)$ , on a  $\int_{\Sigma(x)} \vec{\tau} d\mathcal{A} = \vec{0}$  et donc  $\int_{\Sigma(x)} J_\Omega d\mathcal{A} = \int_{\Sigma(x)} d\mathcal{A} = \mathcal{A}(x)$  : aire de  $\Sigma(x)$ .

Le tronçon  $\Omega(x_1, x_2)$  a une frontière  $\partial\Omega(x_1, x_2)$  constituée de trois morceaux : la surface  $\Sigma(x_1)$ , la surface  $\Sigma(x_2)$  et une surface latérale  $\Sigma_\ell(x_1, x_2) = \left\{ \vec{x} \in \mathbb{R}^3 / \vec{x} = \vec{x}_c(x) + \vec{\tau}(x, \xi, \eta), \vec{\tau} \cdot \vec{t} = 0 ; x \in [x_1, x_2], (\xi, \eta) \in \partial S(x_1, x_2) \right\}$ . Soit  $\vec{n}$  la normale unitaire à  $\partial\Omega(x_1, x_2)$  dirigée vers l'extérieur de  $\Omega(x_1, x_2)$  et  $\vec{m}(x, \xi, \eta)$  la normale unitaire à  $\partial\Sigma(x)$  contenue dans le plan de  $\Sigma(x)$  et dirigé vers son extérieur. On a donc  $\vec{n} = -\vec{t}(x_1)$  sur  $\Sigma(x_1)$ ,  $\vec{n} = \vec{t}(x_2)$  sur  $\Sigma(x_2)$  et, en tout point de  $\partial\Sigma(x)$ , le vecteur  $\vec{t} \wedge \vec{m}$  est tangent et unitaire. Sur  $\Sigma_\ell(x_1, x_2)$ , en désignant par  $d\ell$  l'élément de longueur, l'élément de surface  $d\mathcal{A}$  peut s'écrire sous la forme :  $d\mathcal{A} \vec{n} = (\vec{t} \wedge \vec{m}) d\ell \wedge (\vec{t} + \vec{\tau}') dx = (J_\Omega \vec{m} - (\vec{\tau}' \cdot \vec{m}) \vec{t}) d\ell dx$ , d'où  $\vec{n} = (J_\Omega \vec{m} - (\vec{\tau}' \cdot \vec{m}) \vec{t}) / J_\ell$  et  $d\mathcal{A} = J_\ell d\ell dx$  avec  $J_\ell = \|(J_\Omega \vec{m} - (\vec{\tau}' \cdot \vec{m}) \vec{t})\|$ .

Considérons maintenant le cas où le tronçon  $\Omega(x_1, x_2)$  présente un changement brutal de section en un point  $x = y \in [x_1, x_2]$  et désignons, pour une grandeur  $\phi$ ,  $[[\phi]] = \phi(y^+) - \phi(y^-)$  le saut de  $\phi$  à la traversée de  $y$ . La continuité de  $\vec{x}_c$  et de  $\vec{t}$  implique que les deux sections droites  $\Sigma(y^-)$  et  $\Sigma(y^+)$  ont le même centre d'inertie  $\vec{x}_c(y)$  et sont dans le même plan orthogonal à  $\vec{t}(y)$  et passant par  $\vec{x}_c(y)$ . Désignons par  $\Sigma_\ell(y)$  la différence entre les deux sections. On a deux situations :  $\left\{ \Sigma_\ell(y) \subset \Sigma(y^-); [[\mathcal{A}]] < 0; \vec{n} = \vec{t}(y) \right\}$  ou  $\left\{ \Sigma_\ell(y) \subset \Sigma(y^+); [[\mathcal{A}]] > 0; \vec{n} = -\vec{t}(y) \right\}$ . Ainsi, dans tous les cas, l'aire de  $\Sigma_\ell(y)$  est  $[[[\mathcal{A}]]]$  et la normale extérieure  $\vec{n}$  à  $\partial\Omega(x_1, x_2)$  en tout point de  $\Sigma_\ell(y)$  est  $-\text{sgn}([[[\mathcal{A}]]]) \vec{t}(y)$ .

## 1.2 Les équations de bilan

D'après la définition de l'opérateur  $D/Dt$ , nous pouvons réécrire, pour une grandeur extensive  $\Phi(t) = \int_\Omega \rho \varphi d\mathcal{V}$  associée à un domaine  $\Omega$  rempli par un fluide composé de  $q$  constituants miscibles et qui se déplace avec une vitesse barycentrique  $\vec{v}$ , la relation (1.13) (cf. chapitre 1, § 2.1) sous la forme suivante :

$$\int_\Omega \phi d\mathcal{V} + \int_{\partial\Omega} \vec{\Psi} \cdot \vec{n} d\mathcal{A} = 0 \quad (3.1)$$



avec

$$\phi = \partial_t(\rho\varphi) - \gamma, \quad \vec{\Psi} = \rho\varphi \vec{v} + \vec{\Gamma} \quad (3.2)$$

qui ne fait intervenir qu'une intégrale de surface et une intégrale de volume indépendamment du mouvement de  $\Omega$ .

En particulier, la relation (3.1) est valable pour le domaine fixe  $\Omega(x_1, x_2)$ , qui contient éventuellement un saut de section en  $x = y \in [x_1, x_2]$ . Sachant que  $d\mathcal{V} = J_\Omega d\mathcal{A} dx$ , l'intégrale de volume devient :  $\int_\Omega \phi d\mathcal{V} = \int_{x_1}^{x_2} \left( \int_{\Sigma(x)} \phi J_\Omega d\mathcal{A} \right) dx$ . Quant à l'intégrale de surface, elle s'écrit :  $\int_{\partial\Omega(x_1, x_2)} \vec{\Psi} \cdot \vec{n} d\mathcal{A} = - \int_{\Sigma(x_1)} \vec{\Psi} \cdot \vec{t} d\mathcal{A} + \int_{\Sigma(x_2)} \vec{\Psi} \cdot \vec{t} d\mathcal{A} + \int_{\Sigma_\ell(x_1, x_2)} \vec{\Psi} \cdot \vec{n} d\mathcal{A}$ . Par conséquent, pour  $x \neq y$ , en prenant  $x_1 = x$  et  $x_2 = x + dx$ , on obtient lorsque  $dx$  tend vers zéro :

$$\int_{\Sigma(x)} \phi J_\Omega d\mathcal{A} + \left( \int_{\Sigma(x)} \vec{\Psi} \cdot \vec{t} d\mathcal{A} \right)' + \int_{\partial\Sigma(x)} \vec{\Psi} \cdot \vec{n} J_\ell d\ell = 0, \quad x \neq y \quad (3.3)$$

où nous avons utilisé le fait que sur  $\Sigma_\ell(x_1, x_2)$  on a  $d\mathcal{A} = J_\ell d\ell dx$ . Pour  $x = y$ , sachant que  $\int_{\Sigma_\ell(x_1, x_2)} \vec{\Psi} \cdot \vec{n} d\mathcal{A} = \int_{\Sigma_\ell(x_1, y)} \vec{\Psi} \cdot \vec{n} d\mathcal{A} + \int_{\Sigma_\ell(y, x_2)} \vec{\Psi} \cdot \vec{n} d\mathcal{A} + \int_{\Sigma_\ell(y)} \vec{\Psi} \cdot \vec{n} d\mathcal{A}$ , on obtient par passage à la limite ( $x_1 \rightarrow y^-$  et  $x_2 \rightarrow y^+$ ) :

$$\left[ \int_{\Sigma(y)} \vec{\Psi} \cdot \vec{t} d\mathcal{A} \right] - \text{sgn}([\mathcal{A}]) \int_{\Sigma_\ell(y)} \vec{\Psi} \cdot \vec{t} d\mathcal{A} = 0, \quad x = y \quad (3.4)$$

Ce sont ces égalités (3.3 et 3.4) que nous allons utiliser par la suite pour la mise en équation du problème dans chacun des compartiments du puits. Mais avant cela, nous allons faire appel à des hypothèses simplificatrices afin de ramener le problème initial à un problème dont les inconnues sont fonctions seulement du temps  $t$  et de l'abscisse curviligne  $x$ . À cette fin, nous aurons également besoin des relations suivantes pour tout champ vectoriel  $\vec{\Psi}$  ou tensoriel  $\underline{\Psi}$  sachant que sur  $\partial\Sigma(x)$  on a  $\vec{n} J_\ell = (J_\Omega \vec{m} - (\vec{\tau}' \cdot \vec{m}) \vec{t})$  :

$$\int_{\Sigma(x)} \vec{\nabla} \cdot \vec{\Psi} J_\Omega d\mathcal{A} = \left( \int_{\Sigma(x)} \vec{\Psi} \cdot \vec{t} d\mathcal{A} \right)' + \int_{\partial\Sigma(x)} \vec{\Psi} \cdot \vec{n} J_\ell d\ell \quad (3.5)$$

$$\int_{\Sigma(x)} \vec{\nabla} \cdot \underline{\Psi} J_\Omega d\mathcal{A} = \left( \int_{\Sigma(x)} \underline{\Psi} \vec{t} d\mathcal{A} \right)' + \int_{\partial\Sigma(x)} \underline{\Psi} \vec{n} J_\ell d\ell \quad (3.6)$$

Ces relations s'obtiennent aisément à partir du théorème de la divergence dans le domaine  $[x, x + dx] \times \Sigma(x)$ . En particulier, pour  $\underline{\Psi} = \underline{\underline{1}}$ , on a :

$$(\mathcal{A}(x) \vec{t}(x))' + \int_{\partial\Sigma(x)} \vec{n} J_\ell d\ell = \vec{0} \quad (3.7)$$

### 1.2.1 Hypothèses simplificatrices

Comme les relations précédentes font intervenir des intégrales sur  $\Sigma$  et le long de  $\partial\Sigma$ , il est alors tentant de penser à une démarche "rigoureuse" qui consiste à annoncer que les inconnues du problème sont des moyennes et ainsi ramener le problème dans l'espace 3D à un problème 1D suivant l'unique coordonnée spatiale  $x$ . En effet, à l'instar des équations de bilan dans un milieu poreux (voir chapitre 1), nous pouvons là aussi définir des moyennes adéquates sur  $\Sigma(x)$  et, moyennant quelques hypothèses simplificatrices, aboutir à des équations de bilan en termes de ces moyennes en tant que fonctions de  $t$  et de  $x$ . Toutefois, on se heurtera dans cette démarche, comme c'était d'ailleurs le cas avec le milieu poreux, à la validité des lois de comportement : pour un fluide qui a une équation d'état sous la forme  $\mathcal{F}(p, T, C) = 0$ , la



moyenne  $\langle \mathcal{F} \rangle$  n'est pas forcément égale à  $\mathcal{F}(\langle p \rangle, \langle T \rangle, \langle C \rangle)$  à moins que les variables d'état interviennent dans  $\langle \mathcal{F} \rangle$  d'une façon linéaire, ce qui nous éloigne des vraies équations d'état qui sont généralement non linéaires.

Le passage du problème 3D (grandeurs fonctions de  $\vec{x} \in \Omega$ ) à un problème 1D (grandeurs fonctions de  $x \in [0, L]$ ) nécessite donc des hypothèses beaucoup plus simplificatrices dont la justification et la pertinence peuvent éventuellement passer par la résolution du problème 3D (censé représenter la réalité) au cas par cas ou mieux encore par une confrontation aux mesures réelles. L'une et/ou l'autre des deux approches permettent de cerner les hypothèses simplificatrices et de les compléter par des règles empiriques qui donnent à leurs résultats plus de validité. Ces hypothèses consistent classiquement à admettre que, dans toute section droite  $\Sigma(x)$ , il existe une partie centrale prépondérante  $\Sigma^*(x)$  dans laquelle non seulement les variables d'état  $(p, T, C)$  ou  $(\rho, T, C)$  du fluide sont uniformes mais de plus la vitesse  $\vec{v}$  est parallèle à  $\vec{t}$ . On admet ainsi l'éventuelle existence d'une couche limite de faible épaisseur au voisinage de  $\partial\Sigma(x)$  dans laquelle on a de fortes variations de ces grandeurs physiques et en particulier des "efforts visqueux" qui s'opposent au mouvement moyen (qui font en sorte que, sur  $\partial\Sigma(x)$ , la vitesse tangentielle à la paroi solide fixe est très faible voir nulle) et un transfert de chaleur qui dépend entre autres de la différence de température entre le fluide dans  $\Sigma^*(x)$  et l'extérieur.

Par conséquent, en supposant l'uniformité de  $\rho$  et de  $\varphi$  dans  $\Sigma(x)$  et en admettant en plus une condition d'étanchéité sur  $\partial\Sigma(x)$  ( $\vec{v} \cdot \vec{n} = 0$ ), il vient en développant  $\vec{\Psi}$  suivant (3.2) et en considérant dans  $\Sigma(x)$  une vitesse  $\vec{v}$  sous la forme  $\vec{v} = v(x, t) \vec{t}(x)$  :

$$\mathcal{A}(x) \partial_t(\rho\varphi)(x, t) + (Q\varphi)'(x, t) = \int_{\Sigma(x)} \gamma J_\Omega d\mathcal{A} - \left( \int_{\Sigma(x)} \vec{\Gamma} \cdot \vec{t} d\mathcal{A} \right)' - \int_{\partial\Sigma(x)} \vec{\Gamma} \cdot \vec{n} J_\ell d\ell \quad (3.8)$$

$$\llbracket Q\varphi \rrbracket = - \llbracket \int_{\Sigma(y)} \vec{\Gamma} \cdot \vec{t} d\mathcal{A} \rrbracket + \text{sgn}(\llbracket \mathcal{A} \rrbracket) \int_{\Sigma_\ell(y)} \vec{\Gamma} \cdot \vec{t} d\mathcal{A} \quad (3.9)$$

avec

$$Q(x, t) = \mathcal{A}(x) \rho(x, t) v(x, t) \quad (3.10)$$

Dans la suite, nous allons écrire les équations de bilan (masse, quantité de mouvement, énergie, entropie) en substituant à chaque fois les variables génériques par les grandeurs désirées.

### 1.2.2 Bilan de la masse

Pour le bilan de la masse totale, on a :  $\varphi = 1$ ,  $\gamma = 0$ ,  $\vec{\Gamma} = \vec{0}$ , d'où :

$$\mathcal{A} \partial_t \rho + Q' = 0 \quad (3.11)$$

$$\llbracket Q \rrbracket = 0 \quad (3.12)$$

Pour le bilan de masse du constituant  $k$ , on a :  $\varphi = c_k$ ,  $\gamma = \pi_k$ ,  $\vec{\Gamma} = \rho \vec{J}_k$ , d'où :

$$\mathcal{A} \partial_t(\rho c_k) + (Q c_k + \rho \mathcal{A} J_k)' = \mathcal{A} \pi_k \quad (3.13)$$

$$\llbracket Q c_k + \rho \mathcal{A} J_k \rrbracket = 0 \quad (3.14)$$

avec

$$\mathcal{A} J_k = \int_{\Sigma(x)} \vec{J}_k \cdot \vec{t} d\mathcal{A} \quad (3.15)$$

Notons que dans les égalités (3.13) et (3.14), nous avons également admis, pour le constituant  $k$ , la condition d'étanchéité ( $\vec{v}_k \cdot \vec{n} = 0$ ) et l'uniformité de  $\pi_k$  dans  $\Sigma(x)$ .

### 1.2.3 Bilan de la quantité de mouvement

Nous avons :  $\vec{\varphi} = \vec{v}$ ,  $\vec{\gamma} = \rho \vec{g}$ ,  $\underline{\Gamma} = -\underline{\sigma}$ , et en écrivant  $\underline{\sigma}$  sous la forme :  $\underline{\sigma} = -p\underline{1} + \underline{\zeta}$ , il vient, après projection sur  $\vec{t}$  :

$$\mathcal{A}\partial_t(\rho v) + (Qv - \mathcal{A}\zeta)' + \mathcal{A}p' = \rho\mathcal{A}\mathcal{G} + L_\zeta\zeta_w \quad (3.16)$$

$$[[Qv - \mathcal{A}\zeta]] + [[\mathcal{A}p]] - p(y)[[\mathcal{A}]] = -\zeta_\ell(y)[[\mathcal{A}]] \quad (3.17)$$

avec

$$\mathcal{G} = \vec{g} \cdot \vec{t} \quad (3.18)$$

$$\mathcal{A}\zeta = \int_{\Sigma(x)} \underline{\zeta} \vec{t} \cdot \vec{t} d\mathcal{A}, \quad L_\zeta\zeta_w = \int_{\partial\Sigma(x)} \underline{\zeta} \vec{n} \cdot \vec{t} J_\ell d\ell, \quad \zeta_\ell[[\mathcal{A}]] = \int_{\Sigma_\ell(y)} \underline{\zeta} \vec{t} \cdot \vec{t} d\mathcal{A} \quad (3.19)$$

où  $L_\zeta$  désigne le périmètre mouillé par le fluide (périmètre hydraulique). Pour obtenir l'égalité (3.16), on a utilisé (3.7) et le fait que  $\vec{t} \cdot \vec{t}' = 0$ . La moyenne  $\zeta_w$  est telle que  $\zeta_w L_\zeta dx$  représente la composante tangentielle de la résultante des forces exercées par la paroi (par viscosité) sur le fluide contenu dans le tronçon  $[x, x + dx]$ . Notons que dans (3.16), nous avons négligé la contribution de  $\int_{\Sigma(x)} \underline{\zeta} \vec{t} \cdot \vec{t}' d\mathcal{A}$ .

La question maintenant est de savoir quelle valeur attribuer à la pression  $p(y)$  de l'équation (3.17). Lorsque  $v = 0$  (repos), l'égalité (3.17) se traduit par  $[[p]] = 0$ , on peut donc prendre  $p(y) = p^-$  ou  $p^+$ . En revanche, lorsque  $v \neq 0$ , on a certes une notion de compartiments de départ et d'arrivée puisque les vitesses  $v^-$  et  $v^+$  ont le même signe (la continuité de  $Q$  impose  $\mathcal{A}^- \rho^- v^- = \mathcal{A}^+ \rho^+ v^+$  et comme  $\mathcal{A}\rho > 0$ , les deux vitesses sont donc de même signe), mais la pression  $p(y)$  peut être quelconque ( $p^-$ ,  $p^+$  ou une moyenne). Comme expérimentalement l'épaisseur de la zone perturbée du compartiment de départ est beaucoup plus faible (voir nulle) que celle du compartiment d'arrivée et que c'est dans ce compartiment que se créent les fortes variations des grandeurs physiques, nous allons admettre que la pression  $p(y)$  est celle qui règne dans le compartiment de départ. Ainsi, si  $v > 0$ , on a  $p(y) = p^-$  et donc  $[[\mathcal{A}p]] - p(y)[[\mathcal{A}]] = \mathcal{A}^+ [[p]]$ . Si  $v < 0$ , on a  $p(y) = p^+$  et  $[[\mathcal{A}p]] - p(y)[[\mathcal{A}]] = \mathcal{A}^- [[p]]$ . On pose alors  $\epsilon(v) = \text{sgn}(v)$ , d'où  $[[\mathcal{A}p]] - p(y)[[\mathcal{A}]] = \mathcal{A}^{\epsilon(v)} [[p]]$ . Par conséquent, l'égalité (3.17) devient :

$$[[Qv - \mathcal{A}\zeta]] + \mathcal{A}^{\epsilon(v)} [[p]] = -\zeta_\ell(y)[[\mathcal{A}]] \quad (3.20)$$

### 1.2.4 Bilan de l'énergie totale

Nous avons :  $\varphi = e$ ,  $\gamma = \rho \vec{g} \cdot \vec{v}$  ( $r = 0$ ),  $\vec{\Gamma} = \vec{\Psi}_u - \underline{\sigma} \vec{v}$ , le vecteur  $\vec{\Psi}_u$  est celui donnée dans le premier chapitre par l'équation (1.44). En considérant une condition d'adhérence sur  $\partial\Sigma$  ( $\vec{v} = \vec{0}$ ) (ou en négligeant les contributions de  $\int_{\partial\Sigma(x)} \underline{\sigma} \vec{v} \cdot \vec{n} J_\ell d\ell$  et de  $\int_{\Sigma_\ell(y)} \underline{\sigma} \vec{v} \cdot \vec{t} d\mathcal{A}$ ), il vient :

$$\mathcal{A}\partial_t(\rho e) + (QH + \mathcal{A}(\Psi_u - v\zeta))' = \rho v\mathcal{A}\mathcal{G} + L_\psi\psi_w \quad (3.21)$$

$$[[QH + \mathcal{A}(\Psi_u - v\zeta)]] = \psi_\ell(y)[[\mathcal{A}]] \quad (3.22)$$

avec

$$H = h + v^2/2, \quad \Psi_u = \psi + \sum \rho J_k \partial_{c_k} h(p, T, C) \quad (3.23)$$

$$\mathcal{A}\psi = \int_{\Sigma(x)} \vec{\psi} \cdot \vec{t} d\mathcal{A}, \quad L_\psi\psi_w = - \int_{\partial\Sigma(x)} \vec{\psi} \cdot \vec{n} J_\ell d\ell, \quad \psi_\ell[[\mathcal{A}]] = \int_{\Sigma_\ell(y)} \vec{\psi} \cdot \vec{t} d\mathcal{A} \quad (3.24)$$

où  $L_\psi$  désigne le périmètre concerné par l'échange thermique avec l'extérieur. La moyenne  $\psi_w$  est telle que  $\psi_w L_\psi dx$  représente la puissance thermique que la paroi fournit au fluide contenu dans le tronçon  $[x, x + dx]$ .

### 1.2.5 Bilan de l'entropie

Nous avons :  $\varphi = s$ ,  $\gamma = \varpi/T$  ( $r = 0$ ),  $\vec{\Gamma} = \vec{\Psi}_s/T$ , la dissipation volumique  $\varpi$  et le vecteur  $\vec{\Psi}_s$  sont ceux donnés dans le premier chapitre par les équations respectivement (1.36) et (1.45). En développant les termes  $\underline{\zeta} : \underline{\nabla} \vec{v}$ ,  $\vec{\Psi}_s \cdot \vec{\nabla} T/T$  et  $\sum \rho \vec{J}_k \cdot \vec{\nabla} \mu_k^*$ , et en considérant une condition d'adhérence sur  $\partial\Sigma$ , il vient, sachant les relations (3.5) et (3.6) :

$$\begin{aligned} \mathcal{A} \partial_t(\rho s) + (Qs + \mathcal{A} \Psi_s/T)' &= -(T'/T^2) \mathcal{A} \Psi_s + (L_\psi \psi_w - v L_\zeta \zeta_w)/T \\ &+ \mathcal{A} \left( v' \zeta - \sum (\pi_k \mu_k^* + \rho J_k (\mu_k^*))' \right) / T \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\llbracket Qs + \mathcal{A} \Psi_s/T \rrbracket \geq (\psi_\ell(y)/T(y)) \llbracket \mathcal{A} \rrbracket \quad (3.26)$$

avec

$$\Psi_s = \psi + \sum \rho T (\partial_{c_k} s) J_k \quad (3.27)$$

où, pour le saut de section, nous n'avons retenu que le signe de  $\varpi$ .

### 1.2.6 Transformation des équations et hypothèses supplémentaires

À l'instar de l'équation générique (3.8), les équations (3.13), (3.16), (3.21) et (3.25) font intervenir des termes de la forme  $\mathcal{A} \partial_t(\rho \varphi) + (Q \varphi)'$  qui, en introduisant la vitesse particulière de  $\varphi$  ( $\dot{\varphi} = \varphi' v + \partial_t \varphi$ ) et sachant que  $\mathcal{A} \partial_t \rho = -Q'$  (égalité 3.11), peut se transformer en :  $\mathcal{A} \partial_t(\rho \varphi) + (Q \varphi)' = \mathcal{A} \rho \dot{\varphi}$ . L'application de cette transformation conduit, après quelques manipulations élémentaires, à la forme lagrangienne suivante :

$$\begin{aligned} \rho \dot{v} - (\mathcal{A} v)' / \mathcal{A} &= 0 \\ \rho \dot{c}_k + (\rho \mathcal{A} J_k)' / \mathcal{A} &= \pi_k \\ \rho \dot{v} + p' - (\mathcal{A} \zeta)' / \mathcal{A} &= \rho \mathcal{G} + (L_\zeta / \mathcal{A}) \zeta_w \\ \rho (\dot{u} + p \dot{v} - \sum (\partial_{c_k} h) \dot{c}_k) + (\mathcal{A} \psi)' / \mathcal{A} &= (L_\psi / \mathcal{A}) \psi_w - (L_\zeta / \mathcal{A}) v \zeta_w + v' \zeta - \varkappa \\ \rho T (\dot{s} - \sum (\partial_{c_k} s) \dot{c}_k) + (\mathcal{A} \psi)' / \mathcal{A} &= (L_\psi / \mathcal{A}) \psi_w - (L_\zeta / \mathcal{A}) v \zeta_w + v' \zeta - \varkappa \end{aligned} \quad (3.28)$$

avec

$$\nu = 1/\rho, \quad h = h(p, T, C), \quad \varkappa = \sum (\pi_k \partial_{c_k} h + \rho J_k (\partial_{c_k} h)') \quad (3.29)$$

Au niveau des sauts de section, et en développant les termes  $\Psi_u$  et  $\Psi_s$ , il vient, sachant la continuité de  $Q$  exprimée par l'égalité (3.12) :

$$\begin{aligned} \llbracket Q \rrbracket &= 0 \\ Q \llbracket c_k \rrbracket + \llbracket \rho \mathcal{A} J_k \rrbracket &= 0 \\ Q \llbracket v \rrbracket + \mathcal{A}^{\varepsilon(v)} \llbracket p \rrbracket - \llbracket \mathcal{A} \zeta \rrbracket &= -\zeta_\ell(y) \llbracket \mathcal{A} \rrbracket \\ Q \llbracket H \rrbracket + \llbracket \mathcal{A} \psi \rrbracket - \llbracket v \mathcal{A} \zeta - \sum \rho \mathcal{A} J_k \partial_{c_k} h \rrbracket &= \psi_\ell(y) \llbracket \mathcal{A} \rrbracket \\ Q \llbracket s \rrbracket + \llbracket \mathcal{A} \psi / T \rrbracket + \llbracket \sum \rho J_k \mathcal{A} \partial_{c_k} s \rrbracket &\geq (\psi_\ell(y)/T(y)) \llbracket \mathcal{A} \rrbracket \end{aligned} \quad (3.30)$$

La résolution des systèmes (3.28) et (3.30) suppose la connaissance, en plus des quantités  $\zeta_w$  et  $\psi_w$  résultant des interactions du fluide avec la paroi solide (on y reviendra à la fin de

la section), des inconnues secondaires  $I_s = \{\zeta; \pi_k; J_k; \psi\}$  en fonction des inconnues primaires du problème  $I_p = \{v; X; T; C\}$ ,  $X$  étant  $\nu$  ou  $p$  (voir chapitre 1, §2.4). Dans la pratique et en l'absence de réactions chimiques ( $\pi_k = 0$ ), nous pouvons nous contenter des lois simples suivantes :  $\zeta = \eta v'$ ,  $J_k = -D_k c'_k$  et  $\psi = -\lambda T'$  où  $\eta$ ,  $D_k$  et  $\lambda$  désignent respectivement un module de viscosité, un coefficient de diffusivité et une conductivité thermique. Toutefois, et malgré la simplicité de ces lois, leur introduction complique considérablement toute résolution numérique du problème à cause de l'existence à la fois des dérivées premières et des dérivées secondes. Comme, en outre, dans les problèmes de canalisation, les termes en dérivées secondes sont généralement négligés devant ceux faisant intervenir les dérivées premières, cela nous conduit donc à la formulation de l'hypothèse supplémentaire suivante : les contributions des inconnues secondaires sont négligeables. Il vient :

$$\begin{aligned} \rho \dot{v} - (\mathcal{A}v)' / \mathcal{A} &= 0 \\ \rho \dot{c}_k &= 0 \\ \rho \dot{v} + p' &= \rho \mathcal{G} + (L_\zeta / \mathcal{A}) \zeta_w \\ \rho(\dot{u} + p\dot{v}) &= (L_\psi / \mathcal{A}) \psi_w - (L_\zeta / \mathcal{A}) v \zeta_w \\ \rho T \dot{s} &= (L_\psi / \mathcal{A}) \psi_w - (L_\zeta / \mathcal{A}) v \zeta_w \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\llbracket Q \rrbracket = 0, \quad \llbracket c_k \rrbracket = 0, \quad Q \llbracket v \rrbracket + \mathcal{A}^{\epsilon(v)} \llbracket p \rrbracket = 0, \quad \llbracket H \rrbracket = 0, \quad Q \llbracket s \rrbracket \geq 0 \quad (3.32)$$

Remarquons par ailleurs que, dans (3.28) (ou dans 3.31), la soustraction des deux dernières équations donne :  $\dot{u} + p\dot{v} = T\dot{s} + \sum \mu_k^* \dot{c}_k$ , qui n'est autre que la relation de Gibbs selon le postulat de l'état local (voir chapitre 1, §2.2.2, équation 1.34) : ces deux équations différentielles sont donc équivalentes. Ceci n'est pas le cas au niveau d'un saut de section et nous pouvons nous demander à quoi sert alors la condition  $Q \llbracket s \rrbracket \geq 0$  sur l'entropie. Elle permet d'assurer l'unicité de la réponse en cas de solutions multiples. En effet, considérons une particule qui traverse le saut avec une vitesse positive (passage de  $\mathcal{A}^-$  à  $\mathcal{A}^+$ , cas auquel on peut toujours se ramener en changeant l'orientation de l'arc  $\mathcal{C}$ ) et qui voit son état thermodynamique ( $\nu, p, T, s, h, \dots$ ) passer de  $(-)$  à  $(+)$  théoriquement d'une manière instantanée et pratiquement dans le temps qu'il lui faut pour traverser la zone de perturbation. Indépendamment de toute cinétique de l'opération, la relation  $Tds = dh - \nu dp - \sum \mu_k^* dc_k$ , écrite en termes de la différentielle totale de  $s$  en tant que fonction des variables  $(h, p, C)$ , est toujours vérifiée et l'évaluation de son intégrale le long de tout trajet  $\mathcal{T}$  avec  $(h, p, C)$  variables ne dépend que de l'état de départ  $(h^-, p^-, C^-)$  et de l'état d'arrivée  $(h^+, p^+, C^+)$  et non du trajet lui-même. Les concentrations  $c_k$  étant continues, nous avons donc  $C^- = C^+ = C$  et par conséquent :  $Tds = dh - \nu dp$ . Si on se donne l'état de départ  $(h^-, p^-, C^-)$  et la vitesse  $v^-$ , les trois inconnues d'arrivée sont telles que :  $h^+(x) = h^- + Lx(1 - x/2)$ ,  $p^+(x) = p^- + Mx$  et  $v^+(x) = (1 - x)v^-$ , avec  $L = v^{-2}$ ,  $M = L/(\kappa\nu^-)$ ,  $\kappa = \mathcal{A}^+/\mathcal{A}^-$ , et où  $x < 1$  est la solution de l'équation  $\mathcal{E}(x) = \kappa(1 - x)\nu^- - \nu(h^+(x), p^+(x), C) = 0$  qui peut admettre plus qu'une solution. Désignons par  $x$  la solution recherchée pour l'équation  $\mathcal{E}(x) = 0$  et choisissons un trajet  $\mathcal{T}$  défini paramétriquement par :  $(h(y) = h^- + Ly(1 - y/2), p(y) = p^- + My, C(y) = C^-)$  avec  $y \in [0, x]$ , il vient, en posant  $\bar{T}(y) = T(h(y), p(y), C(y))$  :  $\llbracket s \rrbracket = \int_{\mathcal{T}} ds = M \int_0^x \mathcal{E}(y) / \bar{T}(y) dy$ . La solution  $x$  doit donc vérifier  $\mathcal{E}(x) = 0$  et la condition  $\int_0^x \mathcal{E}(y) / \bar{T}(y) dy \geq 0$ .

En plus des formes eulérienne et lagrangienne des équations de bilan, une troisième forme qui s'adapte bien à la résolution numérique et à la détermination des conditions aux limites : c'est la forme des caractéristiques. Dans le cas du problème simplifié (3.31), nous pouvons trouver cette forme en suivant le développement suivant. Tout d'abord, en choisissant un état

thermodynamique en termes des variables  $(\rho, s, C)$ , on peut écrire que :  $\dot{p} = a^2\dot{\rho} + \partial_s p \dot{s} + \sum \partial_{c_k} p \dot{c}_k$ , où  $a = \sqrt{\partial_\rho p(\rho, s, C)}$  est la vitesse du son. En remplaçant dans cette équation  $\dot{\rho}$ ,  $\dot{s}$  et  $\dot{c}_k$  par leurs expressions respectives données par (3.31), il vient :  $\dot{p} + \rho a^2 v' = \zeta$  avec  $\mathcal{A}\zeta = (L_\psi \psi_w - L_\zeta v \zeta_w) \partial_s p / (\rho T) - a^2 \rho v \mathcal{A}'$ . Ensuite, en multipliant l'équation relative au bilan de la quantité ( $\rho \dot{v} + p' = \sigma$ ) par  $\epsilon a$  (avec  $\epsilon = \pm 1$ ) et en l'ajoutant à la précédente, il vient :  $\dot{p} + \epsilon a p' + \epsilon \rho a (\dot{v} + \epsilon a v') = \zeta + \epsilon \sigma$ . Enfin, en posant, pour toute grandeur  $\varphi(x, t)$ ,  $D_\epsilon \varphi / Dt = \dot{\varphi} + \epsilon a \varphi'$  avec  $\epsilon = \pm 1, 0$ , on obtient :  $D_\epsilon p / Dt + \epsilon \rho a D_\epsilon v / Dt = \zeta + \epsilon \sigma$  où la dérivée  $D_\epsilon \varphi / Dt$  est telle que la variation de  $\varphi$ , le long de la courbe caractéristique définie dans le plans  $(x, t)$  par  $dx = (v + \epsilon a) dt$ , s'écrit :  $d\varphi = (D_\epsilon \varphi / Dt) dt$ . Sachant que  $\rho a^2 = \gamma p$  où  $\gamma$  est le coefficient isentropique, on aboutit alors au système différentiel suivant :

$$\begin{aligned} D_+ \ln p / Dt + (\gamma/a) D_+ v / Dt &= S_+ \\ D_- \ln p / Dt - (\gamma/a) D_- v / Dt &= S_- \\ D_0 s / Dt &= S_0 \\ D_0 c_k / Dt &= 0 \end{aligned} \quad (3.33)$$

avec

$$\begin{aligned} S_\epsilon &= \left( (L_\psi \psi_w - L_\zeta v \zeta_w) \partial_s p / (\rho T) - a^2 \rho v \mathcal{A}' + \epsilon (\rho \mathcal{A} \mathcal{G} + L_\zeta \zeta_w) \right) a / (\mathcal{A} p) \text{ pour } \epsilon = \pm 1 \\ S_0 &= (L_\psi \psi_w - L_\zeta v \zeta_w) / (\rho \mathcal{A} T) \end{aligned} \quad (3.34)$$

Revenons maintenant aux quantités  $\zeta_w$  et  $\psi_w$ . Elles sont généralement fournies par des lois empiriques. Concernant  $\zeta_w$ , elle peut s'exprimer sous la forme  $\zeta_w = -C_f \rho v |v| / 2$  où  $C_f$  est un coefficient de frottement pariétal. Quant à la puissance thermique  $\psi_w = -\int_{\partial \Sigma} \vec{\psi} \cdot \vec{n} dl / L_\psi$ , elle fait intervenir le flux  $\vec{\psi}$  traversant la paroi qui est le plus souvent exprimé à l'aide de la loi de Newton en tant que fonction de l'écart entre la température à la surface du solide  $T_w$  et la température moyenne du fluide :  $\vec{\psi} \cdot \vec{n} = \hbar (T - T_w)$ . Le coefficient d'échange  $\hbar$  est généralement calculé à partir du nombre de Nusselt  $Nu$ , de la conductivité thermique du fluide  $\lambda$  et d'un diamètre thermique  $D_T = 4\mathcal{A} / L_\psi$  par la formule :  $\hbar = \lambda Nu / D_T$ .

Dans la littérature (voir par exemple Kaviany [99], Kakac and Yener [100]), il existe de nombreuses relations empiriques donnant  $C_f$  et  $Nu$  en fonction du nombre de Reynolds  $Re = \rho v D_H / \eta$  et du nombre de Prandtl  $Pr = \eta C_p / \lambda$  où  $\eta$  et  $C_p$  sont respectivement la viscosité dynamique et la capacité thermique massique à pression constante du fluide,  $D_H = 4\mathcal{A} / L_\zeta$  est le diamètre hydraulique.

### 1.3 Conditions initiales - conditions aux limites

La formulation eulérienne du système simplifié (3.31) peut être énoncée sous la forme mathématique générale suivante :

$$\partial_t \vec{X}(x, t) + \left( \vec{Y}(x; \vec{X}) \right)' = \vec{Z}(x, t; \vec{X}) \quad (3.35)$$

avec

$$\begin{aligned} \vec{X}(x, t) &= \mathcal{A} \rho (v, 1, u + v^2/2, C)^T \\ \vec{Y}(x; \vec{X}) &= \mathcal{A} \rho (\nu p + v^2, v, \nu h + v^3/2, vC)^T \\ \vec{Z}(x, t; \vec{X}) &= (p \mathcal{A}' + \rho \mathcal{A} \mathcal{G} + L_\zeta \zeta_w, 0, \rho v \mathcal{A} \mathcal{G} + L_\psi \psi_w, 0)^T \end{aligned} \quad (3.36)$$

où on a choisi pour l'équation de l'énergie celle correspondant au bilan de l'énergie totale<sup>1</sup>. Le vecteur  $\vec{X} \in \mathbb{R}^{q+2}$  représente les inconnues du problème (fonctions de  $x$  et de  $t$ ), et dès

1. Il est possible d'utiliser le bilan de l'entropie mais à condition de l'exprimer, au niveau des sauts de section, sous la forme  $\llbracket H \rrbracket = 0$ .

qu'il est connu, on peut déterminer, puisque la fonction  $\mathcal{A}(x)$  est une donnée, les variables  $(v, \rho, u, c_k)$  comme suit :  $v = X_1/X_2$ ,  $\rho = X_2/\mathcal{A}$ ,  $u = X_3/X_2 - (X_1/X_2)^2/2$ ,  $c_k = X_{k+3}/X_2$ . Or le triplet  $(\rho, u, C)$  peut caractériser parfaitement l'état thermodynamique du fluide et par conséquent toutes les autres grandeurs  $(p, s, T, \dots)$  se trouvent déterminées. Le vecteur  $\vec{Y}$  est un vecteur "flux" fonction de  $x$  via  $\mathcal{A}(x)$  et de  $\vec{X}$ , la pression  $p$  et l'enthalpie  $h$  étant des fonctions de l'état thermodynamique défini par  $(\rho, u, C)$ . Quant au second membre  $\vec{Z}$ , il est fonction de  $(x, t)$  et de  $\vec{X}$ ; sa dépendance du temps vient du fait que les lois empiriques qui fournissent  $L_\zeta \tau_w$  et  $L_\psi \varphi_w$  sont fonctions, non seulement de  $x$  et de  $\vec{X}$ , mais également de  $t$  via des données externes.

L'égalité (3.36) peut être regardée d'abord par rapport au temps  $t \geq 0$  et l'on comprend alors (il suffit d'imaginer un  $\vec{Y}$  homogène) que les données initiales ( $t = 0$ ) doivent nous fournir, en tout point  $x \in [0, L]$ , le vecteur  $\vec{X}$  ou toutes autres données permettant de le retrouver.

En ce qui concerne le caractère différentiel dans l'espace, les équations de continuité en un point  $x_0$  arbitrairement fixé à l'intérieur du domaine  $x \in ]0, L[$  peuvent se regrouper dans l'égalité suivante :  $[\vec{Y}] = (p(x_0)[\mathcal{A}], 0, 0, 0)^T$  que nous pouvons retrouver avec la même technique que celle utilisée au niveau d'un saut de section. Pour pouvoir étendre cette équation aux extrémités  $x = 0$  et  $x = L$ , nous allons alors admettre l'existence d'une "action" extérieure, représentée par  $\vec{Y}_E$ , telle que  $\vec{Y}_E(x_0) - \vec{Y}(x_0; \vec{X}_I) = (p(x_0)(\mathcal{A}_E - \mathcal{A}_I), 0, 0, 0)^T$ , l'indice I et E désignent respectivement l'intérieur et l'extérieur du domaine. Le choix de  $p(x_0)$  obéit à la même logique que pour un saut de section, c'est le compartiment de départ qui l'impose :  $p = p_E$  si  $Q > 0$  (injection) et  $p = p_I$  si  $Q < 0$  (soutirage). Donc  $p(x_0)$  n'est pas toujours fournie par l'extérieur. Plus généralement, le vecteur  $\vec{Y}_E$  n'est pas forcément une donnée. Il se peut que certaines de ses composantes soient des inconnues du problème selon le signe de  $v$ . Afin de connaître les conditions aux limites à imposer aux extrémités, l'idéal est de considérer les courbes caractéristiques dans le plan  $(x, t)$  : si une caractéristique ne permet pas de joindre le point actuel  $(x, t)$  à un point quelconque de coordonnées  $(x \in [0, L], t^* < t)$ , cela implique que les informations manquantes à la résolution du problème ne peuvent venir que de l'extérieur du domaine.

## 2 Le modèle cavité

On s'intéresse à une cavité de stockage dans une formation saline ( $\sigma$ ) et on suppose que le massif salin autour de la cavité est formé, à l'échelle de l'élément de volume représentatif, d'un mélange inerte d'insolubles solides et de halite constituée uniquement de cristaux de chlorure de sodium (NaCl).

La cavité est ainsi formée de 3 phases (figure 3.2) : le fluide stocké ( $\gamma$ ), une saumure liquide ( $\beta$ ) et des insolubles solides ( $\iota$ ). Les phases fluides  $\gamma$  et  $\beta$  peuvent être réactifs et multiconstituants. La phase  $\iota$  est supposée monoconstituant, inerte et son apport massique ne provient que de la formation saline  $\sigma$ . La phase  $\beta$  contient, en plus du sel (s) et l'eau (w), des constituants dissous dont certains peuvent faire l'objet d'échange interfacial avec la phase  $\gamma$ . Nous admettons de plus que le sel n'est présent que dans la phase  $\beta$ .

Ces trois phases sont non miscibles et chacune d'elles occupe un domaine distinct  $\Omega_\alpha$  tel que  $\Omega(t) = \cup_\alpha \Omega_\alpha(t)$  où  $\Omega(t)$  est le domaine de la cavité à l'instant  $t$  de frontière  $\partial\Omega(t)$  régulière sur laquelle on définit une normale unitaire extérieure  $\vec{n}$  et un champ de vitesse  $\vec{w}$  tel que



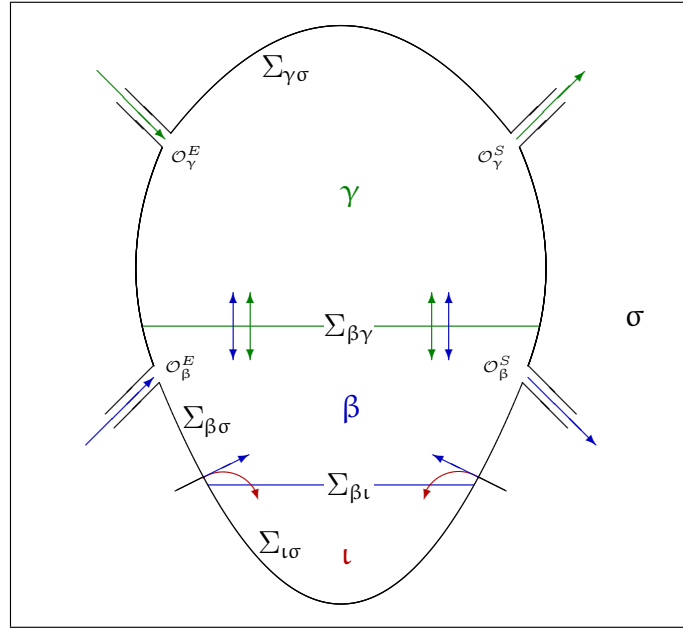


Figure 3.2: Représentation schématique d'une cavité saline de stockage (les flèches indiquent les échanges de matière qui peuvent avoir lieu).

$d\mathcal{V}/dt = \int_{\partial\Omega} \vec{\omega} \cdot \vec{n} d\mathcal{A}$  où  $d\mathcal{V}/dt$  est le taux de variation du volume  $\mathcal{V}$  de  $\Omega$ . La frontière  $\partial\Omega_\alpha(t)$  est composée d'une partie principale  $\Sigma_{\alpha\sigma}(t)$  en contact avec la formation rocheuse  $\sigma$ , de quelques orifices fixes ( $\vec{\omega} \cdot \vec{n} = 0$ )  $\mathcal{O}_\alpha$  servant aux échanges de matière avec l'extérieur, et des interfaces  $\Sigma_{\alpha\lambda}(t)$  avec les autres phases  $\lambda$  :  $\partial\Omega_\alpha(t) = \mathcal{O}_\alpha \cup \left( \bigcup_{\lambda \neq \alpha} \Sigma_{\alpha\lambda}(t) \right)$ . Nous admettons, qu'à tout instant  $t$ , les aires des orifices  $\mathcal{O}_\alpha$  sont négligeables devant l'aire de  $\Sigma_{\alpha\sigma}(t)$  et que nous avons :  $\mathcal{O}_\alpha = \mathcal{O}_\alpha^E \cup \mathcal{O}_\alpha^S$  où  $\mathcal{O}_\alpha^E$  et  $\mathcal{O}_\alpha^S$  désignent les orifices correspondant respectivement à l'entrée (exposant E) et à la sortie (exposant S) de la phase  $\alpha$ .

La frontière  $\partial\Omega_\alpha(t)$ , sur laquelle on définit aussi une normale unitaire extérieure  $\vec{n}_\alpha$ , se déplace à la vitesse  $\vec{\omega}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha$  tel que :

$$\vec{\omega}_\beta \cdot \vec{n}_\beta = -\vec{\omega}_\gamma \cdot \vec{n}_\gamma = \vec{v}_{\beta\gamma} \cdot \vec{n}_\beta \quad \text{sur } \Sigma_{\beta\gamma}, \quad \vec{\omega}_\beta \cdot \vec{n}_\beta = -\vec{\omega}_l \cdot \vec{n}_l = \vec{v}_{\beta l} \cdot \vec{n}_\beta \quad \text{sur } \Sigma_{\beta l} \quad (3.37)$$

où  $\vec{v}_{\beta\lambda}$  est la vitesse de l'interface  $\Sigma_{\beta\lambda}(t)$ .

En ce qui concerne l'échange de matière entre les phases, nous nous limitons, non seulement par souci de simplicité mais également pour des considérations pratiques du problème industriel, aux échanges d'une part entre  $\gamma$  et  $\beta$ , et d'autre part entre  $\beta$  et  $\sigma$ . Ce dernier échange est considéré par la condition suivante :

$$\rho_\beta (\vec{v}_\beta - \vec{\omega}_\beta) \cdot \vec{n}_\beta = \rho_{s\beta} (\vec{v}_{s\beta} - \vec{\omega}_\beta) \cdot \vec{n}_\beta \quad (3.38)$$

qui traduit le fait que le massif salin fournit du sel à la cavité tout en restant imperméable aux autres constituants de la phase  $\beta$  ( $\rho_{k\beta} (\vec{v}_{k\beta} - \vec{\omega}_\beta) \cdot \vec{n}_\beta = 0$  pour  $k \neq s$ ), où  $\rho_{k\beta}$  et  $\vec{v}_{k\beta}$  sont respectivement la masse volumique et la vitesse du constituant  $k$  dans la phase  $\beta$ . Notons par ailleurs que nous ne considérons pas le phénomène de recristallisation et nous admettons que la concentration  $c_{s\beta}$  du sel dans la saumure vérifie à tout instant :  $c_{s\beta} \leq c_{s\beta}^{sat}$  où  $c_{s\beta}^{sat}$  est la concentration à saturation.

Pour une grandeur globale  $\Phi_\alpha(t) = \int_{\Omega_\alpha} \rho_\alpha \varphi_\alpha d\mathcal{V}$ , de densité massique  $\varphi_\alpha$ , associée à la matière contenue à l'instant  $t$  dans le domaine  $\Omega_\alpha$ , son taux de variation peut être exprimé sous la

forme (voir chapitre 1) :

$$d\Phi_\alpha/dt = \int_{\Omega_\alpha} \gamma_\alpha d\mathcal{V} - \int_{\partial\Omega_\alpha} \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A}, \quad \vec{\phi}_\alpha = \vec{\Gamma}_\alpha + \rho_\alpha \varphi_\alpha (\vec{v}_\alpha - \vec{\omega}_\alpha) \quad (3.39)$$

À laquelle nous ajoutons, à chaque interface  $\Sigma_{\alpha\lambda}$ , la relation de saut :

$$\vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha + \vec{\phi}_\lambda \cdot \vec{n}_\lambda = 0 \quad (3.40)$$

Nous allons appliquer ces relations aux bilans de la masse et de l'énergie en supposant, à tout instant  $t$ , que la matière contenue dans  $\Omega_\alpha$  est au repos et que son état thermodynamique est uniforme. Ces hypothèses simplifient la modélisation en ramenant le problème de départ (grandeurs fonctions de  $\vec{x} \in \Omega$  et du temps  $t$ ) à un problème fonction uniquement du temps (0D dans l'espace) où il s'agit de déterminer le triplet  $(p_\alpha, T_\alpha, C_\alpha)$  pour chaque phase  $\alpha$ . Cette manière d'opérer, si elle n'est pas totalement satisfaisante, reste néanmoins cohérente avec une modélisation globale de la cavité dont les données externes ( les échanges massiques et thermiques avec les puits qui l'alimentent, le flux thermique globale échangé avec le massif salin et le déplacement de sa frontière) ne sont éventuellement connues qu'à l'échelle de la cavité entière.

Le fait d'admettre artificiellement une vitesse nulle dans  $\Omega_\alpha$  ne signifie pas forcément absence d'échange avec l'extérieur ; nous admettons seulement que dans  $\Omega_\alpha(t)$  les vitesses sont presque partout nulles sauf sur une faible zone au voisinage de  $\partial\Omega_\alpha(t)$ .

Afin d'alléger les écritures, on utilisera, dans la suite, la notation  $\dot{\Phi}_\alpha$  plutôt que  $d\Phi_\alpha/dt$ .

## 2.1 Bilan de la masse

Considérons tout d'abord la masse  $\mathcal{M}_{k\alpha}(t) = \int_{\Omega_\alpha} \rho_\alpha c_{k\alpha} d\mathcal{V}$  d'un constituant  $k$  dans l'une des deux phases fluides ( $\gamma$  ou  $\beta$ ). Dans ce cas, nous avons :

$$\vec{\phi}_\alpha = \rho_{k\alpha} (\vec{v}_{k\alpha} - \vec{\omega}_\alpha) \quad (3.41)$$

où  $\rho_{k\alpha} = \rho_\alpha c_{k\alpha}$ . Le taux de variation de la masse  $\mathcal{M}_{k\alpha}$  peut s'écrire donc sous la forme :

$$\dot{\mathcal{M}}_{k\alpha} = \pi_{k\alpha} \mathcal{V}_\alpha + Q_{k\alpha} + \hat{\pi}_{k\alpha} \quad (3.42)$$

avec

$$Q_{k\alpha} = - \int_{\mathcal{O}_\alpha} \rho_{k\alpha} \vec{v}_{k\alpha} \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A} \quad (3.43)$$

$$\hat{\pi}_{k\gamma} = -\hat{\pi}_{k\beta} = - \int_{\Sigma_{\beta\gamma}} \rho_{k\gamma} (\vec{v}_{k\gamma} - \vec{\omega}_\gamma) \cdot \vec{n}_\gamma d\mathcal{A} \quad (k \neq s), \quad \hat{\pi}_{s\beta} = - \int_{\Sigma_{\beta\sigma}} \rho_{s\beta} (\vec{v}_{s\beta} - \vec{\omega}_\beta) \cdot \vec{n}_\beta d\mathcal{A} \quad (3.44)$$

où  $\mathcal{V}_\alpha(t)$  est le volume de  $\Omega_\alpha$ . En sommant par rapport à  $k$  et en admettant que  $\sum \pi_{k\alpha} = 0$ , il en résulte, sachant que  $\sum \mathcal{M}_{k\alpha} = \mathcal{M}_\alpha$  :

$$\dot{\mathcal{M}}_\alpha = Q_\alpha + \hat{\pi}_\alpha \quad (3.45)$$

avec

$$Q_\alpha = \sum Q_{k\alpha} = - \int_{\mathcal{O}_\alpha} \rho_\alpha \vec{v}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A} \quad (3.46)$$

$$\hat{\pi}_\gamma = \sum \hat{\pi}_{k\gamma} = - \int_{\Sigma_{\beta\gamma}} \rho_\gamma (\vec{v}_\gamma - \vec{\omega}_\gamma) \cdot \vec{n}_\gamma d\mathcal{A}, \quad \hat{\pi}_\beta = -\hat{\pi}_\gamma + \hat{\pi}_{s\beta} \quad (3.47)$$



En écrivant que  $\mathcal{M}_{k\alpha} = c_{k\alpha}\mathcal{M}_\alpha$ , il vient alors :

$$\mathcal{M}_\alpha \dot{c}_{k\alpha} = \pi_{k\alpha} \mathcal{V}_\alpha + Q_{k\alpha} - c_{k\alpha} Q_\alpha + \hat{\pi}_{k\alpha} - c_{k\alpha} \hat{\pi}_\alpha \quad (3.48)$$

Concernant la phase  $\iota$ , le massif salin n'étant pas nécessairement pur, la production d'un débit  $\hat{\pi}_{s\beta}$  est éventuellement accompagnée d'une production d'insolubles telle que :

$$\dot{\mathcal{M}}_\iota = \frac{i}{(1-i)} \hat{\pi}_{s\beta} \quad (3.49)$$

où  $i$  est la fraction massique (constante) d'insolubles contenue dans le volume élémentaire rocheux.

## 2.2 Bilan de l'énergie totale

Pour les deux phases fluides  $\gamma$  et  $\beta$ , le taux de variation de l'énergie totale  $\mathcal{E}_\alpha(t) = \int_{\Omega_\alpha} \rho_\alpha e_\alpha d\mathcal{V}$  peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\dot{\mathcal{E}}_\alpha = - \int_{\mathcal{O}_\alpha} \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A} - \int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A} + \hat{\phi}_\alpha \quad (3.50)$$

avec

$$\vec{\phi}_\alpha = \vec{\psi}_\alpha - \underline{\zeta}_\alpha \vec{v}_\alpha + p_\alpha \vec{\omega}_\alpha + \vec{a}_\alpha, \quad \vec{a}_\alpha = \sum \rho_{k\alpha} (\bar{H}_{k\alpha} \vec{v}_{k\alpha} - H_\alpha \vec{\omega}_\alpha), \quad H_\alpha = e_\alpha + p_\alpha \nu_\alpha \quad (3.51)$$

$$\bar{H}_{k\alpha} = H_\alpha + \partial_{c_{k\alpha}} h_\alpha - \sum c_{j\alpha} \partial_{c_{j\alpha}} h_\alpha \quad (3.52)$$

$$\hat{\phi}_\gamma = - \int_{\Sigma_{\beta\gamma}} \vec{\phi}_\gamma \cdot \vec{n}_\gamma d\mathcal{A}, \quad \hat{\phi}_\beta = -\hat{\phi}_\gamma - \hat{\phi}_\iota, \quad \hat{\phi}_\iota = - \int_{\Sigma_{\beta\iota}} \vec{\phi}_\iota \cdot \vec{n}_\iota d\mathcal{A} \quad (3.53)$$

Ceci posé, nous allons, par la suite, expliciter chaque terme de l'équation (3.50), sauf le dernier dont le développement n'est pas nécessaire.

Commençons pour cela par le terme  $\dot{\mathcal{E}}_\alpha$ . La vitesse dans  $\Omega_\alpha$  étant supposée nulle, il en résulte que :  $\mathcal{E}_\alpha = \mathcal{M}_\alpha u_\alpha$ . Si on introduit l'enthalpie  $h_\alpha = u_\alpha + p_\alpha \nu_\alpha$  avec  $\nu_\alpha = \mathcal{V}_\alpha / \mathcal{M}_\alpha$ , on obtient alors, en considérant le bilan de masse (3.45) :

$$\dot{\mathcal{E}}_\alpha = \mathcal{M}_\alpha (\dot{h}_\alpha - \nu_\alpha \dot{p}_\alpha) - p_\alpha \dot{\mathcal{V}}_\alpha + h_\alpha Q_\alpha + h_\alpha \hat{\pi}_\alpha \quad (3.54)$$

avec  $\dot{\mathcal{V}}_\alpha = \int_{\partial\Omega_\alpha} \vec{\omega}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A}$ . En combinant cette égalité avec l'expression de  $\dot{h}_\alpha(p_\alpha, T_\alpha, C_\alpha)$  en termes de  $(\dot{p}_\alpha, \dot{T}_\alpha, \dot{c}_{k\alpha})$ , il vient, sachant (3.48) :

$$\dot{\mathcal{E}}_\alpha = \mathcal{M}_\alpha (C_{p\alpha} \dot{T}_\alpha - \nu_\alpha T_\alpha A_{p\alpha} \dot{p}_\alpha) - p_\alpha \dot{\mathcal{V}}_\alpha + \sum (Q_{k\alpha} + \hat{\pi}_{k\alpha}) \bar{h}_{k\alpha} + \mathcal{V}_\alpha \sum \pi_{k\alpha} \partial_{c_{k\alpha}} h_\alpha \quad (3.55)$$

avec  $\bar{h}_{k\alpha} = h_\alpha + \partial_{c_{k\alpha}} h_\alpha - \sum c_{j\alpha} \partial_{c_{j\alpha}} h_\alpha$ ,  $C_{p\alpha} = \partial_T h_\alpha(p_\alpha, T_\alpha, C_\alpha)$  et  $A_{p\alpha} = \partial_T \nu_\alpha(p_\alpha, T_\alpha, C_\alpha) / \nu_\alpha$ .

Concernant l'intégrale dans (3.50) portant sur  $\mathcal{O}_\alpha$ , sachant que  $\vec{\omega}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha = 0$ , et en négligeant la contribution de  $\vec{\psi}_\alpha$  et de  $\underline{\zeta}_\alpha$  devant les autres termes, il vient :

$$- \int_{\mathcal{O}_\alpha} \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A} = - \int_{\mathcal{O}_\alpha} \vec{a}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A} \quad (3.56)$$

En décomposant le débit  $Q_{k\alpha}$  en débit entrant et débit sortant :  $Q_{k\alpha} = Q_{k\alpha}^E + Q_{k\alpha}^S$ , et en admettant que l'état thermodynamique de la matière sortante de  $\Omega_\alpha$  est celle de la matière qui est en place dans la cavité, il vient :

$$- \int_{\mathcal{O}_\alpha} \vec{a}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A} = \sum (Q_{k\alpha}^E \bar{H}_{k\alpha}^E + Q_{k\alpha}^S \bar{h}_{k\alpha}) \quad (3.57)$$

Quant à l'intégrale portant sur  $\Sigma_{\alpha\sigma}$ , en vertu de l'hypothèse d'imperméabilité du massif salin aux constituants  $k \neq s$ , nous pouvons alors exprimer, dans un premier temps, l'intégrale  $-\int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} \vec{a}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A}$  sous la forme suivante :

$$-\int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} \vec{a}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A} = \hat{\pi}_{s\alpha} h_{s\sigma} \quad (3.58)$$

où  $h_{s\sigma} = h_{s\sigma}(p_\beta, T_\beta)$  est l'enthalpie massique du sel cristallin supposé sous la même pression  $p_\alpha$  et la même température  $T_\alpha$  que la phase  $\beta$ . En effet, l'imperméabilité du massif salin aux constituants de la phase  $\gamma$  se traduit par  $\int_{\Sigma_{\gamma\sigma}} \vec{a}_\gamma \cdot \vec{n}_\gamma d\mathcal{A} = 0$ , d'où l'égalité (3.58) avec  $\hat{\pi}_{s\gamma} = 0$ <sup>1</sup>. En revanche, pour la phase  $\beta$ , l'égalité (3.58) n'est pas immédiate et nécessite une explication. D'après l'égalité (3.38), en admettant que  $H_\beta = h_\beta$  sur  $\Sigma_{\beta\sigma}$ , nous pouvons tout d'abord écrire que  $\vec{a}_\beta = \bar{h}_{s\beta} \rho_{s\beta} (\vec{v}_{s\beta} - \vec{\omega}_\beta)$ . Or, d'après la relation d'Euler (voir chapitre 1, §1), on a :  $\mathcal{H}_\beta(p_\beta, T_\beta, \mathcal{M}_1 \dots, \mathcal{M}_{s\beta}, \dots, \mathcal{M}_{q\beta}) = \mathcal{M}_{s\beta} \bar{h}_{s\beta} + \sum_{k \neq s} \mathcal{M}_{k\beta} \bar{h}_{k\beta}$ , ce qui fait apparaître les grandeurs  $\bar{h}_{k\beta}$  comme les contributions des constituants  $k$  à l'enthalpie totale du mélange. Lorsque  $-\rho_{s\beta} (\vec{v}_{s\beta} - \vec{\omega}_\beta) \cdot \vec{n}_\beta \geq 0$ , la grandeur partielle  $\bar{h}_{s\beta}$  doit être fournie par le massif salin qui est formé par du sel cristallin en simple contact avec des insolubles solides. L'additivité de l'enthalpie nous permet alors de rapprocher le terme  $\bar{h}_{s\beta} = \partial_{\mathcal{M}_{s\beta}} \mathcal{H}_\beta$  à l'enthalpie massique du sel cristallin  $h_{s\sigma}$ ; sa dépendance par rapport à  $p_\beta$  et  $T_\beta$  n'est qu'une hypothèse dont la justification à l'échelle de la cavité n'est pas aussi évidente que celle relative à un système thermodynamique homogène formé d'une saumure en équilibre thermodynamique (égalité des potentiels chimiques du sel) avec le sel cristallin.

En utilisant (3.58), l'intégrale dans (3.50) portant sur  $\Sigma_{\alpha\sigma}$  peut se mettre sous la forme :

$$-\int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} \vec{\phi}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A} = -\int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} (\vec{\psi}_\alpha - \underline{\zeta}_\alpha \vec{v}_\alpha) \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A} - p_\alpha \int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} \vec{u}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A} + \hat{\pi}_{s\alpha} h_{s\sigma} \quad (3.59)$$

Ainsi, et au vu de toutes les précédentes considérations, le bilan de l'énergie totale pour les deux phases fluides  $\gamma$  et  $\beta$  peut finalement s'exprimer sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_\alpha (C_{p\alpha} \dot{T}_\alpha - \nu_\alpha T_\alpha A_{p\alpha} \dot{p}_\alpha) &= p_\alpha \left( \dot{\mathcal{V}}_\alpha - \int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} \vec{u}_\alpha \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A} \right) + \sum Q_{k\alpha}^E (\bar{H}_{k\alpha}^E - \bar{h}_{k\alpha}) \\ &- \sum \hat{\pi}_{k\alpha} \bar{h}_{k\alpha} + \hat{\pi}_{s\alpha} h_{s\sigma} - \mathcal{V}_\alpha \sum \pi_{k\alpha} \partial_{c_{k\alpha}} h_\alpha - \int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} (\vec{\psi}_\alpha - \underline{\zeta}_\alpha \vec{v}_\alpha) \cdot \vec{n}_\alpha d\mathcal{A} + \hat{\phi}_\alpha \end{aligned} \quad (3.60)$$

Dans le cas d'une cavité pleine de saumure (il y a seulement la phase  $\beta$ ), sans réaction chimique ( $\pi_{k\beta} = 0$ ), sous pression constante et n'échangeant avec l'extérieur, pendant le temps  $dt$ , qu'une masse de sel  $d\mathcal{M}_{s\beta} = \hat{\pi}_{s\beta} dt$ , le bilan (3.60) se simplifie fortement pour donner :  $\mathcal{M}_\beta C_{p\beta} dT = -(\bar{h}_{s\beta} - h_{s\sigma}) d\mathcal{M}_{s\beta}$ . La quantité  $\bar{h}_{s\beta} - h_{s\sigma}$  n'est autre que la chaleur partielle de dissolution par unité de masse. Nous pouvons procéder de la même façon pour montrer que la chaleur latente de changement de phase (passage de  $\gamma$  à  $\beta$ ) d'une petite masse  $d\mathcal{M}_{j\gamma} = \hat{\pi}_{j\gamma} dt$  d'un constituant  $j$ , dans une cavité remplie par les deux phases  $\gamma$  et  $\beta$ , est de la forme  $\bar{h}_{j\beta} - \bar{h}_{j\gamma}$  tel que :  $(\mathcal{M}_\gamma C_{p\gamma} + \mathcal{M}_\beta C_{p\beta}) dT = (\bar{h}_{j\beta} - \bar{h}_{j\gamma}) d\mathcal{M}_{j\gamma}$ .

Concernant la phase solide  $\iota$ , nous allons admettre qu'elle se comporte comme une phase fluide avec un état thermodynamique caractérisé par une pression  $p_\iota$  et une température  $T_\iota$ . Cette modélisation est certes très simplifiée, mais elle n'est pas dénuée d'intérêt pratique et demeure cohérente avec la modélisation globale proposée et qui s'appuie sur une représentation schématique de la cavité en trois domaines séparés sachant que, dans pratique, les

1. Contrairement aux autres constituants, le constituant  $s$  est donc tel que  $\hat{\pi}_{s\gamma} \neq -\hat{\pi}_{s\beta}$ .

insolubles sont immergés dans la saumure, sous forme de blocs de dimensions et de morphologies très variées, et ne forment pas forcément un domaine à part entière.

Par conséquent, et compte tenu des hypothèses formulées dès le départ, le bilan de l'énergie de la phase  $\iota$  devient :

$$\mathcal{M}_\iota(C_{p\iota}\dot{T}_\iota - \nu_\iota T_\iota A_{p\iota}\dot{p}_\iota) = p_\iota(\dot{\mathcal{V}}_\iota - \int_{\Sigma_{\iota\sigma}} \vec{u}_\iota \cdot \vec{n}_\iota d\mathcal{A}) - \int_{\Sigma_{\iota\sigma}} (\vec{\psi}_\iota - \underline{\zeta}_\iota \vec{v}_\iota) \cdot \vec{n}_\iota d\mathcal{A} + \hat{\phi}_\iota \quad (3.61)$$

où  $\hat{\phi}_\iota$  est le terme qui caractérise, d'une manière globale, les échanges thermiques entre les deux phases  $\iota$  et  $\beta$ .

### 2.3 Hypothèse supplémentaire et système d'équation

Malgré les nombreuses hypothèses simplificatrices déjà formulées, le problème de détermination de l'état thermodynamique de chaque phase  $\alpha$  reste entier puisque, comme le montre les équations (3.60) et (3.61), nous avons des intégrales de surfaces, portant sur les interfaces  $\Sigma_{\alpha\lambda}$ , qui ne représentent, pour chaque phase  $\alpha$ , que les flux de chaleur échangés entre  $\alpha$  et son extérieur (les autres phases et la partie du massif en contact avec  $\alpha$  à l'instant  $t$ ). Or, comme nous l'avons indiqué plus haut, nous ne disposons que des données à l'échelle de la cavité entière (les échanges avec les puits, le flux thermique global échangé avec le massif salin et son volume). Par conséquent, la détermination des grandeurs partielles associées à chaque phase ne peut se faire qu'à travers la formulation empirique de lois d'interfaces assurant la fermeture du problème. Cette démarche reste toutefois complexe et constitue un formalisme lourd dont la validation *in situ* et/ou au laboratoire, pour l'instant du moins, est difficile, voire hors de portée. Nous sommes donc, en vertu de ces considérations, conduits à ajouter des hypothèses simplificatrices supplémentaires : nous allons admettre la même pression et la même température dans tous les domaines  $\Omega_\alpha$  :  $p_\alpha = p$ ,  $T_\alpha = T$ .

En sommant par rapport à  $\alpha$ , il en résulte donc le système d'équation suivant :

$$\begin{pmatrix} \sum (\mathcal{M}_\alpha \nu_\alpha A_{p\alpha}) & - \sum (\mathcal{M}_\alpha \nu_\alpha B_{T\alpha}) \\ \sum (\mathcal{M}_\alpha C_{p\alpha}) & - \sum (\mathcal{M}_\alpha \nu_\alpha A_{p\alpha} T) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{T} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{\mathcal{V}} - \sum_\alpha \sum_k \bar{\nu}_{k\alpha} \dot{\mathcal{M}}_{k\alpha} \\ \Psi + \hat{\Psi} + \Psi_E + \Psi_C \end{pmatrix} \quad (3.62)$$

avec

$$\begin{aligned} \Psi &= - \int_{\partial\Omega} \vec{\psi} \cdot \vec{n} d\mathcal{A}, \quad \hat{\Psi} = - \hat{\pi}_{s\beta} (\bar{h}_{s\beta} - h_{s\sigma}) + \sum \hat{\pi}_{k\gamma} (\bar{h}_{k\beta} - \bar{h}_{k\gamma}) \\ \Psi_E &= \sum Q_{k\gamma}^E (\bar{H}_{k\gamma}^E - \bar{h}_{k\gamma}) + \sum Q_{k\beta}^E (\bar{H}_{k\beta}^E - \bar{h}_{k\beta}), \quad \Psi_C = - \sum_\alpha \sum_k \nu_\alpha \mathcal{M}_\alpha \pi_{k\alpha} \partial_{c_{k\alpha}} h_\alpha \end{aligned} \quad (3.63)$$

où nous avons négligé la contribution des  $\underline{\zeta}_\alpha$ , et tenu compte du fait que  $\dot{\mathcal{V}} = \int_{\partial\Omega} \vec{\omega} \cdot \vec{n} d\mathcal{A}$  et que  $\sum \hat{\phi}_\alpha = 0$ . La première équation de ce système correspond à l'additivité des volumes  $\mathcal{V}_\alpha$  :  $\mathcal{V} = \sum \mathcal{V}_\alpha$ . La quantité  $\Psi$  représente la puissance thermique totale échangée entre la cavité et le massif salin.

En l'absence de réactions chimiques ( $\pi_{k\alpha} = 0$ ), la résolution du système (3.62), en termes du couple  $(p, T)$ , nécessite la connaissance, non seulement des grandeurs fournies par le massif salin et des puits, mais aussi des quantités  $\hat{\pi}_{k\alpha}$  résultant des échanges de masse d'une part au sein même de la cavité entre les deux phases fluides  $\gamma$  et  $\beta$ , et d'autre part entre la cavité et le massif salin. Ces quantités peuvent être soit fournies par des lois empiriques permettant de modéliser la cinétique des transferts de masses en fonction de l'état thermodynamique

globale de la cavité, soit calculées par la relation (3.48), exprimant le bilan de masse de chaque constituant  $k$ , en supposant l'équilibre thermodynamique instantanée (égalité des potentiels chimiques) permettant de calculer, à chaque instant, les concentrations massiques  $c_{k\alpha}$ . Dans le cas du sel, le fait de se limiter à la dissolution impose à  $\hat{\pi}_{s\beta}$  de vérifier, en plus de l'équation (3.48), la condition  $\hat{\pi}_{s\beta} \geq 0$ .

# Chapitre 4

## La congélation artificielle des terrains

---

Ce chapitre portera sur la modélisation thermo-hydraulique de la congélation artificielle des terrains et s'appuie directement sur Rouabhi et al. [5] et Rouabhi and Tijani [101]. Cette modélisation est d'autant plus complexe que, dans de nombreux cas réels, elle se situe dans des contextes hydro-géologiques où les écoulements peuvent être importants et/ou le fluide saturant a une concentration en sel non négligeable.

Actuellement, j'assure l'encadrement de la thèse de Hafssa Tounsi qui a pour objectif l'étude des effets mécaniques de la congélation sur les ouvrages qui traversent les zones congelées ou situées dans le voisinage. Il s'agit particulièrement d'élaborer un modèle de comportement mécanique, basé sur des essais de laboratoire, capable de prédire, dans une large gamme de température, les contraintes résultant de la congélation d'un terrain saturé en eau et les répercussions sur les mouvements enregistrés au niveau des ouvrages (Tounsi et al. [102]). Cette thèse constitue la suite de la thèse de Manon Vitel [103] dont j'ai assuré l'encadrement, et qui n'intégrait que les aspects thermo-hydrauliques (Vitel et al. [98, 104, 105]). Ces deux thèses, en collaboration avec Orano, ont pour applications les mines d'uranium de Cigar Lake et de McArthur River au Canada.

Dans ce chapitre, j'aborderai la modélisation de la congélation artificielle des terrains sous l'angle usuel de la mécanique des milieux poreux en utilisant une approche macroscopique basée sur l'équilibre thermodynamique (thermique, mécanique et chimique) de l'interface entre la glace et la phase liquide. Il s'agit d'une approche où les surfaces de discontinuités (fronts de gel) entre les phases ne sont pas modélisées explicitement mais obtenues indirectement par l'analyse rétrospective des résultats en termes de degré de saturation.

Il est structuré de la manière suivante. Après avoir examiné la mise en équation du problème dans le terrain, j'aborde le problème thermodynamique lié au changement de phase, en essayant, non seulement de proposer une démarche rigoureuse et thermodynamiquement cohérente, mais encore et surtout de discerner et de discuter les aspects les plus essentiels quant aux applications en géotechnique. Je décris ensuite la mise en équation du problème dans les puits de congélation et une méthodologie de couplage permettant de rendre interdépendants les mécanismes d'échanges thermiques puits/terrains. Je ne vais pas trop m'étendre sur le couplage puits/terrains mais il est essentiel de garder à l'esprit l'importance de sa prise en compte, ne serait-ce qu'à l'échelle d'un seul puits, lors de l'étude de l'optimisation des conditions opératoires (température et débit d'injection du fluide frigoporteur, dimensions des tubes, injection par le tube central ou par le tube annulaire...); l'article de Vitel et al. [98] donne plus de détails sur ce sujet. Un exemple de dimensionnement d'une barrière étanche sera aussi discuté. Il a pour objectif de montrer l'effet de la vitesse d'écoulement et de la salinité sur le développement de la barrière.

Ce chapitre utilise principalement les résultats du premier chapitre et le modèle puits du troisième chapitre.

## 1 Introduction

La congélation artificielle des terrains est utilisée depuis maintenant des décennies comme technique de stabilisation et d'imperméabilisation temporaires des terrains pour résoudre des problèmes de génie civil ou de génie minier à moindre coût. Toutefois, l'utilisation de cette technique nécessite la maîtrise du processus de congélation et l'utilisation d'outils numériques permettant de prédire d'une part l'évolution des parties congelées et d'autre part la stabilité des ouvrages miniers et les mouvements des terrains. Dans le cas d'une exploitation minière où il s'agit de congeler de très grands volumes de terrains, dont certains très argileux, saturés en eau, cette prédiction doit répondre aux enjeux principaux de la mine : exploiter le gisement (créer des galeries, des cavités minières. . .) en conditions favorables et sur de longues durées en évitant tout risque lié aux écoulements d'eau et aux instabilités mécaniques.

La technique de congélation se réalise bien souvent par la circulation forcée, en circuit fermé, d'un fluide frigoporteur dans un système composé, dans sa partie souterraine, de tubes dans un forage pétrolier : le fluide frigoporteur circule dans les tubes, absorbe la chaleur du terrain et retourne, à travers le circuit de distribution, à l'usine de congélation.

Notre intérêt portera uniquement sur la structure souterraine et on qualifiera de puits de congélation le système tel qu'il est illustré schématiquement par la figure 4.1 : deux tubes concentriques formant un espace central et un espace annulaire permettant au fluide frigoporteur de descendre et de remonter dans le puits dont une partie est en contact avec le terrain à congeler. L'imperméabilisation de toute une zone se fait alors par l'emplacement adéquat d'un réseau de puits de congélation dont les caractéristiques techniques et les performances peuvent être optimisées par le recours à des méthodes de calcul numériques permettant des prédictions précises des phénomènes qui se produisent lors de la congélation. Bien entendu, la qualité des prédictions de telles méthodes dépend non seulement de la bonne connaissance de la géologie du site et des lois de comportement des terrains en place, mais aussi du nombre de phénomènes pris en compte dans la modélisation. Ces phénomènes sont d'autant plus complexes à décrire que lorsque, d'une part, le terrain à congeler se situe dans un contexte hydro-géologique où les écoulements peuvent être importants, et d'autre part, lorsque l'eau à congeler présente une salinité non négligeable.

Dans de telles situations, la prise en compte du fort couplage entre l'hydraulique, la thermique et la salinité de l'eau devient indispensable. Le couplage avec la mécanique est certainement important, puisqu'il est bien connu que le gel artificiel ou même naturel peut provoquer une augmentation de volume des sols. Mais nous le négligeons dans ce travail car, compte tenu de nos connaissances actuelles, son influence sur la prédiction de l'étendue des zones congelées reste limitée.

Le transfert thermique entre le terrain et le fluide frigoporteur est influencé par l'écoulement hydraulique dans le terrain principalement à cause de la convection forcée due à l'écoulement. L'influence de la thermique sur l'hydraulique est, quant à elle, évidente, surtout lorsqu'on conçoit les zones du terrain qui sont congelées comme des zones où il n'y a plus de circulation d'eau suite à la diminution, par congélation, de la partie de l'espace poreux occupée par la phase liquide.

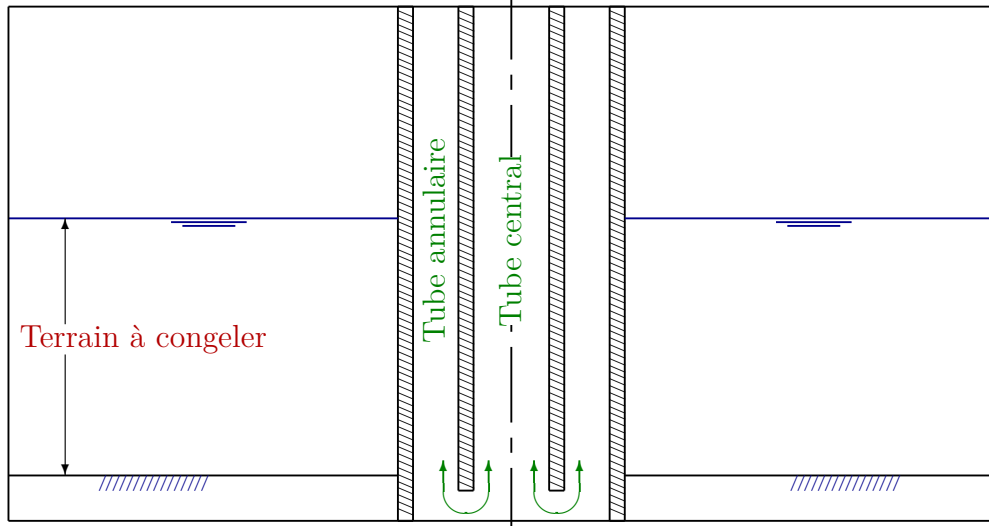


Figure 4.1: Schéma de principe d'un puits de congélation

## 2 Mise en équation du problème dans le terrain

Le terrain à congeler peut être considéré comme un milieu poreux constitué par un squelette solide ( $\sigma$ ) englobant des espaces vides dans lesquels peut circuler une phase liquide ( $\lambda$ ). On se limitera à une saumure constituée du Chlorure de Sodium ( $s$ ) en solution dans l'eau pure liquide ( $w$ ). Le changement de phase qui nous intéresse correspond au passage de l'eau de l'état liquide à l'état solide. La glace formée est traitée à part en tant qu'une phase  $\gamma$  dont le seul constituant est l'eau. On admet que cette phase reste toujours solidaire de la phase solide (même mouvement) et qu'elle se comporte comme une phase fluide avec un état thermodynamique caractérisé par une pression et une température. Nous admettons en plus que tous les constituants ont la même température.

### 2.1 Bilan de la masse

La phase liquide n'est formée que des deux constituants  $w$  et  $s$ , nous n'avons donc besoin que d'une seule concentration massique et d'une seule vitesse de diffusion. Cela nous conduit à simplifier les notations introduites au premier chapitre et poser :  $\vec{V} = \vec{V}^\lambda$ ,  $\vec{J} = \vec{J}_s^\lambda$  et  $c = c_{s\lambda}$ .

En l'absence de réaction chimique, les bilans de masse des phases  $\lambda$  et  $\gamma$  peuvent s'écrire respectivement sous la forme :

$$\dot{\rho}^\lambda + \vec{\nabla} \cdot (\rho_\lambda \vec{V}) = -\hat{\pi}^\gamma \quad (4.1)$$

$$\dot{\rho}^\gamma = \hat{\pi}^\gamma \quad (4.2)$$

où  $\rho^\alpha = n_\alpha \rho_\alpha$  est la masse volumique apparente ( $\rho_\alpha$  est la masse volumique de la phase  $\alpha$  et  $n_\alpha$  est la fraction du volume élémentaire qu'elle occupe), et  $\hat{\pi}^\gamma$  est l'apport de masse à la phase  $\gamma$  par changement de phase. En sommant (4.1) et (4.2), le terme  $\hat{\pi}^\gamma$  disparaît, et on obtient le bilan de masse des deux phases  $\lambda$  et  $\gamma$  :

$$\dot{\rho}^\lambda + \dot{\rho}^\gamma + \vec{\nabla} \cdot (\rho_\lambda \vec{V}) = 0 \quad (4.3)$$

Le bilan de masse du sel peut, quant à lui, s'écrire sous la forme :

$$\rho^\lambda \dot{c} + \rho_\lambda \vec{V} \cdot \vec{\nabla} c + \vec{\nabla} \cdot (\rho_\lambda \vec{J}) = \hat{\pi}^\gamma c \quad (4.4)$$

Le second terme de cette équation a la signification physique suivante : pour un système à concentration homogène ( $\vec{\nabla} c$  et  $\vec{J}$  nuls), le changement de phase fait varier la concentration du sel dans la phase liquide. En effet, il est facile de voir que, dans ce cas, l'accroissement de  $c$  est dû à la création de masse de la phase  $\gamma$  :  $\rho^\lambda dc = cd\rho^\gamma$ .

## 2.2 Bilan de la quantité de mouvement

Nous ne considérons ici que l'équation de l'équilibre mécanique à l'interface  $\lambda\gamma$ . À l'échelle microscopique, la différence de pression entre les deux phases peut être exprimée par l'équation de Laplace (voir chapitre 1) qui fait intervenir, en plus de la tension de surface, la courbure moyenne de l'interface. À l'échelle macroscopique, on ne garde généralement de cette équation que l'existence d'une relation entre la différence de pression et les autres variables d'état, en particulier les fractions volumiques des deux phases ou, d'une manière équivalente, les degrés de saturation  $S_\alpha = n_\alpha/n$ , où  $n = 1 - n_\sigma$  est la porosité du milieu. Dans le cas qui nous intéresse, une telle relation peut alors se mettre sous la forme :

$$S_\lambda = \mathcal{S}(p_c = p_\gamma - p_\lambda, T) \quad (4.5)$$

où  $S_\lambda$  est le degré de saturation en phase liquide,  $p_\lambda$  et  $p_\gamma$  sont les pressions des phases  $\lambda$  et  $\gamma$ ,  $p_c$  est la pression capillaire,  $T$  est la température et  $\mathcal{S}$  est une fonction empirique déduite d'essais de laboratoire. En utilisant une fonction  $\mathcal{S}$  et non une loi incrémentale nous admettons que la détermination de  $\mathcal{S}$  est indépendante du type d'essais (congélation ou décongélation). Cette hypothèse est similaire à celle généralement utilisée pour la modélisation du phénomène de séchage-mouillage dans les milieux poreux contenant une phase liquide et une phase gazeuse.

Notons que ce n'est toujours pas évident d'obtenir expérimentalement la fonction  $\mathcal{S}$  car cela suppose en particulier des techniques de mesure pointues de la teneur en phase liquide. Un palliatif consiste alors à déterminer  $\mathcal{S}$  comme solution d'un problème inverse avec un calage de la réponse du modèle complet sur les résultats d'essais de laboratoire (Rouabhi et al. [5]) et/ou des mesures *in situ* (Vitel et al. [104]).

## 2.3 Bilan de l'énergie

En partant de l'égalité (1.162) établie dans le premier chapitre, nous pouvons aboutir à l'équation de la chaleur suivante :

$$\rho C_p \dot{T} + \rho_\lambda C_{p\lambda} \vec{V} \cdot \vec{\nabla} T = -\vec{\nabla} \cdot \vec{\psi} - \hat{\pi}^\gamma \Delta \bar{h}_w \quad (4.6)$$

où  $\rho C_p$  est la capacité thermique moyenne donnée par (1.163) et  $\Delta \bar{h}_w = \bar{h}_{w\gamma} - \bar{h}_{w\lambda}$  est la chaleur latente de changement de phase qui sera définie au paragraphe 2.4.1.

## 2.4 Synthèse des équations de bilan et fermeture du problème

Les inconnues du problème sont des fonctions scalaires ou vectorielles de l'espace-temps  $(\vec{x}, t)$ . En supposant que la porosité  $n$ , la masse volumique  $\rho_\sigma$  et la capacité thermique  $C_\sigma$  du squelette sont connues, le problème thermo-hydraulique a 10 inconnues scalaires  $(T, p_\lambda, p_\gamma, c, \rho_\lambda, \rho_\gamma, \Delta \bar{h}_w, C_{p\lambda}, C_{p\gamma}, \hat{\pi}^\gamma)$  et 3 inconnues vectorielles  $(\vec{V}, \vec{J}, \vec{\psi})$ . Nous disposons



déjà des 4 équations suivantes :

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho}^\gamma &= \hat{\pi}^\gamma \\
 \dot{\rho}^\lambda + \dot{\rho}^\gamma + \vec{\nabla} \cdot (\rho_\lambda \vec{V}) &= 0 \\
 \rho^\lambda \dot{c} - c \dot{\rho}^\gamma + \rho_\lambda \vec{V} \cdot \vec{\nabla} c + \vec{\nabla} \cdot (\rho_\lambda \vec{J}) &= 0 \\
 \rho C_p \dot{T} + \Delta \bar{h}_w \dot{\rho}^\gamma + \rho_\lambda C_{p\lambda} \vec{V} \cdot \vec{\nabla} T + \vec{\nabla} \cdot \vec{\psi} &= 0
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

avec

$$S_\lambda = \mathcal{S}(p_\gamma - p_\lambda, T), \quad \rho^\lambda = n S_\lambda \rho_\lambda, \quad \rho^\gamma = n(1 - S_\lambda) \rho_\gamma, \quad \rho C_p = \rho^\sigma C_\sigma + \sum \rho^\alpha C_{p\alpha} \tag{4.8}$$

Pour compléter ce système, nous devons introduire d'un côté les lois d'état (5 équations scalaires) reliant  $(\rho_\lambda, \rho_\gamma, \Delta \bar{h}_w, C_{p\lambda}, C_{p\gamma})$  à l'état thermodynamique  $(T, p_\lambda, p_\gamma, c)$ , et d'un autre côté des lois complémentaires qui doivent nous fournir 3 équations vectorielles concernant les inconnues  $(\vec{V}, \vec{J}, \vec{\psi})$  et 1 équation scalaire relative à  $\hat{\pi}^\gamma$ .

### 2.4.1 Lois d'état

Pour la phase solide  $\sigma$ , on suppose que  $\rho_\sigma$  et  $C_\sigma$  sont des constantes. Pour les deux autres phases  $\alpha \in \{\lambda, \gamma\}$ , l'état thermodynamique est décrit par  $(p_\alpha, T, c)$  et le potentiel thermodynamique est l'enthalpie libre massique  $g_\alpha(p_\alpha, T, c)$ . Évidemment  $g_\gamma$  est indépendante de la concentration  $c$ .

Les autres fonctions d'état de la phase  $\alpha$  (grandeurs massiques : volume  $\nu_\alpha = 1/\rho_\alpha$ , capacité thermique  $C_{p\alpha}$ , entropie  $s_\alpha$ , enthalpie  $h_\alpha$ ...) se déduisent du potentiel  $g_\alpha$  par les relations suivantes :

$$\nu_\alpha = 1/\rho_\alpha = \partial_{p_\alpha} g_\alpha, \quad C_{p\alpha} = -T \partial_T^2 g_\alpha, \quad s_\alpha = -\partial_T g_\alpha, \quad h_\alpha = g_\alpha - T \partial_T g_\alpha \tag{4.9}$$

Ces équations nous montrent clairement que les fonctions d'état ne sont pas indépendantes. Elles doivent vérifier des conditions de compatibilité comme par exemple  $T \partial_T^2 \nu_\alpha + \partial_{p_\alpha} C_{p\alpha} = 0$ . Par ailleurs, si nous fixons un état de référence  $(p_{0\alpha}, T_0)$ , la connaissance des fonctions  $\nu_\alpha(p_\alpha, T, c)$ ,  $C_{p0\alpha}(T, c) = C_{p\alpha}(p_{0\alpha}, T, c)$ ,  $s_{0\alpha}(c) = s_\alpha(p_{0\alpha}, T_0, c)$  et  $h_{0\alpha}(c) = h_\alpha(p_{0\alpha}, T_0, c)$  permet celle de  $g_\alpha(p_\alpha, T, c)$ . Il suffit en effet d'intégrer les deux premières équations données par (4.9) :

$$g_\alpha(p_\alpha, T, c) = h_{0\alpha}(c) - s_{0\alpha}(c)T + \int_{p_{0\alpha}}^{p_\alpha} \nu_\alpha(x, T, c) dx + \int_{T_{0\alpha}}^T (1 - T/x) C_{p0\alpha}(x, c) dx \tag{4.10}$$

Pour une concentration  $c$  fixée, les paramètres  $h_{0\alpha}(c)$  et  $s_{0\alpha}(c)$  sont des constantes d'intégration qui ne jouent aucun rôle dans la mise en équations du problème général thermo-hydraulique tant que les deux phases n'échangent pas de matière. Mais en cas d'échange de masse, les interactions entre les phases  $\lambda$  et  $\gamma$  sont régies par des lois qui font intervenir des différences de fonctions d'état relatives au constituant  $w$  dans les deux phases. Nous introduisons alors les notations suivantes pour toute grandeur  $\varphi_\alpha(p_\alpha, T, c)$  avec  $\alpha \in \{\lambda, \gamma\}$  et sachant que  $\partial_c \varphi_\gamma = 0$  :

$$\begin{aligned}
 \bar{\varphi}_{w\alpha}(p_\alpha, T, c) &= \varphi_\alpha(p_\alpha, T, c) - c \partial_c \varphi_\alpha(p_\alpha, T, c) \\
 \Delta \bar{\varphi}_w(p_\lambda, p_\gamma, T, c) &= \bar{\varphi}_{w\gamma}(p_\gamma, T) - \bar{\varphi}_{w\lambda}(p_\lambda, T, c)
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

Lorsque  $p_\lambda = p_\gamma = p$ , au lieu de  $\Delta \bar{\varphi}_w(p, p, T, c)$ , on note  $\Delta \bar{\varphi}_w(p, T, c)$ . L'opérateur qui à  $\varphi_\alpha$  associe  $\bar{\varphi}_{w\alpha}$  est linéaire et commute avec les opérateurs de dérivation et d'intégration par

rapport à  $p_\alpha$  et  $T$ . Donc, en appliquant cet opérateur à l'équation (4.10), il vient :

$$\bar{g}_{w\alpha}(p_\alpha, T, c) = \bar{h}_{0w\alpha}(c) - \bar{s}_{0w\alpha}(c)T + \int_{p_{0\alpha}}^{p_\alpha} \bar{v}_{w\alpha}(x, T, c)dx + \int_{T_{0\alpha}}^T (1 - T/x)\bar{C}_{p_{0w\alpha}}(x, c)dx \quad (4.12)$$

La modélisation de l'interaction des deux phases fait intervenir la différence  $\Delta\bar{g}_w$  des potentiels chimiques  $\bar{g}_{w\alpha}$  du constituant commun  $w$  ainsi que la chaleur latente de changement de phase  $\Delta\bar{h}_w = \Delta\bar{g}_w - T\partial_T\Delta\bar{g}_w$ . Nous avons donc besoin des fonctions  $\Delta\bar{h}_{0w}(c)$  et  $\Delta\bar{s}_{0w}(c)$ .

### 2.4.2 Lois complémentaires

Les lois complémentaires donnant les vecteurs  $\vec{V}$  (mouvement relatif du liquide par rapport au solide),  $\vec{J}$  (mouvement relatif du sel par rapport au liquide) et  $\vec{\psi}$  (transport de chaleur par conduction) sont exprimées par des relations analogues aux lois respectivement de Darcy, de Fick et de Fourier (voir chapitre 1) :

$$\vec{V} = -\frac{\underline{K}_\lambda}{\eta_\lambda}(\vec{\nabla}p_\lambda - \rho_\lambda\vec{g}), \quad \vec{J} = -\underline{D}_\lambda\vec{\nabla}c, \quad \vec{\psi} = -\underline{\Lambda}\vec{\nabla}T \quad (4.13)$$

Le mouvement relatif de la phase liquide par rapport à la phase solide est régi par une loi d'écoulement dans un milieu poreux qui utilise la viscosité dynamique  $\eta_\lambda$  du fluide et le tenseur de perméabilité intrinsèque  $\underline{K}_\lambda$  caractérisant le vide poreux occupé par la phase  $\lambda$ . La phase  $\lambda$  est une solution dans laquelle le soluté a un mouvement relatif dont la vitesse dépend du gradient de la concentration via le tenseur de diffusivité  $\underline{D}_\lambda$ . La conduction de la chaleur, quant à elle, concerne tout le milieu poreux avec un tenseur global de conductivité thermique  $\underline{\Lambda}$ .

Les trois tenseurs  $\underline{K}_\lambda$ ,  $\underline{D}_\lambda$  et  $\underline{\Lambda}$ , généralement symétriques et définis positifs, sont, non seulement fonctions de la température, et éventuellement de la pression et de la concentration, mais également des degrés de saturation. En particulier, afin de traduire le fait que la phase liquide est freinée dans son mouvement par la présence dans les pores de la phase glace, on admet généralement que  $\underline{K}_\lambda$  obéit à une loi empirique sous la forme du produit d'une perméabilité intrinsèque du milieu poreux  $\underline{K}$  et d'une quantité scalaire  $k_r$ , perméabilité relative de la phase  $\lambda$ , fonction du degré de saturation :

$$\underline{K}_\lambda = k_r(S_\lambda)\underline{K} \quad (4.14)$$

Concernant le terme  $\hat{\pi}^\gamma$  résultant des échanges de masse à l'interface  $\lambda\gamma$ , nous pouvons utiliser, à l'instar des réactions chimiques, une cinétique de passage d'une masse de la phase  $\lambda$  à la phase  $\gamma$  qui serait régie par la différence des potentiels chimiques. Nous avons cependant opté pour l'hypothèse habituellement utilisée en modélisation du séchage-mouillage des sols en admettant que le changement de phase de l'eau s'effectue instantanément et sans dissipation. Cet équilibre chimique entre les deux phases se traduit par une relation entre les variables d'état  $(p_\lambda, p_\gamma, T, c)$  qui exprime l'égalité des potentiels chimiques de l'eau :

$$\Delta\bar{g}_w(p_\lambda, p_\gamma, T, c) = 0 \quad (4.15)$$

## 2.5 Thermodynamique du changement de phase

La coexistence des deux phases  $\lambda$  et  $\gamma$  peut avoir lieu avec des pressions  $p_\lambda$  et  $p_\gamma$  quelconques. Lorsque l'interface entre les deux phases est assez grande, la surface de contact est plane

et la pression est continue à travers l'interface. En revanche, lorsque l'interface est réduite (c'est généralement le cas à l'intérieur des pores d'un sol), l'effet de la tension de surface devient important et l'équilibre mécanique conduit à une interface courbe avec des pressions différentes.

En l'absence de capillarité ( $p_\lambda = p_\gamma = p$ ) et en supposant l'équilibre chimique, l'égalité des potentiels chimiques de l'eau (4.15) permet de relier les variables  $p$ ,  $T$  et  $c$  par une relation qui limite l'état thermodynamique à la connaissance de deux de ces trois variables. En particulier, si on fixe  $T$  et  $c$ , la pression  $p$  devient une fonction connue  $p = p_{\lambda\gamma}(T, c)$  dont la fonction réciproque, pour une composition  $c$  fixée, est notée  $T = T_{\lambda\gamma}(p, c)$ . Les deux fonctions  $p_{\lambda\gamma}(T, c)$  et  $T_{\lambda\gamma}(p, c)$  vérifient les conditions :

$$\forall(T, c) : \Delta\bar{g}_w(p_{\lambda\gamma}(T, c), T, c) = 0, \quad \forall(p, c) : \Delta\bar{g}_w(p, T_{\lambda\gamma}(p, c), c) = 0 \quad (4.16)$$

Comme l'état de référence est arbitraire pour les deux phases, nous pouvons alors le choisir dans le domaine des états d'équilibre chimique :

$$p_{0\lambda} = p_{0\gamma} = p_0 \text{ et } T_{0\lambda} = T_{0\gamma} = T_{\lambda\gamma}(p_0, c) = T_0(c) \quad (4.17)$$

L'équation 4.12 devient alors :

$$\begin{aligned} \bar{g}_{w\alpha}(p_\alpha, T, c) = & \bar{g}_{0w\alpha}(c) - (T - T_0(c))\bar{s}_{0w\alpha}(c) + \int_{p_0}^{p_\alpha} \bar{\nu}_{w\alpha}(x, T, c)dx \\ & + \int_{T_0(c)}^T (1 - T/x)\bar{C}_{p_0w\alpha}(x, c)dx \end{aligned} \quad (4.18)$$

Par conséquent, les conditions d'équilibre chimique à l'état de référence ( $p = p_0$ ) et à l'état tel que  $p_\alpha = p_{\lambda\gamma}(T, c)$  conduisent à l'égalité :

$$(T_0(c) - T)\Delta\bar{s}_{0w}(c) + \int_{p_0}^{p_{\lambda\gamma}(T, c)} \Delta\bar{\nu}_w(x, T, c)dx + \int_{T_0(c)}^T (1 - T/x)\Delta\bar{C}_{p_0w}(x, c)dx = 0 \quad (4.19)$$

Ceci permet d'exprimer, en toute généralité, les conditions de cohérence entre les différentes fonctions empiriques  $\nu$ ,  $C_{p0}$  et  $p_{\lambda\gamma}$ . Alors que pour chaque phase isolée nous n'avons pas besoin des paramètres d'intégration  $s_{0\alpha}$ , lorsque les deux phases échangent de la matière, il devient en revanche nécessaire de connaître la fonction  $\Delta\bar{s}_{0w}(c)$ . L'égalité (4.19) est donc un moyen pour construire la fonction  $\Delta\bar{s}_{0w}(c)$  à partir des fonctions  $\nu_\gamma(p_\gamma, T)$ ,  $C_{p_0\gamma}(T)$ ,  $\nu_\lambda(p_\lambda, T, c)$ ,  $C_{p_0\lambda}(T, c)$  et  $p_{\lambda\gamma}(T, c)$  à condition que ces 5 fonctions vérifient le fait que la grandeur  $\Delta\bar{s}_{0w}$  ainsi calculée ne dépend que de  $c$ .

En présence de capillarité ( $p_\lambda \neq p_\gamma$ ), il suffit de récrire l'équation (4.18) sous la forme :

$$\bar{g}_{w\alpha}(p_\alpha, T, c) = \bar{g}_{w\alpha}(p_{\lambda\gamma}(T, c), T, c) + \int_{p_{\lambda\gamma}(T, c)}^{p_\alpha} \bar{\nu}_{w\alpha}(x, T, c)dx \quad (4.20)$$

Les deux conditions d'équilibre chimique  $\Delta\bar{g}_w(p_{\lambda\gamma}(T, c), T, c) = 0$  et  $\Delta\bar{g}_w(p_\lambda, p_\gamma, T, c) = 0$  conduisent alors à une condition sur  $p_\gamma$  pour le triplet  $(p_\lambda, T, c)$  fixé :

$$\forall(p_\lambda, T, c) : \int_{p_{\lambda\gamma}}^{p_\gamma} \nu_\gamma(x, T)dx = \int_{p_{\lambda\gamma}}^{p_\lambda} \bar{\nu}_{w\lambda}(x, T, c)dx \quad (4.21)$$

L'égalité (4.21) nous permet d'exprimer la pression capillaire  $p_c = p_\gamma - p_\lambda$  en fonction de  $(p_\lambda, T, c)$ . En effet :  $\nu_\gamma > 0$  donc la fonction  $\vartheta(p_\gamma) = \int_{p_{\lambda\gamma}}^{p_\gamma} \nu_\gamma(x, T)dx$  est strictement croissante. Elle est donc inversible. D'où :  $p_c(p_\lambda, T, c) = \vartheta^{-1}\left(\int_{p_{\lambda\gamma}}^{p_\lambda} \bar{\nu}_{w\lambda}(x, T, c)dx\right) - p_\lambda$ .

Par ailleurs, compte tenu du fait que  $\Delta\bar{g}_w = 0$ , la chaleur latente de changement de phase (passage de  $\lambda$  à  $\gamma$ )  $\Delta\bar{h}_w$  dans l'équation (4.6) devient :  $\Delta\bar{h}_w = T\Delta\bar{s}_w$ . En dérivant l'équation (4.20) par rapport à  $T$ , on obtient :

$$\bar{s}_{w\alpha}(p_\alpha, T, c) = \bar{s}_{w\alpha}(p_{\lambda\gamma}(T, c), T, c) - \int_{p_{\lambda\gamma}(T, c)}^{p_\alpha} \partial_T \bar{\nu}_{w\alpha}(x, T, c) dx \quad (4.22)$$

En posant  $L_{\lambda\gamma}(T, c) = \Delta\bar{h}_w(p_{\lambda\gamma}(T, c), T, c)$ , il vient :

$$\Delta\bar{h}_w(p_\lambda, p_\gamma, T, c) = L_{\lambda\gamma}(T, c) + \int_{p_{\lambda\gamma}(T, c)}^{p_\lambda} T \partial_T \bar{\nu}_{w\lambda}(x, T, c) dx - \int_{p_{\lambda\gamma}(T, c)}^{p_\gamma} T \partial_T \nu_\gamma(x, T) dx \quad (4.23)$$

La fonction d'état  $L_{\lambda\gamma}(T, c) = T\Delta\bar{s}_w(p_{\lambda\gamma}(T, c), T, c)$  est la chaleur latente de passage de  $\lambda$  à  $\gamma$  pour un état d'équilibre chimique tel que  $p_\lambda = p_\gamma = p_{\lambda\gamma}(T, c)$ . En dérivant par rapport à  $T$  l'égalité  $\Delta\bar{g}_w(p_{\lambda\gamma}(T, c), T, c) = 0$ , on obtient la généralisation de la relation de Clapeyron :

$$L_{\lambda\gamma}(T, c) = T\Delta\bar{\nu}_w(p_{\lambda\gamma}, T, c) \partial_T p_{\lambda\gamma}(T, c) \quad (4.24)$$

## 2.6 Lois d'état simplifiées

Les équations qui viennent d'être passées en revue permettent, d'un point de vue théorique, d'avoir toutes les fonctions nécessaires à la résolution de notre problème, et ce d'une manière thermodynamiquement cohérente. Toutefois, ceci est réalisé dans un formalisme mathématique difficilement utilisable en pratique dans des codes de calcul traitant les équations de bilan. En effet, la fonction  $g_\alpha(p_\alpha, T, c)$  représentant correctement le comportement réel d'un fluide  $\alpha$  dans une gamme assez large de variation de son état thermodynamique peut utiliser des formules trop compliquées (c'est le cas par exemple de l'eau (Wagner and Pruf [90], Feistel and Wagner [106]), et faire appel, à chaque nœud du maillage et à chaque pas d'intégration, à une telle fonction et à ses dérivées par rapport à  $(p_\alpha, T, c)$  et jusqu'à l'ordre 2 pour  $T$  est inutilement trop consommateur de temps de calcul. Afin d'aboutir à un formalisme analytique explicite, il est alors essentiel d'apporter des hypothèses qui, tout en gardant une certaine cohérence thermodynamique, permettent de simplifier la formulation mathématique.

C'est ce que nous nous proposons de faire dans ce qui suit en nous basant d'un côté sur la loi de la glace (l'enthalpie libre  $g_\gamma$  en fonction de  $p_\gamma$  et  $T$ ) proposée par Feistel and Wagner [106] concernant la glace ordinaire Ih (la forme la plus intéressante dans les applications en géotechnique), et d'un autre côté sur la loi de la saumure (l'enthalpie libre  $g_\lambda$  en fonction de  $p_\lambda$ ,  $T$  et  $c$ ) proposée par Archer and Carter [107] sur la base d'un modèle enrichi de Pitzer et al. [108] dans le cas du Chlorure de Sodium (NaCl) en solution dans l'eau pure liquide. Il convient de signaler que, eu égard à notre problème de changement de phase, ces deux lois sont cohérentes entre elles et que cette cohérence est assurée au niveau des potentiels thermodynamiques de l'eau pure dans les deux phases. En effet, l'enthalpie libre  $g_\lambda$  est exprimée sous la forme :

$$g_\lambda(p, T, c) = (1 - c)g_w(p, T) + cg_\infty(p, T) + g_s(p, T, c) \quad (4.25)$$

où les fonctions  $g_w$  et  $g_\infty$  sont les enthalpies libres respectivement de l'eau pure liquide et de la solution infiniment diluée, la fonction  $g_s(p, T, c)$  est une fonction complètement connue. Le potentiel chimique de l'eau dans la phase  $\lambda$  est  $\mu_{w\lambda} = \bar{g}_{w\lambda} = g_\lambda - c\partial_c g_\lambda$ , et donc :

$$\mu_{w\lambda} = g_w + g_s - c\partial_c g_s \quad (4.26)$$

Par conséquent, pour assurer la cohérence des potentiels thermodynamiques dans les deux phases (les constantes d'intégrations ne sont plus arbitraires) il faut et il suffit d'adopter pour l'eau liquide pure un potentiel  $g_w$  compatible avec celui  $g_\gamma$  choisi pour la glace. A cette fin, nous avons choisi l'enthalpie libre de l'eau liquide  $g_w$  proposée par Wagner and Pruß [90].

Il convient en outre de noter que le domaine de validité de la loi d'état de l'eau pure liquide ne permet pas de traiter les températures en deçà de la ligne de fusion. Toutefois, nous allons accepter, et c'est une pratique couramment utilisée par les thermodynamiciens, d'extrapoler cette loi à des températures de coexistence des deux phases de l'eau. La seule restriction est d'imposer la stabilité mécanique (positivité du coefficient de compressibilité isotherme). Cette extrapolation concerne uniquement la phase liquide de l'eau car nous cherchons une différence de pression  $p_\gamma - p_\lambda$  positive : la glace est en boule dans la phase liquide.

Passons maintenant aux simplifications et analysons tout d'abord la fonction  $p_{\lambda\gamma}(T, c)$  et sa réciproque  $T_{\lambda\gamma}(p, c)$  pour une concentration  $c$  fixée. La figure 4.2 montre, en coordonnées  $T, p$  et pour plusieurs concentrations  $c$ , les courbes représentatives de l'équation  $p = p_{\lambda\gamma}(T, c)$ . On constate que ces courbes présentent, dans une large gamme de pression ou de température, une linéarité presque parfaite. Un développement d'ordre un, autour de  $p_0$  par exemple, est donc suffisant comme approximation :

$$p_{\lambda\gamma}(T, c) = p_0 + p'_{\lambda\gamma}(c)(T - T_0(c)) \quad \text{ou} \quad T_{\lambda\gamma}(p, c) = T_0(c) + (p - p_0)/p'_{\lambda\gamma}(c) \quad (4.27)$$

avec  $p'_{\lambda\gamma}(c) = \partial_T p_{\lambda\gamma}(T_0(c), c)$ . La comparaison entre les courbes déduites de (4.26) et celles utilisant l'approximation (4.27) est satisfaisante comme le montre la figure 4.2.

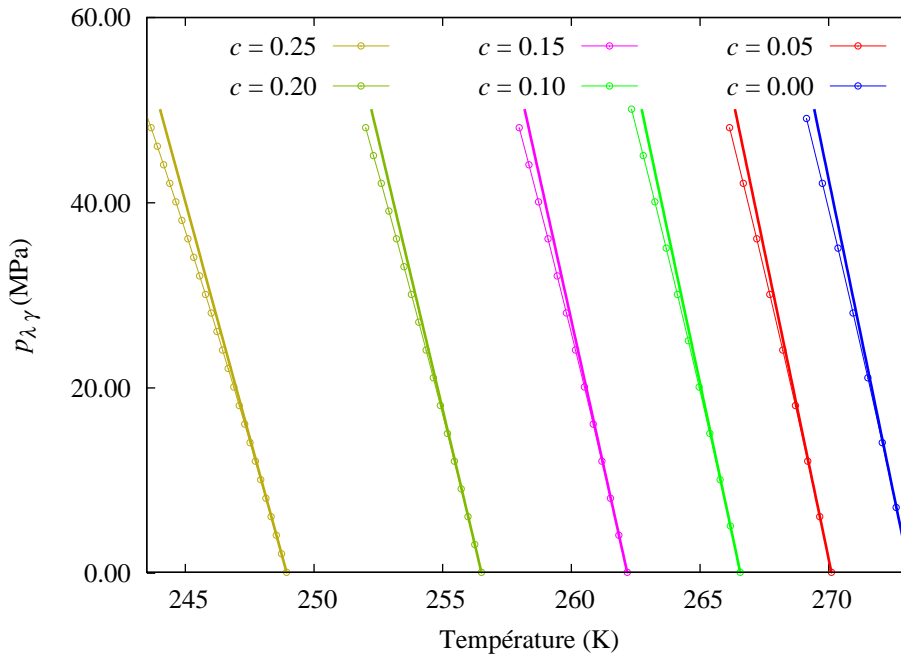


Figure 4.2: Courbes représentatives de la fonction  $p_{\lambda\gamma}(T, c)$  pour six valeurs de  $c$ . Les courbes en continu représentent, pour chaque valeur de  $c$ , l'approximation du premier ordre.

Pour exploiter ce développement, nous utilisons l'égalité (4.21) dans laquelle nous admettons que les volumes massiques  $\nu_\alpha$  sont indépendants des pressions  $p_\alpha$ . Il vient :

$$p_\gamma - p_\lambda = \rho_\gamma(T) \Delta \bar{\nu}_w(T, c) (p_{\lambda\gamma}(T, c) - p_\lambda) \quad (4.28)$$

Cette égalité est particulièrement intéressante car elle exprime la pression capillaire  $p_\gamma - p_\lambda$ , qui intervient dans l'équation (4.5), en fonction de la seule pression  $p_\lambda$  et de la fonction  $p_{\lambda\gamma}(T, c)$  connue via l'équation (4.27).

Par ailleurs, la différence  $p_{\lambda\gamma}(T, c) - p_\lambda$  peut s'écrire comme étant  $p_{\lambda\gamma}(T, c) - p_{\lambda\gamma}(T_{\lambda\gamma}(p_\lambda, c), c)$  et puisque  $p_{\lambda\gamma}(T, c)$  est linéaire en tant que fonction de la température pour un  $c$  fixé, il vient :

$$p_\gamma - p_\lambda = \rho_\gamma(T) \Delta \bar{\nu}_w(T, c) p'_{\lambda\gamma}(c) (T - T_{\lambda\gamma}(p_\lambda, c)) \quad (4.29)$$

Dans la gamme des pressions qui nous occupe, la dépendance de  $T_{\lambda\gamma}$  par rapport à  $c$  est illustrée par la figure 4.3 pour trois valeurs de  $p_\lambda$ . Cette figure montre un écart qui reste inférieur à 1 K quel que soit  $c$  variant de 0 jusqu'à 0.25 (quasi-saturation). La fonction  $T_{\lambda\gamma}(p_\lambda, c)$  peut donc être remplacée par  $T_0(c)$  dans (4.29). Il vient :

$$p_\gamma - p_\lambda = \rho_\gamma(T) \Delta \bar{\nu}_w(T, c) p'_{\lambda\gamma}(c) (T - T_0(c)) \quad (4.30)$$

En ce qui concerne la fonction  $L_{\lambda\gamma}(T, c)$ , nous procédons de la même manière que pour  $p_{\lambda\gamma}$ . La figure 4.4 montre, en fonction de la température et pour plusieurs concentrations, les courbes représentatives de la fonction  $L_{\lambda\gamma}(T, c)$ . Comme précédemment, l'allure est assez linéaire et se prête aussi à une approximation du premier ordre :

$$L_{\lambda\gamma}(T, c) = L_0(c) + L'_0(c) (T - T_0(c)) \quad (4.31)$$

avec  $L'_0(c) = \partial_T L_{\lambda\gamma}(T_0(c), c)$  et d'après la relation (4.24) on a :  $L_0(c) = T_0 \Delta \bar{\nu}_{0w} p'_{\lambda\gamma}(c)$ . La comparaison entre les courbes déduites de (4.26) et celles utilisant l'approximation (4.31) est aussi très satisfaisante comme le montre la figure 4.4.

Pour poursuivre cette démarche de simplification, nous pouvons supposer que les  $\nu_\alpha$  sont également indépendants de la température. Donc  $\nu_\gamma$  est une constante et  $\nu_\lambda$  ne dépend que de  $c$ . Ce qui se traduit par :

$$p_\gamma - p_\lambda = \rho_\gamma L_0(c) (T/T_0(c) - 1) \quad (4.32)$$

$$\Delta \bar{h}_w(p_\lambda, p_\gamma, T, c) = L_{\lambda\gamma}(T, c) = L_0(c) + L'_0(c) (T - T_0(c)) \quad (4.33)$$

où nous avons utilisé l'équation (4.23) et choisi les  $\nu_\alpha$  sur la ligne  $(p_0, T_0(c))$ . Les trois fonctions  $L_0(c)$ ,  $L'_0(c)$  et  $T_0(c)$ , liées à la coexistence des deux phases  $\lambda$  et  $\gamma$ , sont données dans le tableau 4.1 qui fournit aussi les fonctions  $\nu_\alpha$  et  $C_{p\alpha}$  en tant que fonctions uniquement de  $c$  évaluées à l'état de référence  $(p_0, T_0(c))$ . L'ensemble de ces fonctions est obtenu par minimisation, au sens des moindres carrés, de leurs écarts aux fonctions complètes déduites des potentiels thermodynamiques fournis par les articles cités précédemment.

De toutes ces considérations, il apparaît donc que les hypothèses principales adoptées pour aboutir aux équations simplifiées (4.32) et (4.33) sont finalement d'un côté la linéarisation, par rapport à  $T$ , des deux fonctions  $p_{\lambda\gamma}$  et  $L_{\lambda\gamma}$ , et d'un autre côté l'indépendance des  $\nu_\alpha$  par rapport à  $p$  et à  $T$ . Contrairement à la première hypothèse de linéarité, qui n'est utilisée que dans le cadre de ces deux équations, la deuxième hypothèse sur les  $\nu_\alpha$  peut avoir des conséquences sur les équations de bilan de la masse en faisant disparaître surtout les termes transitoires liés à la compressibilité des fluides que, dans certains cas, nous ne pouvons pas négliger. Ceci nous amène donc à bien distinguer les hypothèses faites à l'échelle des équations de bilan de celles prises pour l'établissement des équations (4.32) et (4.33), malgré

une certaine perte de cohérence entre les hypothèses. Cependant, il ne faudrait pas exagérer l'importance de ces incohérences dont les conséquences pratiques sont minimales puisque, de toutes les manières, les deux équations (4.32) et (4.33) n'interviennent que dans des relations empiriques : l'équation (4.32) intervient dans l'équation (4.5) dont la pertinence est encore sujet à discussion, et l'équation (4.33) est multipliée par le terme  $\hat{\pi}^\gamma$  dont la cinétique est définie d'une manière empirique.

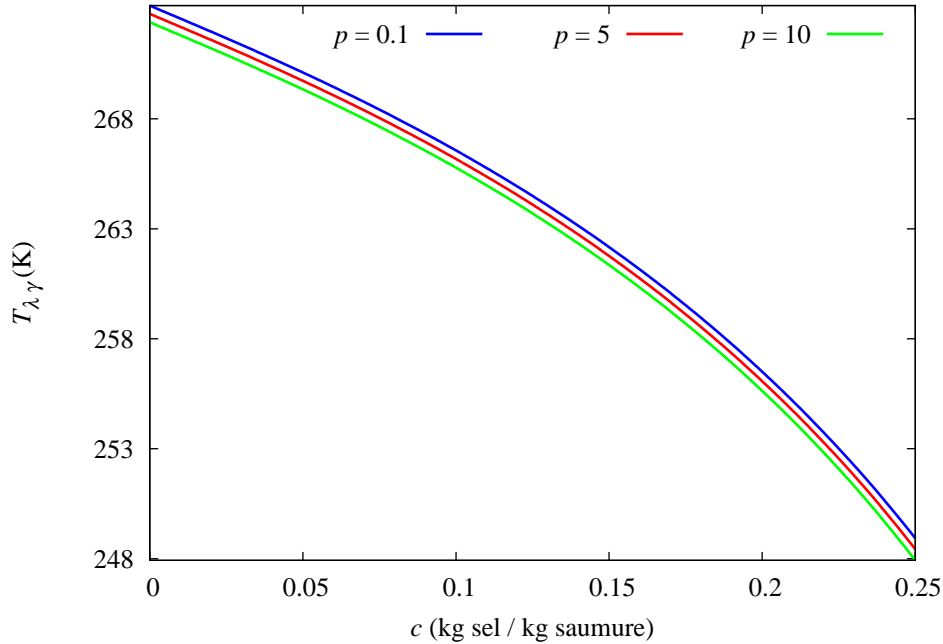


Figure 4.3: Courbes représentatives de la fonction  $T_{\lambda\gamma}(p, c)$  pour trois valeurs de  $p$  (MPa).

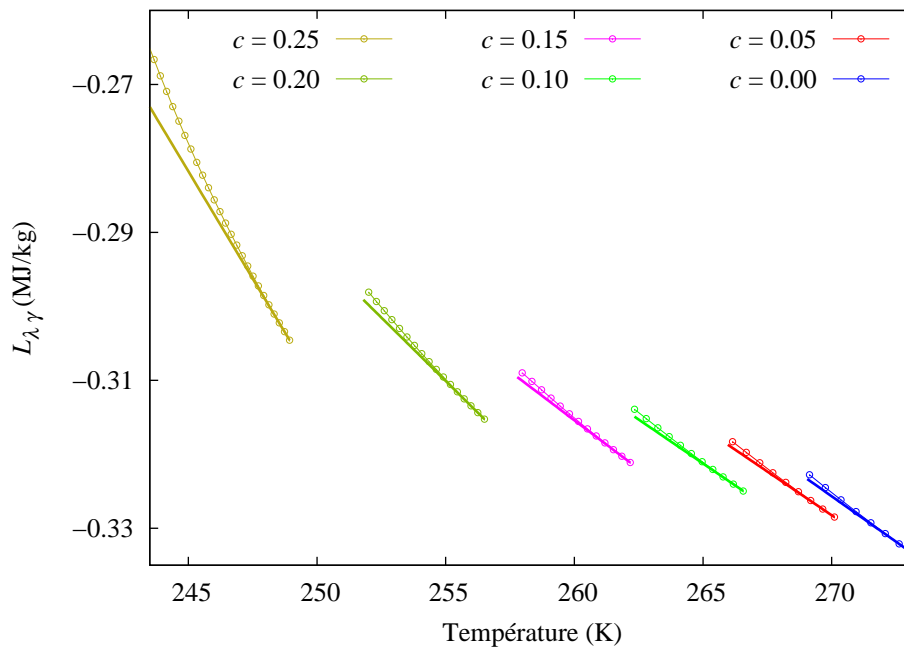


Figure 4.4: Courbes représentatives de la fonction  $L_{\lambda\gamma}(T, c)$  pour six valeurs de  $c$ . Les courbes en continu représentent, pour chaque valeur de  $c$ , l'approximation du premier ordre.



$\varphi = \varphi^0(1 + \sum a_i c^{b_i})$	$\varphi^0$	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$b_1$	$b_2$	$b_3$
$\nu_\gamma (\text{m}^3/\text{kg})$	$1.090844 \times 10^{-3}$						
$C_{p_\gamma} (\text{J/kg/K})$	2096.71						
$\nu_\lambda (\text{m}^3/\text{kg})$	$1.000157 \times 10^{-3}$	-0.701	0.247		0.98	2.675	
$C_{p_\lambda} (\text{J/kg/K})$	4219.44	-3.224	3.356		1.082	1.379	
$T_0 (\text{K})$	273.1526	-0.215	-1.312	-20.572	1	2.702	6.176
$L_0 (\text{J/kg})$	-333427	-0.420	-15.47	0.529	1	4.145	1.477
$L'_0 (\text{J/kg/K})$	-2458.25	-0.4524	145.821	614412	0.79	3.56	10.17

 Table 4.1: Lois d'état simplifiées ( $p_0 = 0.1$  MPa).

### 3 Mise en équation du problème dans le puits de congélation

Nous considérons le cas d'un puits constitué de plusieurs tubes concentriques (figure 4.5) et laissant circuler en mouvements opposés un fluide dans des compartiments différents. La modélisation de chaque compartiment concerne l'écoulement et les échanges thermiques entre le fluide du compartiment et les parois avec lesquelles il est en contact.

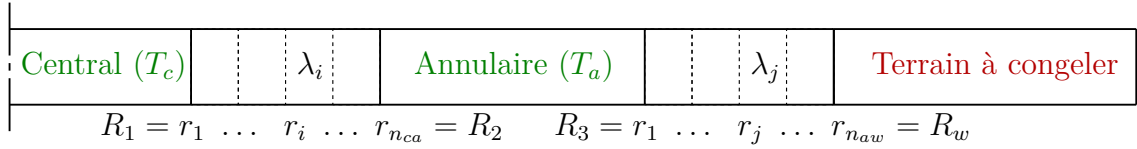


Figure 4.5: Géométrie détaillée du puits de congélation

Dans le cas d'un fluide frigoporteur monophasique et incompressible, le problème transitoire décrit par le système (3.31) du chapitre 3 peut être simplifié en admettant l'hypothèse, souvent utilisée dans les applications d'exploitation de conduites, d'un régime hydraulique permanent où le débit massique  $Q = \rho v \mathcal{A}$  est fonction uniquement du temps. Cela se traduit par le seul problème thermique suivant :

$$\rho C_p (\partial_t T + v T') \mathcal{A} = L_\psi \psi_w - L_\zeta v \zeta_w \quad (4.34)$$

La vitesse  $v$  est calculée par :  $v = Q(t)/(\rho \mathcal{A})$  où  $Q(t)$  est une fonction connue du temps. Les grandeurs  $\rho$  et  $C_p$  peuvent être fonctions de la température.

Le développement de l'équation (4.34) dans les deux compartiments du puits, en tenant compte des lois empiriques donnant  $\psi_w$  et  $\zeta_w$  (voir chapitre 3, § 1.2.6), aboutit au problème mathématique suivant : trouver les deux inconnues que sont les températures dans le tube central  $T_c(x, t)$  et dans le tube annulaire  $T_a(x, t)$  qui vérifient :

$$\begin{cases} A(\mathcal{A}_c, T_c) \partial_t T_c + B(Q_c, T_c) T'_c = \mathcal{P}(D_{Hc}, \mathcal{A}_c, Q_c, T_c) + H_{ca}(T_a - T_c) \\ A(\mathcal{A}_a, T_a) \partial_t T_a + B(Q_a, T_a) T'_a = \mathcal{P}(D_{Ha}, \mathcal{A}_a, Q_a, T_a) + H_{ca}(T_c - T_a) + H_{aw}(T_w - T_a) \end{cases} \quad (4.35)$$

avec

$$Q_c(t) = -Q_a(t) = Q(t) \quad (4.36)$$

$$\begin{aligned} A(\mathcal{A}, T) &= \rho(T) \mathcal{A} C_p(T), \quad B(Q, T) = Q C_p(T) \\ \mathcal{P}(D_H, Q, \mathcal{A}, T) &= 2C_f(\text{Re}, D_H) \left( Q / (\rho(T) \mathcal{A}) \right)^2 |Q| / D_H \\ 1/H_{ca} &= X(R_1, D_{Hc}, \mathcal{A}_c, Q_c, T_c) + X(R_2, D_{Ha}, \mathcal{A}_a, Q_a, T_a) + R_{ca} \\ 1/H_{aw} &= X(R_3, D_{Ha}, \mathcal{A}_a, Q_a, T_a) + R_{aw} \\ X(R, D_H, \mathcal{A}, Q, T) &= \left( 4\mathcal{A} / L_\varphi^2(R) \right) / \left( \lambda(T) \text{Nu}(D_H, \mathcal{A}, Q, T) \right) \end{aligned} \quad (4.37)$$



La température  $T_w(x, t)$  est la température à l'interface puits/terrain. Les grandeurs  $H_{ca}$  et  $H_{aw}$  sont des coefficients d'échange thermique globaux associés respectivement à l'espace entre le tube central (indice  $c$ ) et le tube annulaire (indice  $a$ ) et à l'espace entre le tube annulaire et l'interface puits/terrain (indice  $w$ ). Ces coefficients, en plus d'être fonction des coefficients d'échange convectif solide/fluide, sont aussi fonction des résistances thermiques  $R_{ca}$  et  $R_{aw}$  qui caractérisent les couches entre les différents compartiments et pour lesquelles nous pouvons utiliser l'approximation suivante :

$$R_I = \sum_{i=1}^{n_I-1} \ln(r_{i+1}/r_i) / (2\pi\lambda_i), \quad I = (ca, aw) \quad (4.38)$$

où  $\lambda_i$  est la conductivité thermique de la couche entre les rayons  $r_i$  et  $r_{i+1}$ .

Précisons enfin que, outre le fait que nous avons négligé la conduction thermique dans les fluides, le modèle proposé ne tient pas compte de la convection libre qui peut s'opérer pendant les périodes d'arrêt. Ces deux phénomènes sont généralement négligeables et c'est la convection forcée associée à la circulation des fluides qui prédomine. Par ailleurs, l'égalité des débits massiques dans les deux compartiments du puits traduit le fait que, non seulement nous supposons un régime hydraulique permanent, mais aussi nous ne prenons pas en compte d'éventuelle fuite du fluide.

## 4 Couplage entre le terrain et les puits de congélation

Nous supposons que le raisonnement à l'échelle d'un seul puits peut s'étendre à l'ensemble des puits formant un réseau. La structure souterraine peut alors se décomposer en deux zones qui échangent de l'énergie thermique : le puits dans lequel circule le fluide frigoporteur et le terrain entourant le puits. Lors de la mise en équation du problème dans le puits, la température  $T_w$  peut être considérée, pour le système (4.35), comme une donnée externe dont la connaissance suffit pour résoudre le problème dans le puits et ainsi connaître le flux thermique à la paroi externe du puits (au rayon  $R_w$ ). Ce flux peut alors servir, à son tour, comme une donnée externe, sous la forme cette fois-ci d'une condition aux limites, pour la résolution du problème dans le terrain dont un de ses résultats est la température  $T_w$ . Nous nous retrouvons donc face à un problème de couplage fort entre le puits et le terrain.

Ce couplage fort ne complique finalement pas trop en lui-même le formalisme théorique ; il n'en est pas de même des implications numériques quand il s'agit de vouloir simuler le fonctionnement simultané des deux zones. En effet, malgré les importantes simplifications dans le modèle puits (passage du 3D à 1D, fluide incompressible...), le problème dans le terrain reste tridimensionnel et se prête mal à la discrétisation spatiale à cause du contraste entre les différentes dimensions caractéristiques de la structure. Le caractère transitoire du problème dans chaque zone ne fait que compliquer davantage la situation puisqu'il agit fortement sur les temps de calcul.

Afin de simplifier le problème numérique, une solution immédiate consiste à ramener le problème dans le puits à la connaissance d'une seule température  $T_{Pts}(t)$  indépendante de l'espace ; cette température peut d'ailleurs être simplement la température d'injection du fluide frigoporteur, qui ne représente, en réalité, qu'une condition aux limites pour le vrai problème à résoudre dans le puits. Une telle simplification nous conduit par conséquent à ne résoudre que le problème dans le terrain avec des conditions aux limites aux interfaces puits/terrain qui peuvent être de la forme  $\vec{\psi} \cdot \vec{n} = H_g(T - T_{Pts})$  où  $H_g$  est un coefficient qui exprime, d'une manière global, l'échange thermique entre le puits et le terrain et  $\vec{n}$  est

la normale extérieure au terrain.

En l'absence de mesure *in situ* permettant la détermination du coefficient  $H_g$ , il est bien entendu possible de le supposer infini, autrement dit se contenter de la condition  $T = T_{Pts}$ . Toutefois cette manière de procéder reste assez grossière.

Une autre solution, plus élaborée et surtout beaucoup plus pertinente vis-à-vis des applications rencontrées en géotechnique, peut se dégager en revenant, en accord avec le système d'équation (4.35), à la vraie condition aux limites à imposer au terrain :

$$\vec{\psi} \cdot \vec{n} = \frac{H_{aw}}{L_\psi(R_w)}(T - T_a) \quad (4.39)$$

Cette condition montre qu'il suffit de chercher comment approximer le coefficient  $H_{aw}$  et la température  $T_a$  dans l'espace annulaire en tant que fonctions de l'espace et du temps. Une solution pertinente consiste alors à résoudre, dans une première étape, le problème couplé à l'échelle d'un seul puits, et d'appliquer en deuxième étape l'historique calculé de  $H_{aw}$  et de  $T_a$ , en tenant compte bien sûr de la chronologie de chargement de chaque puits, à tous les puits formant le réseau. Cela suppose en particulier que nous négligeons, lors de la première étape, l'interaction entre les puits ; ce qui constitue en soi une hypothèse importante mais qui reste toutefois beaucoup moins grossière que celle qui consiste à admettre le coefficient  $H_g$  et la température  $T_{Pts}$ .

Cependant, il ne faudrait pas pour autant croire que le fait de procéder ainsi va nous permettre d'avoir un modèle numériquement simple puisqu'à l'échelle d'un seul puits il y a toujours un couplage fort entre le modèle puits et le modèle terrain. Ce couplage se trouve d'ailleurs encore plus complexe à réaliser dans le cas d'un gradient géothermique initial dans le terrain ou en présence d'une direction privilégiée d'écoulement puisque cela nécessite une modélisation bidimensionnelle ou tridimensionnelle du terrain. Toutefois, comme l'objectif du calcul à l'échelle d'un seul puits est de fournir une estimation des grandeurs  $H_{aw}$  et  $T_a$ , nous pouvons encore nous permettre quelques hypothèses simplificatrices. Dans le terrain, nous pouvons négliger le flux thermique vertical devant celui échangé radialement avec le puits et négliger également les effets de la convection forcée devant ceux de la conduction et du changement de phase. Ces hypothèses, qui ont surtout pour elles la simplicité et la rapidité des calculs, doivent bien sûr être validées numériquement et/ou expérimentalement sachant que seule la vérification expérimentale doit trancher en dernier ressort.

## 5 Étude d'un exemple : construction d'une barrière étanche

Nous nous proposons de traiter un exemple pratique de dimensionnement d'une barrière étanche dans un terrain constitué d'un aquifère sableux, salé et présentant un écoulement horizontal. C'est un exemple purement illustratif à travers lequel nous cherchons d'un côté à mieux discerner les grandes lignes de la démarche employée, et d'un autre côté à discuter les effets néfastes de la vitesse d'écoulement et de la salinité de l'eau sur la construction de la barrière. Eu égard à ces objectifs et par souci de simplicité, nous retenons, en nous basant uniquement sur les lois d'état simplifiées du tableau (4.1), une modélisation de la forme :

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{V} &= 0 \\ (\rho C_p)_{eq} \dot{T} + \rho_\lambda C_{p\lambda} \vec{V} \cdot \vec{\nabla} T + \vec{\nabla} \cdot \vec{\psi} &= 0 \end{aligned} \quad (4.40)$$

avec

$$(\rho C_p)_{eq} = \rho^\sigma C_\sigma + \sum \rho^\alpha C_{p\alpha} - n \rho_\gamma L_{\lambda\gamma} \partial_T S_\lambda \quad (4.41)$$

Ainsi, la chaleur volumique équivalente du milieu poreux  $(\rho C_p)_{eq}$  intègre la chaleur latente de changement de phase issue de l'équation simplifiée (4.33). Dans cette modélisation thermo-hydraulique, la salinité est supposée constante et homogène et toutes les fonctions qui interviennent dans (4.40) sont paramétrées par  $c$ . L'effet de l'évolution de  $c$  (équation 4.4) est discuté dans Rouabhi et al. [5]. Nous avons en outre, en vertu de l'égalité simplifiée (4.32) exprimant la pression capillaire en tant que fonction de  $T$  et de  $c$ , considéré le degré de saturation  $S_\lambda$ , définie par la loi empirique (4.5), comme étant finalement une fonction connue de  $T$  et de  $c$  :  $S_\lambda = S_\lambda(T, c) = \mathcal{S}(p_c(T, c), T)$ . Nous avons par ailleurs négligé le terme transitoire en  $\dot{T}$  dans l'équation de conservation de la masse des phases fluides.

Pour compléter cette modélisation, nous avons besoin d'exprimer, non seulement la fonction empirique  $S_\lambda(T, c)$ , mais aussi la perméabilité relative  $k_r$  et la conductivité thermique  $\underline{\lambda}$  nécessaires dans les lois (4.13) donnant les vecteurs  $\vec{V}$  et  $\vec{\psi}$ . C'est ce que nous allons essayer de détailler dans ce qui suit.

L'allure de la courbe  $S_\lambda$  en fonction de la température dépend fortement de la nature de la formation géologique comme le montre la figure 4.6 construite à partir de données concernant deux terrains saturés d'une eau avec une faible salinité.

Quel est alors l'effet de la salinité  $c$  sur la fonction  $S_\lambda = \mathcal{S}(T, c)$ ? Cette question est très peu étudiée dans la littérature et en l'absence d'indications expérimentales fiables, nous avons choisi pour ce travail de combiner la formulation empirique donnant  $\mathcal{S}(p_c)$  pour l'eau douce avec celle théorique exprimant, à partir de l'équilibre chimique, la pression capillaire en fonction de la température et de la salinité (équation 4.32).

Nous choisissons pour  $\mathcal{S}$  la formulation de van Genuchten  $\mathcal{S}(p_c) = \left(1 + (p_c/P)^{1/(1-m)}\right)^{-m}$  qui fait apparaître deux paramètres empiriques  $m$  et  $P$ . En utilisant l'équation (4.32), on obtient :

$$S_\lambda(T, c) = \left(1 + \left(\varkappa(c) \langle 1 - T/T_0(c) \rangle\right)^{1/(1-m)}\right)^{-m}, \quad \varkappa(c) = -\rho_\gamma L_0(c)/P \quad (4.42)$$

L'utilisation du symbole  $\langle \rangle$ , qui signifie pour  $x$  réel que  $\langle x \rangle = (x + |x|)/2$ , précise le fait que le milieu doit rester saturé en liquide si la température  $T$  est supérieure à  $T_0(c)$ , température de coexistence des deux phases pour  $p = p_0$ .

Pour la perméabilité relative  $k_r(S_\lambda)$ , auquel nous associons une perméabilité intrinsèque isotrope  $K$ , nous pouvons également utiliser le modèle de van Genuchten qui met en cohérence l'expression de  $k_r$  avec celle de  $\mathcal{S}$  :

$$k_r(S_\lambda) = \sqrt{S_\lambda} \left(1 - \left(1 - S_\lambda^{1/m}\right)^m\right)^2 \quad (4.43)$$

Nous pouvons attribuer au paramètre  $m$  la même valeur dans les deux équations (4.42) et (4.43). Mais nous pouvons aussi généraliser le modèle en utilisant des valeurs différentes car aucune loi thermodynamique n'impose de relation entre les deux formules empiriques.

Par ailleurs, il nous semble important de noter ici que nous avons adopté les mêmes fonctions empiriques que celles utilisées pour les mécanismes de séchage-mouillage dans les milieux non saturés, néanmoins cette analogie avec ces mécanismes n'est pas toujours évidente à concevoir pour tous les types de terrain ; il faut simplement voir en cela une démarche empirique qui cherche à décrire les phénomènes d'une manière macroscopique (phénoménologique) et qui reste complètement dépendante de la vérification expérimentale.

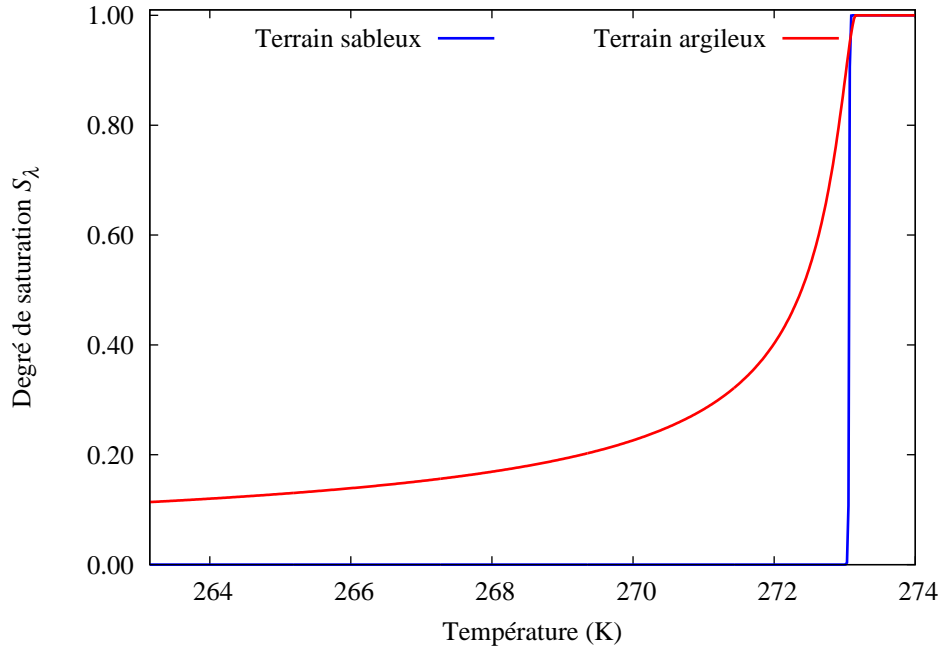


Figure 4.6: Courbes de congélation de deux types de terrain saturés en eau douce.

Concernant la conductivité thermique du milieu, on suppose qu'elle est aussi isotrope, indépendante de la vitesse d'écoulement (pas de dispersion), et fonction des fractions volumiques  $n_\alpha$  à travers la moyenne géométrique suivante :

$$\Lambda = \lambda_\sigma^{n_\sigma} \lambda_\lambda^{n_\lambda} \lambda_\gamma^{n_\gamma} = \lambda_\sigma^{1-n} \lambda_\lambda^{n S_\lambda} \lambda_\gamma^{n(1-S_\lambda)} \quad (4.44)$$

Il nous reste à préciser les conditions initiales et aux limites à respecter lors de la résolution de (4.40). Commençons par les conditions thermiques. La température initiale dans le terrain peut correspondre au gradient géothermique du site :  $T(\vec{x}, 0) = T_\infty(\vec{x})$ . Au niveau des parois des puits, nous optons pour l'approche simplifiée utilisant un coefficient  $H_g$  et une température  $T_{Pts}$  constantes.

Quant au problème hydraulique, comme il est traité en régime stationnaire, il n'a besoin que de conditions aux limites. Nous supposons que l'écoulement dans le terrain reste non perturbé loin des puits de congélation.

Par ailleurs, dans cet exemple, nous avons choisi un écoulement horizontal perpendiculaire à la ligne constituée par les puits de congélation formant la barrière étanche : pour une barrière parallèle à l'axe de vecteur  $\vec{e}_x$ , la vitesse d'écoulement est de la forme  $\vec{V} = V_\infty \vec{e}_y$  où  $\vec{e}_y$  est le vecteur unitaire perpendiculaire à  $\vec{e}_x$  et à  $\vec{e}_z$  définissant l'axe de chaque puits de congélation.

Le tableau 4.2 présente toutes les données nécessaires à la résolution du problème. Comme notre intérêt, dans cet exemple, sera porté uniquement sur la vitesse d'écoulement, nous avons choisi la perméabilité  $K$  et la viscosité dynamique  $\eta_\lambda$  d'une façon libre mais assez convenable afin de faciliter la détermination de  $V_\infty$  que nous ferons ensuite varier tout comme la salinité.

Précisons enfin que les calculs numériques, abordés en bidimensionnel, ne concernent qu'un tronçon d'une quinzaine de mètres formé de 11 puits de congélation avec un espacement entre puits de 1.5 mètre. Nous considérons en outre un scénario de chargement très simple : refroidissement simultané des 11 puits pendant 60 jours.

La construction de la barrière a pour objectif d'isoler hydrauliquement une partie du terrain

$R_w(m)$	$\rho(\text{kg/m}^3)$	$C_p(\text{J/kg/K})$	$\lambda(\text{W/m/K})$	$n$	Paramètres de la fonction $\mathcal{S}(p_c)$
0.1	$\rho_\sigma = 2200$ $\rho_\lambda = \rho_\lambda(c)$ $\rho_\gamma = 917$	$C_\sigma = 900$ $C_{p\lambda} = C_{p\lambda}(c)$ $C_{p\gamma} = 2097$	$\lambda_\sigma = 4.0$ $\lambda_\lambda = 0.6$ $\lambda_\gamma = 2.3$	0.2	$m = 0.8$ $P = 0.1 \text{ MPa}$
Conditions initiale et aux limites : $T_\infty = 283 \text{ K}$ , $H_g = 10 \text{ (W/m}^2\text{/K)}$ , $T_{Pts} = 243 \text{ K}$					

 Table 4.2: Les données du problème (les fonctions de  $c$  sont données dans le tableau 4.1).

d'une autre partie. En cela, il s'agit d'un problème de dimensionnement hydraulique qui peut être analysé en termes des vitesses d'écoulement en admettant que les zones congelées sont les parties du terrain dans lesquelles nous n'avons pratiquement pas de circulation d'eau (vitesses d'écoulement faibles voire nulles). Cependant, l'hydraulique étant couplée avec la thermique via la dépendance de la perméabilité par rapport au degré de saturation et par la suite à la température, l'analyse des résultats peut se faire en fixant une température consigne qui assurera une vitesse d'écoulement relativement faible. Dans l'exemple qui nous occupe, nous fixons cette consigne à  $T_0(c)$  car le terrain considéré est de type sableux et il se congèle pratiquement à la température de changement de phase. Les résultats sont alors analysés en termes de position dans l'espace de l'isotherme  $T = T_0(c)$  qui correspond donc à l'étendue de la zone congelée, formant ainsi la barrière, après 60 jours de refroidissement.

### 5.1 Effet de la vitesse d'écoulement

La figure 4.7 montre, pour cinq valeurs de  $V_\infty$ , l'effet de la vitesse initiale d'écoulement dans le terrain sur la formation de la barrière. Contrairement au calcul purement thermique ( $V_\infty = 0$ ) qui aboutit à une importante zone congelée autour des puits, les calculs thermo-hydrauliques couplés avec  $V_\infty \neq 0$  montrent clairement l'effet néfaste de  $V_\infty$  : lorsque  $V_\infty$  augmente, il devient de plus en plus difficile de réussir la congélation d'une zone continue autour des puits formant ainsi la barrière étanche souhaitée. Cependant, étant donné que les résultats auxquels nous nous intéressons sont principalement liés au problème thermique, le couplage fort entre la thermique et l'hydraulique peut ne pas être important dans les deux sens. En effet, dans le problème thermique, la vitesse de filtration de Darcy peut être considérée comme une donnée externe dont il ne faut se soucier de son couplage avec la thermique que si ce dernier intervient d'une manière trop importante ; cela pourrait même constituer une approche conservatrice de dimensionnement surtout lorsque nous ne connaissons pas avec précision toutes les données du problème hydraulique. Afin d'illustrer cette idée de couplage faible, nous montrons dans la figure 4.8 le résultat de cette approche pour une vitesse uniforme et constante  $\vec{V}(\vec{x}, t) = V_\infty \vec{e}_y$  (calcul purement thermique avec prise en compte de la convection forcée). Sur cette figure, nous avons également représenté les résultats correspondants au calcul couplé thermo-hydraulique dans lequel l'historique du champ des vitesses  $\vec{V}(\vec{x}, t)$  est une inconnue vérifiant une condition aux limites  $\vec{V} = V_\infty \vec{e}_y$  à l'infini. Le calcul avec couplage faible aboutit à un résultat trop pessimiste puisque la barrière se développe d'une manière complètement non symétrique par rapport à la ligne définie par les puits de congélation. En revanche, le calcul avec couplage fort donne, quant à lui, un résultat plus réaliste et qui reste toutefois plus pessimiste, comme le montre la figure 4.7, que le simple calcul thermique où on néglige complètement la convection forcée ( $V_\infty = 0$ ).

En présence d'écoulement, dans le cas présent  $V_\infty > 0.1 \text{ m/j}$ , l'effet de la vitesse d'écoulement sur le développement de la barrière est donc très important. Des calculs thermo-hydrauliques avec couplage fort semblent en outre indispensables pour un dimensionnement

adéquat de la barrière.

## 5.2 Effet de la salinité de l'eau

La salinité de l'eau intervient d'une part dans les fonctions d'état de la phase liquide ( $\rho_\lambda$  et  $C_{p\lambda}$ ), et d'autre part dans les fonctions  $(\rho C_p)_{eq}$ ,  $\lambda$  et  $k_r$  à travers le degré de saturation  $S_\lambda$ . Son influence sur ce dernier est considérable comme nous pouvons le constater sur la figure 4.9 qui donne, dans le cas de l'exemple traité (les paramètres  $m$  et  $P$  sont donnés dans le tableau 4.2),  $S_\lambda$  en fonction de la température pour cinq valeurs de salinité. Notons que, sur cette figure, nous avons exprimé la salinité par le titre  $X$  (kg(sel)/m<sup>3</sup>(saumure)) dont l'utilisation en pratique est beaucoup plus fréquente que la concentration massique  $c$ . Dans le cas qui nous occupe (terrain sableux), la salinité agit sur la courbe de congélation surtout en la translatant suivant son effet sur la température de coexistence des deux phases  $\lambda$  et  $\gamma$  (voir figure 4.4).

La figure 4.10 montre, pour une vitesse  $V_\infty$  fixée à 0.1 m/j, une comparaison entre les résultats des calculs thermo-hydrauliques associés au dimensionnement de la barrière correspondants aux cinq salinités de la figure 4.9. Comme on pouvait s'y attendre, l'augmentation de la salinité a un effet défavorable sur le développement uniforme de la barrière en empêchant le chevauchement, comme c'était le cas aussi des grandes vitesses d'écoulement, des zones congelées autour de chaque puits.

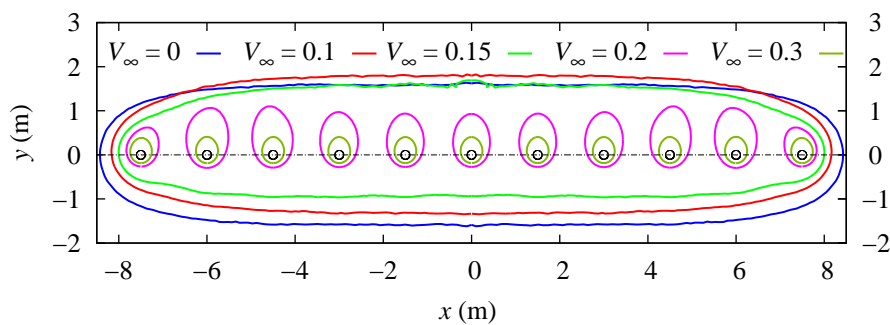


Figure 4.7: Position de l'isotherme  $T_0(0)$  pour cinq valeurs de  $V_\infty$  (m/j).

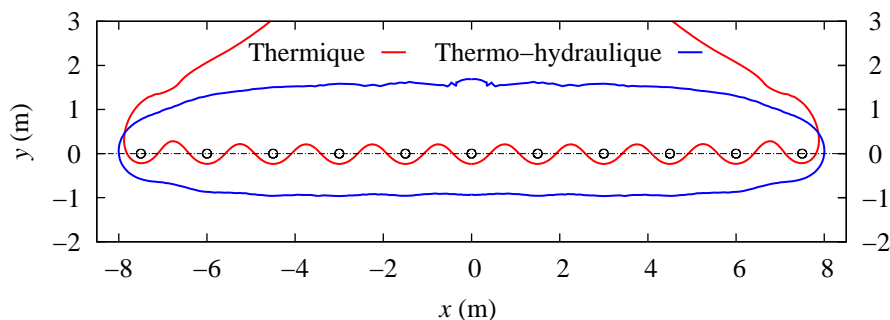


Figure 4.8: Position de l'isotherme  $T_0(0)$  pour un calcul thermique avec convection forcée de vitesse  $\vec{V} = V\vec{e}_y$  et un calcul thermo-hydraulique avec une vitesse à l'infini  $V_\infty = V = 0.15$  m/j.

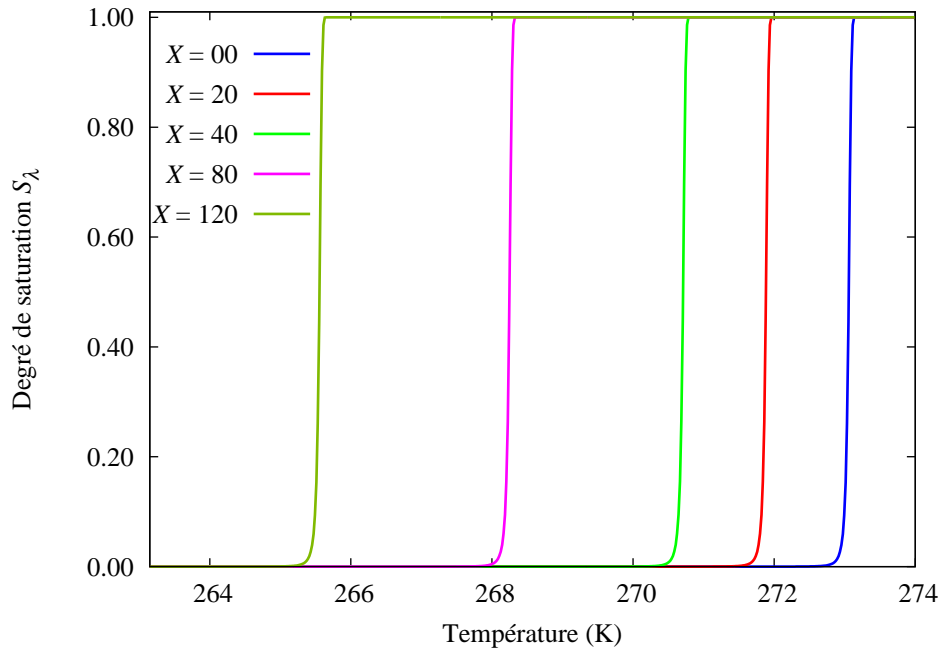


Figure 4.9: Courbe de congélation pour cinq valeurs de  $X$  ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ).

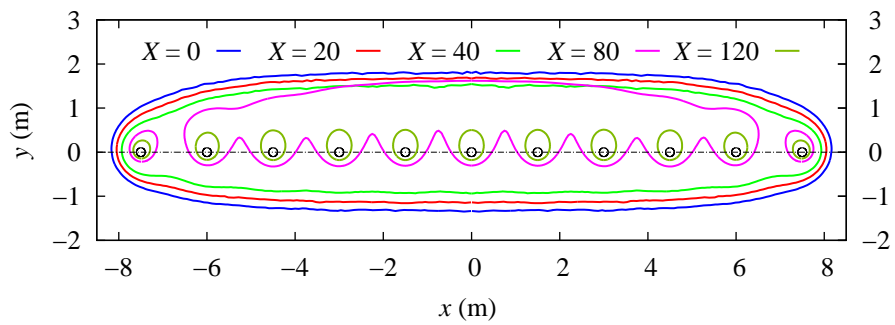


Figure 4.10: Position de l'isotherme  $T_0(X)$  pour cinq valeurs de  $X$  ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ) - calculs thermo-hydrauliques avec  $V_\infty = 0.1 \text{ m}/\text{j}$ .



## Bilan et perspectives

---

La préparation de ce mémoire a été l'occasion de faire un tour d'horizon des activités de recherche que j'ai pu mener depuis mes travaux de thèse. Je me suis toujours donné beaucoup de mal à comprendre et analyser les concepts de base, qui sont parfois très complexes pour quelqu'un qui ne cherche qu'à consolider un maillon de sa chaîne, de peur de n'acquérir qu'un savoir superficiel qui peut éventuellement répondre à un besoin ponctuel mais qui reste parfaitement inutilisable pour d'autres applications. La recherche appliquée que je pratique et qui m'amène souvent vers des problématiques pluridisciplinaires, m'oblige en effet, afin d'apporter des réponses solides à mes interlocuteurs industriels, à avoir le recul nécessaire non seulement à l'égard des phénomènes physiques que je cherche à modéliser mais également quant aux mesures (laboratoire ou *in situ*) ainsi qu'aux outils numériques utilisés.

Au cours de ces années passées au Centre de Géosciences de MINES ParisTech, j'ai toujours cherché, à travers les projets qui m'ont été confiés, à concilier la part de modélisation - simulation numérique et celle des applications qu'il est indispensable pour moi de ne pas perdre de vue car ils représentent une richesse inestimable pour la confrontation et la validation des approches et des codes ; d'ailleurs, c'est en cela que la recherche appliquée est très intéressante car elle permet de traiter des données qui sont souvent inaccessibles à l'échelle d'un laboratoire de recherche.

Pour les années à venir, j'essaierai de garder le même cap en continuant de travailler sur les thématiques actuelles et en m'investissant dans des nouvelles. Ces thématiques comportent à la fois un support expérimental important, de la modélisation et des développements numériques.

**Lois de comportement** : il va de soi que je vais continuer à travailler sur le comportement thermo-mécanique des roches salines car, en dépit de leur multiplicité, les modèles actuels sont loin de décrire correctement la déformabilité et la rupture du sel gemme qui sont pourtant les éléments clés dans la conception d'un stockage en cavités salines : leur connaissance sous l'effet des sollicitations thermo-mécaniques au cours des différentes phases d'exploitation permet de mieux cerner non seulement le volume du stock mais également les risques d'instabilité. Ceci est d'autant plus important à maîtriser que le futur du stockage en souterrain réserve aux cavités salines, à cause de leur grande flexibilité, un rôle déterminant dans la transition énergétique en servant de support pour le stockage des gaz, en lien avec le développement des énergies renouvelables, tels que l'air, l'hydrogène, l'oxygène, l'hélium. . . Mon travail dans ce domaine va se poursuivre dans le cadre de la thèse actuelle de Mejda Azabou et du projet CITEPH-20-2018, en partenariat avec nos partenaires historiques Storengy et Géostock, et portant sur la maîtrise du comportement géomécanique du sel gemme pour l'optimisation du stockage de gaz en cavités salines. L'objectif étant d'aboutir à un modèle qui soit réellement à la hauteur des enjeux actuels. Ceci passera par trois réalisations : d'un côté des essais de laboratoires maîtrisés, d'un autre côté une formulation mathématique solide des phénomènes physiques les plus pertinents, et enfin une méthodologie robuste d'identification des paramètres. Il est bien sûr utopique d'imaginer que nous aboutirons à un modèle qui décrit parfaitement le comportement du sel dans toutes les gammes des variables pertinentes ; l'essentiel c'est qu'il soit assez souple pour permettre

toujours le bon calage avec les résultats des essais de laboratoire qui doivent être réalisés dans les conditions les plus proches possibles de l'application souhaitée. Notons enfin que l'aboutissement de ce travail va certainement renforcer la position historique du Centre de Géoscience sur le sujet et consolidera ses partenariats avec les industriels concernés.

En plus de cet axe de recherche sur le sel, je continuerai à m'investir dans les lois de comportement des matériaux anisotropes en lien avec la problématique du stockage des déchets radioactifs. Cette thématique peut d'ailleurs évoluer pour traiter aussi l'exploitation des roches mères, en particulier celles contenant les gaz de schiste. Ce sujet, qui suscite aujourd'hui de fortes interrogations sociétales, est pourtant important pour l'avenir et pour lequel la recherche doit apporter des solutions et des garanties. Que ce soit pour la première ou la seconde application, mon travail dans ce domaine concernera : la caractérisation de l'anisotropie initiale, la caractérisation et la modélisation de l'anisotropie induite suite à des sollicitations hydro-mécaniques, et le couplage entre les propriétés de transport hydraulique et l'endommagement mécanique. La thèse de Mohamed Mahjoub sur ces sujets doit être prolongée par d'autres thèses qui traiteront d'une part des essais de laboratoire spécifiques afin surtout de quantifier le lien entre la perméabilité et l'endommagement mécanique, et d'une autre part de la modélisation numérique.

Je chercherai également à consolider les bases, surtout expérimentales, de la thématique concernant les lois de comportement des sols congelés. Les développements expérimentaux entrepris dans le cadre de la thèse de Hafssa Tounsi devraient se poursuivre et s'intensifier afin de mieux maîtriser des incertitudes sur les mesures et les scénarios des sollicitations thermo-mécaniques.

**Stockage en souterrains :** indépendamment des lois de comportement du sel gemme, je continuerai le développement du logiciel Demether : mon ambition dans ce domaine est le développement d'une plateforme multiphysique et multidimensionnelle de simulation de l'ensemble de la chaîne de stockage en cavités allant de la création de la cavité, à son exploitation, jusqu'à son abandon, et de rapprocher ainsi les différents métiers liés au stockage. Ces développements se feront en premier lieu dans le cadre des nouveaux projets dans lesquels le Centre de Géosciences est impliqué. Je peux en citer Fluidstory et Rostock-h, qui, en plus des partenaires industriels, regroupe aussi le Centre Thermodynamique des Procédés de MINES ParisTech.

Dans le projet Fluidstory, supporté par l'ANR, le procédé Electrolyse - Méthanation - Oxy - carburant (EMO) est proposé pour apporter une solution en boucle fermée capable de maîtriser les flux énergétiques en absorbant dans une première étape l'excédent d'électricité, pour le restituer lors d'une seconde étape, via le stockage transitoire en cavités salines de CO<sub>2</sub> et de O<sub>2</sub>. C'est dans le cadre de ce projet que la thèse d'Aurélien Souberyron a été lancée. L'objectif est d'étudier les interactions qui s'opèrent entre les gaz stockés et la cavité saline dans le but de mieux décrire le comportement thermodynamique du stockage. Cette thèse s'appuiera sur des expériences thermodynamiques en laboratoire qui viseront à établir les lois d'état des gaz et à rendre compte des transferts de chaleur et de masse entre les gaz et la saumure présente dans la cavité. Les modèles développés seront ensuite implémentés dans Demether.

Dans le projet Rostock-h, supporté par Géodnergies (un groupement d'intérêt scientifique pour l'émergence de filières dédiées à une énergie sans carbone mobilisant le sous-sol), l'accent est mis sur le stockage en souterrain de l'hydrogène qui est considéré aujourd'hui comme une source prometteuse d'énergie renouvelable. Dans un avenir proche, d'importants volumes

d'hydrogène, vraisemblablement produits par différentes méthodes (pyrolyse et gazéification du charbon, reformage de méthane, électrolyse de l'eau...), devraient pouvoir être stockés dans de grands volumes tels que les cavités salines. Les problématiques liées à ce type de stockage sont essentiellement dues à la grande mobilité de l'hydrogène, induite par sa très petite taille moléculaire, et à sa réactivité potentielle avec certaines espèces chimiques qui sont présentes à l'intérieur de la matrice rocheuse ou dans l'environnement du stockage. Pour une meilleure compréhension des mécanismes mis en jeu, il y aura, entre autres, la conception et le développement d'un stockage pilote à échelle réduite (maquette) qui aura pour objectif de valider en partie les développements effectués dans ce projet. Ces développements seront ensuite intégrés dans Demether dans une optique de modélisation globale intégrant l'ensemble des éléments souterrains du stockage.

**Autres thématiques :** la méthodologie développée autour du logiciel Demether peut être facilement généralisable à d'autres thématiques telles que le forage pétrolier et la géothermie. Ces deux thématiques, qui existent déjà au niveau du Centre de Géosciences depuis des années, sont amenées à traiter de plus en plus des gisements profonds où les mécanismes de transfert de masse et de chaleur sont particulièrement importants. Dans le cas des forages pétroliers, les échanges thermiques entre le puits et le terrain peuvent avoir des conséquences dramatiques sur la stabilité mécanique des parois du puits à cause des contraintes thermiques générées par le changement de la température suite à la circulation forcée des fluides de forage dans le puits. L'idée est de coupler les outils numériques développés par le Centre dans le domaine du forage directionnel avec les approches thermodynamiques développées dans ce mémoire autour des puits de forage. C'est également ces approches là, augmentées éventuellement par la prise en compte des échanges de masse entre puits et terrain, qui peuvent être implémentées dans le cas des échangeurs géothermiques profonds exploitant la chaleur contenue dans le sous-sol.

Je continuerai bien évidemment à profiter de ces activités de recherche appliquée pour mettre en valeur les verrous scientifiques via des publications.

# Références

---

- [1] A. Rouabhi, M. Tijani, P. Moser, and D. Goetz. Continuum modelling of dynamic behaviour and fragmentation of quasi-brittle materials : application to rock fragmentation by blasting. *International journal for numerical and analytical methods in geomechanics*, 29(7) :729–749, 2005. <https://doi.org/10.1002/nag.436>.
- [2] A. Rouabhi, M. Tijani, and A. Rejeb. Triaxial behaviour of transversely isotropic materials : application to sedimentary rocks. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 31(13) :1517–1535, 2007. <https://doi.org/10.1002/nag.605>.
- [3] A. Rouabhi, P. Labaune, M. Tijani, N. Gatelier, and G. Hévin. Phenomenological behavior of rock salt : On the influence of laboratory conditions on the dilatancy onset. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.jrmge.2018.12.011>.
- [4] A. Rouabhi, G. Hévin, A. Soubeyran, P. Labaune, and F. Louvet. A multiphase multicomponent modeling approach of underground salt cavern storage. *Geomechanics for Energy and the Environment*, 12 :21–35, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.gete.2017.08.002>.
- [5] A. Rouabhi, E. Jahangir, and H. Tounsi. Modeling heat and mass transfer during ground freezing taking into account the salinity of the saturating fluid. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 120 :523–533, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.12.065>.
- [6] M. Mahjoub, A. Rouabhi, M. Tijani, S. Granet, S. M’jahad, and J. Talandier. Numerical study of callovo-oxfordian argillite expansion due to gas injection. *International Journal of Geomechanics*, 18(1) :04017134, 2017. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)GM.1943-5622.0001050](https://doi.org/10.1061/(ASCE)GM.1943-5622.0001050).
- [7] F. Fer. *Thermodynamique macroscopique, Tome I : Systèmes fermés*. Gordon and Breach, Science Publishers Ltd, 1970.
- [8] F. Fer. *Thermodynamique macroscopique, Tome II : Systèmes ouverts*. Gordon and Breach, Science Publishers Ltd, 1971.
- [9] C. Truesdell. *Rational thermodynamics, Second Edition*. Springer, New York, 1984.
- [10] K. Wilmanski. *Continuum thermodynamics. Part I : Foundations*. World Scientific Publishing Company, 2008.
- [11] D. A. Drew and S. L. Passman. *Theory of multicomponent fluids*. Springer, New York, 1999.
- [12] H. A. Jakobsen. *Chemical reactor modeling. Multiphase reactive flows*. Springer, Berlin, 2008.
- [13] M. A. Biot. Variational lagrangian-thermodynamics of nonisothermal finite strain mechanics of porous solids and thermomolecular diffusion. *International Journal of Solids and Structures*, 13(6) :579–597, 1977.
- [14] O. Coussy. *Mécanique des milieux poreux*. Editions Technip, 1991.

- 
- [15] J. Bear and L. G. Fel. A phenomenological approach to modeling transport in porous media. *Transport in porous media*, 92(3) :649–665, 2012.
- [16] C. Marle. Ecoulements monophasiques en milieu poreux. *Rev. Inst. Français du Pétrole*, 22(10) :1471–1509, 1967.
- [17] F. Dobran. Theory of multiphase mixtures—a thermomechanical formulation. *International journal of multiphase flow*, 11(1) :1–30, 1985.
- [18] S. M. Hassanizadeh and W. G. Gray. Mechanics and thermodynamics of multiphase flow in porous media including interphase boundaries. *Advances in water resources*, 13(4) :169–186, 1990.
- [19] M. Kaviany. *Principles of heat transfer in porous media*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [20] M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered porous media ii : Generalized volume averaging. *Transport in porous media*, 14(2) :179–206, 1994.
- [21] W. G. Gray. Thermodynamics and constitutive theory for multiphase porous-media flow considering internal geometric constraints. *Advances in Water Resources*, 22(5) : 521–547, 1999.
- [22] B. Schrefler. Mechanics and thermodynamics of saturated/unsaturated porous materials and quantitative solutions. *Applied Mechanics Reviews*, 55(4) :351–388, 2002.
- [23] B. Loret and F. M. Simões. A framework for deformation, generalized diffusion, mass transfer and growth in multi-species multi-phase biological tissues. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 24(5) :757–781, 2005.
- [24] L. Dormieux, D. Kondo, and F.-J. Ulm. *Microporomechanics*. John Wiley & Sons, 2006.
- [25] G. F. Pinder and W. G. Gray. *Essentials of multiphase flow and transport in porous media*. John Wiley & Sons, 2008.
- [26] W. G. Gray and C. T. Miller. *Introduction to the thermodynamically constrained averaging theory for porous medium systems*. Springer, 2014.
- [27] N. Khalili and B. Loret. An elasto-plastic model for non-isothermal analysis of flow and deformation in unsaturated porous media : formulation. *International Journal of Solids and Structures*, 38(46-47) :8305–8330, 2001.
- [28] F. Duval, F. Fichot, and M. Quintard. A local thermal non-equilibrium model for two-phase flows with phase-change in porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(3) :613–639, 2004.
- [29] R. Gelet, B. Loret, and N. Khalili. A thermo-hydro-mechanical coupled model in local thermal non-equilibrium for fractured hdr reservoir with double porosity. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 117(B7), 2012.
- [30] J. C. Slattery, L. Sagis, and E.-S. Oh. *Interfacial transport phenomena*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [31] C. A. Miller and P. Neogi. *Interfacial phenomena : equilibrium and dynamic effects*. CRC Press, 2007.
- [32] M. Ishii and T. Hibiki. *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow*. Springer Science & Business Media, 2010.
- [33] A. W. Neumann, R. David, and Y. Zuo. *Applied surface thermodynamics*. CRC press, 2010.
- [34] M. Forde. Dg fredlund, h. rahardjo, soil mechanics for unsaturated soils, john wiley, new york (1993), p. 512, £ 70.00, isbn : 0-471-85008-x, 1994.

- [35] S. Olivella and A. Gens. Vapour transport in low permeability unsaturated soils with capillary effects. *Transport in Porous Media*, 40(2) :219–241, 2000.
- [36] J. Rutqvist, L. Börgesson, M. Chijimatsu, A. Kobayashi, L. Jing, T. Nguyen, J. Noorishad, and C.-F. Tsang. Thermohydromechanics of partially saturated geological media : governing equations and formulation of four finite element models. *International journal of rock mechanics and mining sciences*, 38(1) :105–127, 2001.
- [37] E. J. Murray and V. Sivakumar. *Unsaturated Soils : A fundamental interpretation of soil behaviour*. John Wiley & Sons, 2010.
- [38] P. Labaune. *Comportement thermomécanique du sel gemme : Application au dimensionnement des cavités*. PhD thesis, MINES ParisTech, PSL Research University, 2018.
- [39] P. Labaune and A. Rouabhi. Dilatancy and tensile criteria for salt cavern design in the context of cyclic loading for energy storage. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 62 :314–329, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2018.10.010>.
- [40] P. Labaune, A. Rouabhi, M. Tijani, L. Blanco-Martín, and T. You. Dilatancy criteria for salt cavern design : a comparison between stress-and strain-based approaches. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 51(2) :599–611, 2018. <https://doi.org/10.1007/s00603-017-1338-4>.
- [41] A. Rouabhi. The hydro-mechanical behaviour of the callovo-oxfordian argillites and the numerical modelling of the shaft sinking. Technical report, MODEX-REP european project, 2005.
- [42] A. Rejeb, A. Rouabhi, A. Millard, J. Maßmann, and S. Uehara. Hydro-mechanical response of the tournemire argillite to the underground openings excavation : unsaturated zones and mine-by-test experiment. Technical report, DECOVALEX international project, 2008.
- [43] M. Mahjoub. *Modélisation du couplage endommagement-perméabilité dans les géomatériaux anisotropes. Application aux ouvrages souterrains du site de Bure*. PhD thesis, MINES ParisTech, PSL Research University, 2017.
- [44] M. Mahjoub, A. Rouabhi, M. Tijani, and S. Granet. An approach to model the mechanical behavior of transversely isotropic materials. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 40(6) :942–961, 2016. <https://doi.org/10.1002/nag.2469>.
- [45] M. Mahjoub and A. Rouabhi. A hydromechanical approach for anisotropic elastoviscoplastic geomaterials : Application to underground excavations in sedimentary rocks. *Underground Space*, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.undsp.2018.06.001>.
- [46] M. Mahjoub and A. Rouabhi. Modelling of anisotropic damage due to hydrogen production in radioactive waste disposal. *Environmental Geotechnics*, 5(3) :176–183, 2018. <https://doi.org/10.1680/jenge.17.00057>.
- [47] A. El Murr, F. H. Hassen, A. Rouabhi, and M. Tijani. A fully coupled thermo-hydro-mechanical model for the analysis of the lining behavior of underground caverns in an aa-caes system. In *V International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering*, pages 177–185, 2013.
- [48] A. E. Murr. *Étude du revêtement des cavités minées dans un stockage adiabatique d’air comprimé*. PhD thesis, MINES ParisTech, PSL Research University, 2015.
- [49] D. Munson and P. Dawson. Salt constitutive modeling using mechanism maps. In *Proceedings of the 1st Conference on the Mechanical Behavior of Salt*, 1982.

- [50] D. Munson, K. DeVries, A. Fossum, and G. Callahan. Extension of the m-d model for treating stress drop in salt. In *Proceedings of the 3rd conference on mechanical behaviour of salt*, 1996.
- [51] M. Tijani, G. Vouille, and B. Hugout. Le sel gemme en tant que liquide visqueux. In *Congrès International de Mécanique des Roches*, pages 241–246, 1983.
- [52] M. Tijani, F. Hadj-Hassen, A. Rouabhi, J. Schleifer, and N. Gatelier. Effect of insoluble materials on salt behavior during creep tests. In *Mechanical Behaviour of Salt VII*, pages 97–103. CRC Press, 2012.
- [53] F. Hadj-Hassen, M. Tijani, A. Rouabhi, and E. Hertz. Interpretation of convergence movement in room and pillar mining by integrating creep of salt and swelling of marl under water effect. In *Mechanical Behaviour of Salt VII*, pages 201–206. CRC Press, 2012.
- [54] M. Tijani. Contribution à l'étude thermomécanique des cavités réalisées par lessivage dans des formations géologiques salines. Habilitation à Diriger des Recherches, Université Pierre et Marie Curie, 2008.
- [55] A. E. Green and P. M. Naghdi. A general theory of an elastic-plastic continuum. *Archive for rational mechanics and analysis*, 18(4) :251–281, 1965.
- [56] E. H. Lee. Elastic-plastic deformation at finite strains. *Journal of applied mechanics*, 36(1) :1–6, 1969.
- [57] J. Mandel. Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques. *International Journal of Solids and Structures*, 9(6) :725–740, 1973.
- [58] J. Casey and P. Naghdi. Small deformations superposed on large deformations of an elastic-plastic material. *International journal of solids and structures*, 19(12) :1115–1146, 1983.
- [59] P. M. Naghdi. A critical review of the state of finite plasticity. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP*, 41(3) :315–394, 1990.
- [60] V. Lubarda. Constitutive analysis of large elasto-plastic deformation based on the multiplicative decomposition of deformation gradient. *International Journal of Solids and Structures*, 27(7) :885–895, 1991.
- [61] C. Miehe. On the representation of prandtl-reuss tensors within the framework of multiplicative elastoplasticity. *International Journal of Plasticity*, 10(6) :609–621, 1994.
- [62] F. Sidoroff and A. Dogui. Thermodynamics and duality in finite elastoplasticity. In *Continuum Thermomechanics*, pages 389–400. Springer, 2000.
- [63] M. Scheidler and T. Wright. A continuum framework for finite viscoplasticity. *International Journal of Plasticity*, 17(8) :1033–1085, 2001.
- [64] M. Scheidler and T. Wright. Classes of flow rules for finite viscoplasticity. *International Journal of Plasticity*, 19(8) :1119–1165, 2003.
- [65] Y. F. Dafalias. Plastic spin : necessity or redundancy? *International Journal of Plasticity*, 14(9) :909–931, 1998.
- [66] Y. F. Dafalias. Finite elastic-plastic deformations : beyond the plastic spin. *Theoretical & Applied Mechanics*, 38(4), 2011.
- [67] C. Truesdell and W. Noll. The nonlinear field theories of mechanics, 1965.
- [68] J. Betten. Tensor function theory and classical plastic potential. In *Applications of Tensor Functions in Solid Mechanics*, pages 279–299. Springer, 1987.



- [69] J. Lemaitre, J.-L. Chaboche, and P. Germain. *Mécanique des matériaux solides*, volume 2. Dunod Paris, 1985.
- [70] P. Bérest. Viscoplasticité en mécanique des roches. *Manuel de rhéologie des géomatériaux*, pages 235–257, 1987.
- [71] J. Besson, G. Cailletaud, J.-L. Chaboche, and S. Forest. *Mécanique non linéaire des matériaux*. Hermès Science Publ., 2001.
- [72] J. Mandel. Généralisation de la théorie de plasticité de von Mises. *International Journal of Solids and Structures*, 1(3) :273–295, 1965.
- [73] B. Loret. Application de la théorie des multimécanismes à l’étude du comportement des sols. *Manuel de Rhéologie des Géomatériaux*, pages 189–214, 1987.
- [74] P. V. Lade. Elasto-plastic stress-strain theory for cohesionless soil with curved yield surfaces. *International Journal of Solids and Structures*, 13(11) :1019–1035, 1977.
- [75] O. Zienkiewicz. Some useful forms of isotropic yield surfaces for soil and rock mechanics. *Finite element in geomechanics*, pages 179–190, 1977.
- [76] H. Van Eekelen. Isotropic yield surfaces in three dimensions for use in soil mechanics. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 4(1) : 89–101, 1980.
- [77] B. Loret. Elastoplasticité à simple potentiel. *Manuel de rhéologie des géomatériaux*, pages 157–187, 1987.
- [78] J.-P. Bardet. Lode dependences for isotropic pressure-sensitive elastoplastic materials. *Journal of applied mechanics*, 57(3) :498–506, 1990.
- [79] D. Bigoni and A. Piccolroaz. Yield criteria for quasibrittle and frictional materials. *International journal of solids and structures*, 41(11-12) :2855–2878, 2004.
- [80] K. Mellegard, K. DeVries, and G. Callahan. Lode angle effects on the deformational properties of natural rock salt. In *Alaska Rocks 2005, The 40th US Symposium on Rock Mechanics (USRMS)*. American Rock Mechanics Association, 2005.
- [81] L. A. Roberts, S. A. Buchholz, K. D. Mellegard, and U. Düsterloh. Cyclic loading effects on the creep and dilation of salt rock. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 48(6) : 2581–2590, 2015.
- [82] P. Berest, B. Brouard, M. Karimi-Jafari, and L. Van Sambeek. Transient behavior of salt caverns—interpretation of mechanical integrity tests. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 44(5) :767–786, 2007.
- [83] P. Berest, M. Karimi-Jafari, and B. Brouard. Comportement mécanique à très long terme des mines et cavernes dans le sel gemme : loi de Norton-Hoff ou loi de Lemaitre ? *Revue française de Géotechnique*, (124) :45–59, 2008.
- [84] K. DeVries, K. Mellegard, and G. Callahan. Laboratory testing in support of a bedded salt failure criterion. In *Solution Mining Research Institute Fall Meeting*, pages 90–113, 2003.
- [85] M. Azabou, A. Rouabhi, and L. Blanco-Martín. Effect of insoluble materials on the phenomenological behavior of rock salt. *Computers and Geotechnics*, en préparation.
- [86] A. G. Ter-Gazarian. *Energy storage for power systems*. Number 6. Iet, 1994.
- [87] A. Cavallo. Controllable and affordable utility-scale electricity from intermittent wind resources and compressed air energy storage (CAES). *Energy*, 32(2) :120–127, 2007.
- [88] S. Succar and R. H. Williams. Compressed air energy storage : theory, resources, and applications for wind power. *Princeton environmental institute report*, 2008.

- [89] J. Kepplinger, F. Crotogino, S. Donadei, and M. Wohlers. Present trends in compressed air energy and hydrogen storage in germany. In *Solution Mining Research Institute SMRI Fall 2011 Conference, York, United Kingdom*, 2011.
- [90] W. Wagner and A. Pruß. The iapws formulation 1995 for the thermodynamic properties of ordinary water substance for general and scientific use. *Journal of physical and chemical reference data*, 31(2) :387–535, 2002.
- [91] E. W. Lemmon, R. T. Jacobsen, S. G. Penoncello, and D. G. Friend. Thermodynamic properties of air and mixtures of nitrogen, argon, and oxygen from 60 to 2000 k at pressures to 2000 mpa. *Journal of physical and chemical reference data*, 29(3) :331–385, 2000.
- [92] R. Feistel, D. Wright, H.-J. Kretzschmar, E. Hagen, S. Herrmann, and R. Span. Thermodynamic properties of sea air. *Ocean Science*, 6(1) :91–141, 2010.
- [93] L. Blanco-Martín, A. Rouabhi, J. Billiotte, F. Hadj-Hassen, B. Tessier, G. Hévin, C. Balland, and E. Hertz. Experimental and numerical investigation into rapid cooling of rock salt related to high frequency cycling of storage caverns. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 102 :120–130, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2018.01.008>.
- [94] A. Rouabhi. Problèmes thermodynamiques liés aux stockage de fluides dans des cavités souterraines. logiciel demether - notice de programmation/utilisation. Technical report, Centre de Géosciences, MINES ParisTech, 2012.
- [95] A. Rouabhi. Problèmes thermodynamiques liés aux stockage de fluides dans des cavités souterraines. logiciel demether - notice de conception. Technical report, Centre de Géosciences, MINES ParisTech, 2012.
- [96] A. Rouabhi, M. Tijani, O. Stab, Y. Charnavel, and T. You. A semi-analytical approach for modelling heat transfer during salt-cavern leaching process. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 32(13) :1617–1634, 2008. <https://doi.org/10.1002/nag.686>.
- [97] A. Soubeyran, A. Rouabhi, and C. Coquelet. Thermodynamic analysis of carbon dioxide storage in salt caverns to improve the power-to-gas process. *Applied Energy*, 242 :1090–1107, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2019.03.102>.
- [98] M. Vitel, A. Rouabhi, M. Tijani, and F. Guérin. Modeling heat transfer between a freeze pipe and the surrounding ground during artificial ground freezing activities. *Computers and Geotechnics*, 63 :99–111, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2014.08.004>.
- [99] M. Kaviany. *Principles of heat transfer*. John Wiley & Sons, 2002.
- [100] S. Kakac and Y. Yener. *Convective heat transfer*. CRC Press, 1995.
- [101] A. Rouabhi and M. Tijani. Modélisation thermo-hydraulique de la congélation artificielle des terrains. In M. Gasc-Barbier, M.-S. Véronique, and P. Bérest, editors, *Manuel de mécanique des roches Tome V - Thermomécanique des roches*, chapter 9, pages 281–303. Presses des MINES, 2017.
- [102] H. Tounsi, A. Rouabhi, M. Tijani, and F. Guérin. Thermo-hydro-mechanical modeling of artificial ground freezing : Application in mining engineering. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 2019. <https://doi.org/10.1007/s00603-019-01786-9>.
- [103] M. Vitel. *Modélisation thermo-hydraulique de la congélation artificielle des terrains : Application à la mine d’uranium de Cigar Lake (Canada)*. PhD thesis, MINES Paris-Tech, PSL Research University, 2015.

- 
- [104] M. Vitel, A. Rouabhi, M. Tijani, and F. Guérin. Modeling heat and mass transfer during ground freezing subjected to high seepage velocities. *Computers and Geotechnics*, 73 : 1–15, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2015.11.014>.
- [105] M. Vitel, A. Rouabhi, M. Tijani, and F. Guérin. Thermo-hydraulic modeling of artificial ground freezing : Application to an underground mine in fractured sandstone. *Computers and Geotechnics*, 75 :80–92, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2016.01.024>.
- [106] R. Feistel and W. Wagner. A new equation of state for h<sub>2</sub>o ice ih. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 35(2) :1021–1047, 2006.
- [107] D. G. Archer and R. W. Carter. Thermodynamic properties of the nacl+ h<sub>2</sub>o system. 4. heat capacities of h<sub>2</sub>o and nacl (aq) in cold-stable and supercooled states. *The Journal of Physical Chemistry B*, 104(35) :8563–8584, 2000.
- [108] K. S. Pitzer, J. C. Peiper, and R. Busey. Thermodynamic properties of aqueous sodium chloride solutions. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 13(1) :1–102, 1984.

# Annexe A

## Curriculum vitæ

---

### Ahmed ROUABHI

Né le 12 Janvier 1975  
Nationalité française et tunisienne  
Marié, 2 enfants

Adresse professionnelle :  
MINES ParisTech - Centre de Géosciences  
35 rue Saint Honoré, 77305 Fontainebleau Cedex  
Tél : 33 (0)1 64 69 48 78 - Fax : 33 (0)1 64 69 47 11  
E-mail : [ahmed.rouabhi@mines-paristech.fr](mailto:ahmed.rouabhi@mines-paristech.fr)

---

### 1 Diplômes et titres universitaires

- 2000 - 2004 Thèse de doctorat, MINES ParisTech, France.  
Sujet : Comportement et fragmentation dynamiques des matériaux quasi-fragiles.  
Mention : Très honorable avec félicitations du Jury.
- 1999 - 2000 DEA en Géomatériaux, MINES ParisTech, France.
- 1996 - 1999 Diplôme d'ingénieur généraliste, École Polytechnique de Tunisie, Tunisie.  
Option : Mécanique et Structures.

### 2 Expériences professionnelles

- Depuis 2007 Chargé de recherche, Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- 2004 - 2007 Attaché de recherche, Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- 2000 - 2004 Doctorant, Centre de Géosciences, MINES ParisTech.

### 3 Activités de recherche et compétences

- Modélisation des problèmes thermo-hydro-mécaniques : activité principalement autour des applications de stockage d'énergie et de déchets nucléaires en souterrain, et d'exploitation des gisements complexes par congélation artificielle. Les compétences développées dans le cadre de ces applications me permettront dans l'avenir de participer au développement d'autres applications telles que la géothermie haute température et le forage pétrolier profond ;
- Recherche de lois de comportement : cette activité est au coeur de mes thématiques de recherche. Depuis ma thèse sur le comportement et la fragmentation dynamiques des matériaux, je n'ai cessé de la développer et de l'enrichir : modèles d'anisotropie induite, modèles pour matériaux isotropes transverses, modèles thermodynamiques pour mélange de gaz, etc ;
- Développements numériques : cela concerne aussi bien le développement de logiciels

scientifiques que l'intégration des lois de comportement dans les codes de calcul des structures. Les compétences acquises autour de cette activité me permettent de développer mes propres ressources numériques afin que les approches de modélisation ne soient pas limitées par les fonctionnalités des logiciels existants ;

- Développements expérimentaux : pour identifier les lois de comportement ou reproduire à échelle réduite les mécanismes physiques associés à une application donnée ;
- Actions de recherche contractuelles : cela concerne le montage et le pilotage de contrats de recherche et d'expertise technique pour les besoins de différents partenaires industriels (Storengy, Géostock, Air Liquide, Salins du Midi, Solvay, Total, Areva, Soletanche Bachy. . . ) autour des problématiques liées à l'exploitation du sous-sol (mines, stockages en souterrain).

## 4 Activités de développement

Ces activités concernent la résolution de problèmes allant de l'identification de paramètres à partir d'essais de laboratoire jusqu'aux couplages de phénomènes physiques complexes résolus avec différents logiciels. Elles sont fondées sur des méthodes semi-analytiques et des approches numériques utilisant la méthode des éléments finis. Les principaux développements réalisés ces dernières années sont :

- Phimef : logiciel de calcul de structures 3D sous sollicitations multiphysiques. Il est basé sur la méthode des éléments finis et permet de coupler facilement différentes physiques (électrique, thermique, hydraulique, mécanique), y compris en grandes déformations. Il hérite des développements numériques réalisés, depuis 1978, autour du logiciel Viplef (logiciel historique de l'équipe) ;
- Demether : logiciel dédié à la résolution des problèmes thermodynamiques liés aux stockages de fluides dans des cavités souterraines alimentées par des tubes dans un forage pétrolier ;
- Solec : logiciel dédié à la simulation de la congélation artificielle des terrains autour des tubes de refroidissement ;
- Chales : logiciel semi-analytique pour résoudre les problèmes thermiques liés au comportement des cavités salines pendant la phase de lessivage ;
- Couplage Phimef-Comsol : cela repose sur une méthodologie permettant de tirer profit à la fois des capacités numériques du logiciel Comsol Multiphysics dans le pré- et le post-traitement des résultats et celle de phimef dans la résolution des problèmes mécaniques dans le domaine de la géomécanique et de l'étude des ouvrages souterrains.

## 5 Activités d'enseignement

### 5.1 Cycle ingénieur civil de MINES ParisTech

- Enseignement spécialisé : Calcul des Structures (1 semaine/an)
  - responsable du cours depuis 2014 ;
  - participation aux cours et TP depuis 2003.
- Modules d'Intégration Généralistes (3 semaines/an) : participation à des cours et à des encadrements de projets dans les MIG suivants :
  - MIG 2018 : Stockage en souterrain de l'hydrogène ;
  - MIG 2014 : Stockage d'électricité par compression adiabatique d'air ;

- MIG 2011 : Stockage d'énergie en cavités salines ;
- MIG 2004 : Entreposage de sub-surface de déchets radioactifs ;
- MIG 2003 : Conception d'un grand tunnel.
- Option Sol et Sous-sol : Cours sur le Couplage thermo-hydro-mécanique en géotechnique (1/2 journée/an).
- Tronc commun : Mécanique des matériaux solides (petites classes de 2004 à 2012).

## 5.2 Autres enseignements

- Mastère GAZ MINES Paristech : Stockage souterrain d'énergie, depuis 2018 (1/2 journée/an).

## 6 Activités d'encadrement

Seules sont citées les activités où ma participation a pris plus de 20 % de l'encadrement total.

### 6.1 Encadrement de thèses (taux d'encadrement > 60 %)

- Aurélien Soubeyran : Thermodynamique des cavités salines lors du stockage du CO<sub>2</sub> et du O<sub>2</sub>, 2016 - ;
- Hafssa Tounsi : Modélisation thermo-hydro-mécanique de la congélation artificielle des terrains - Application au dimensionnement des ouvrages souterrains, 2015 - ;
- Paule Labaune : Comportement thermomécanique du sel gemme - Application au dimensionnement des cavités salines, 2014 - 2018 ;
- Mohamed Mahjoub : Prise en compte de l'anisotropie dans la modélisation du comportement thermo-hydro-mécanique des géomatériaux - Application à l'endommagement d'une argilite soumise à des surpressions hydrauliques, 2013 - 2017 ;
- Manon Vitel : Modélisation thermo-hydraulique de la congélation artificielle des terrains - Application à la mine d'uranium de Cigar Lake (Canada), 2011 - 2015.

### 6.2 Participation à l'encadrement de thèses (taux d'encadrement > 20 %)

- Houssam Dannawy : Comportement des roches sous chargement dynamique - Application au forage en conditions extrêmes, 2018 - ;
- Mejda Azabou : Comportement thermomécanique du sel gemme, 2017 - ;
- Anis El Murr : Étude du revêtement des cavités minées dans un stockage adiabatique d'air comprimé, 2010 - 2015 ;
- Florent Delille : Recherche d'une prédiction de fragmentation charge par charge pour les tirs à ciel ouvert, 2008 - 2012.

### 6.3 Encadrement de stages de recherche et de fin d'études

#### *Travaux d'option de MINES ParisTech :*

- Julia Roussoulières : Étude d'un stockage d'hélium en cavité saline, 2018 ;
- Omar Sentissi : Étude géotechnique des conditions d'exploitation du gisement d'Ebba Sud de la Mine de Cominak, 2018 ;

- Victor Richon : Étude de la stabilité de tunnels de production sous l’effet de la congélation et impacts sur leurs modes de soutènement, 2017 ;
- Dona Chlela : Optimisation du système de jet et prédiction du diamètre des cavités dans la mine de Cigar Lake, 2017 ;
- Guillaume Varvoux : Simulation thermique d’un problème de congélation artificielle des terrains, 2016 ;
- Chloé Bonnard : Étude du comportement thermomécanique d’une paroi saline : Essai *in situ* et simulations numériques, 2014 ;
- Tianyou Zhou : Optimisation de la méthode d’exploitation par jet d’eau à haute pression dans la mine d’uranium de McClean (Canada), 2012 ;
- Jean-Félix Hubert : Influence de la congélation des terrains sur la stabilité des ouvrages dans les mines d’uranium de Cigar Lake et McArthur River (Canada), 2009 ;
- Laura Blanco Martin : Modélisation du comportement mécanique des galeries expérimentales du laboratoire souterrain de l’ANDRA dans la Meuse/Haute Marne, 2008 ;
- Florent Delille : Étude des possibilités de stockage de résidus de traitement en cavités salines, 2007 ;
- Baptiste Fara : Le stockage des déchets radioactifs : Modélisation du soutènement par cintres, 2005.

#### **Autres stages :**

- Mohamed Mahjoub : Prise en compte de l’anisotropie dans la modélisation du comportement thermo-hydro-mécanique des géomatériaux, 2013 ;
- Gaëtan Russo : Étude de la fracturation de l’argilite de Bure soumise à des surpressions hydrauliques, 2012 ;
- Firas Ben Hassine : Problèmes thermiques autour des forages pétroliers, 2010 ;
- Victor Juarez : Stockage de gaz en cavités salines, 2009 ;
- Zied Lassoued : Modélisations des essais d’intégrité des cavités salines, 2009 ;
- Ons Zemni : Modélisation des massifs rocheux fissurés, 2007 ;
- Gonzague du Suau de la Croix : Modélisation de l’EDZ à Tournemire, 2005 ;
- Aymen Selmi : Étude des perturbations induites par le creusement d’ouvrages souterrains dans les argilites de Tournemire, 2005 ;
- Nguyen Si Hung : Fragmentation dynamique des roches, 2004 ;
- Do Trong Cuong : Rupture et endommagement différés des géomatériaux, 2004 ;
- Xuan Hong Vu : Fragmentation dynamique des roches, 2002.

## **7 Projets de recherche**

Je participe activement (initiation/montage/exécution) à la majorité des projets de recherche portés par l’équipe Géologie de l’Ingénieur et Géomécanique. Les derniers projets qui sont en lien direct avec le sujet de cette HDR sont les suivants :

- ANR SEARCH sur le stockage adiabatique de l’électricité sous forme d’Air Comprimé, conduit en collaboration avec Engie, Saint Gobin et le CEA ;
- ANR FLUIDSTORY sur le stockage en cavités salines du CO<sub>2</sub> et du O<sub>2</sub> nécessaire au concept EMO (Electrolyse-Méthanation-Oxycombustion), conduit en collaboration avec le BRGM, Areva-H2Gen, Géostock, Geogreen, le Laboratoire de Mécanique des Solides de l’Ecole Polytechnique et le Centre Thermodynamique des Procédés de MINES ParisTech ;
- GÉODÉNERGIE ROSTOCK-H sur l’étude de la faisabilité du stockage d’hydrogène



- en cavités salines, conduit en collaboration avec Air Liquide, Géostock, le laboratoire Géoressources de l'université de Lorraine et le Centre Thermodynamique des Procédés de MINES ParisTech ;
- SMRI STARFISH sur la fracturation du sel gemme sous l'effet de cycles thermiques, conduit en collaboration avec Storengy, l'INERIS, le groupe Salins et l'université Leibniz de Hanovre ;
  - CITEPH 20-2018 sur la maîtrise du comportement géomécanique du sel gemme pour l'optimisation du stockage de gaz en cavités salines, conduit en collaboration avec Storengy, Entropose, Engie, Doris engineering et Total ;
  - GÉODÉNERGIE STOPIL-H2 sur le développement d'un pilote industriel de stockage d'hydrogène en cavités salines en France, conduit en collaboration avec Storengy, Air Liquide, Géostock, l'INERIS, le BRGM, le Laboratoire de Mécanique des Solides de l'Ecole Polytechnique et le Centre Thermodynamique des Procédés de MINES ParisTech ;
  - CONGELATION sur la congélation artificielle des terrains pour des applications minières, conduit en collaboration avec Orano Mining (anciennement Areva Mines) ;
  - FRACTURATION ÉLECTRIQUE sur la fragmentation des roches par pulse électrique, en collaboration avec Soletanche Bachy et l'université de Dresde (Allemagne).

## 8 Publications scientifiques et techniques

### 8.1 Articles dans des revues à comité de lecture

- A20.** Rouabhi, A., Labaune, P., Tijani, M., Gatelier, N., & Hévin, G. (2019). Phenomenological behavior of rock salt : On the influence of laboratory conditions on the dilatancy onset. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 11 :723-738. <https://doi.org/10.1016/j.jrmge.2018.12.011>.
- A19.** Soubeyran, A., Rouabhi, A., & Coquelet, C. (2019). Thermodynamic analysis of carbon dioxide storage in salt caverns to improve the Power-to-Gas process. *Applied Energy*, 242 :1090-1107. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2019.03.102>.
- A18.** Tounsi, H., Rouabhi, A., Tijani, T., & Guérin, F. (2019) Thermo-Hydro-Mechanical modeling of artificial ground freezing : Application in mining engineering. *Rock Mechanics and Rock Engineering*. <https://doi.org/10.1007/s00603-019-01786-9>.
- A17.** Labaune, P., & Rouabhi, A. (2019). Dilatancy and tensile criteria for salt cavern design in the context of cyclic loading for energy storage. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 62 :314-329. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2018.10.010>.
- A16.** Abuaisha, M., & Rouabhi, A. (2019). On the validity of the uniform thermodynamic state approach for underground caverns during fast and slow cycling. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.07.074>
- A15.** Rachdi, S., Jahangir E., Tijani, E., & Rouabhi, A. (2019). Tunnelling-induced surface settlements : On the choice of the soil constitutive model *European Journal of Environmental and Civil Engineering*. <https://doi.org/10.1080/19648189.2019.1639078>
- A14.** Mahjoub, M., & Rouabhi, A. (2018). A hydromechanical approach for anisotropic elasto-viscoplastic geomaterials : Application to underground excavations in sedimentary rocks. *Underground Space*. <https://doi.org/10.1016/j.undsp.2018.06.001>.

- A13.** Rouabhi, A., Jahangir, E., & Tounsi, H. (2018). Modeling heat and mass transfer during ground freezing taking into account the salinity of the saturating fluid. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 120 :523-533. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.12.065> ;
- A12.** Blanco-Martín, L., Rouabhi, A., Billiotte, J., Hadj-Hassen, F., Tessier, B., Hévin, G., Balland, C. & Hertz, E. (2018). Experimental and numerical investigation into rapid cooling of rock salt related to high frequency cycling of storage caverns. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 102 :120-130. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2018.01.008>.
- A11.** Mahjoub, M., & Rouabhi, A. (2018). Modelling of anisotropic damage due to hydrogen production in radioactive waste disposal. *Environmental Geotechnics*, 5(3) :176-183. <https://doi.org/10.1680/jenge.17.00057>.
- A10.** Labaune, P., Rouabhi, A., Tijani, M., Blanco-Martín, L., & You, T. (2018). Dilatancy criteria for salt cavern design : A comparison between stress-and strain-based approaches. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 51(2) :599-611. <https://doi.org/10.1007/s00603-017-1338-4>.
- A9.** Mahjoub, M., Rouabhi, A., Tijani, M., Granet, S., M'jahad, S., & Talandier, J. (2017). Numerical Study of Callovo-Oxfordian Argillite Expansion due to Gas Injection. *International Journal of Geomechanics*, 18(1) :04017134. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)GM.1943-5622.0001050](https://doi.org/10.1061/(ASCE)GM.1943-5622.0001050).
- A8.** Rouabhi, A., Hévin, G., Soubeyran, A., Labaune, P., & Louvet, F. (2017). A multiphase multicomponent modeling approach of underground salt cavern storage. *Geomechanics for Energy and the Environment*, 12 :21-35. <https://doi.org/10.1016/j.gete.2017.08.002>.
- A7.** Vitel, M., Rouabhi, A., Tijani, M., & Guérin, F. (2016). Thermo-hydraulic modeling of artificial ground freezing : Application to an underground mine in fractured sandstone. *Computers and Geotechnics*, 75 :80-92. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2016.01.024>.
- A6.** Vitel, M., Rouabhi, A., Tijani, M., & Guérin, F. (2016). Modeling heat and mass transfer during ground freezing subjected to high seepage velocities. *Computers and Geotechnics*, 73 :1-15. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2015.11.014>.
- A5.** Mahjoub, M., Rouabhi, A., Tijani, M., & Granet, S. (2016). An approach to model the mechanical behavior of transversely isotropic materials. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 40(6) :942-961. <https://doi.org/10.1002/nag.2469>.
- A4.** Vitel, M., Rouabhi, A., Tijani, M., & Guérin, F. (2015). Modeling heat transfer between a freeze pipe and the surrounding ground during artificial ground freezing activities. *Computers and Geotechnics*, 63 :99-111. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2014.08.004>.
- A3.** Rouabhi, A., Tijani, M., Stab, O., Charnavel, Y., & You, T. (2008). A semi-analytical approach for modelling heat transfer during salt-cavern leaching process. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 32(13) :1617-1634. <https://doi.org/10.1002/nag.686>.
- A2.** Rouabhi, A., Tijani, M., & Rejeb, A. (2007). Triaxial behaviour of transversely isotropic materials : Application to sedimentary rocks. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 31(13) :1517-1535. <https://doi.org/10.1002/nag.605>.

- A1.** Rouabhi, A., Tijani, M., Moser, P., & Goetz, D. (2005). Continuum modelling of dynamic behaviour and fragmentation of quasi-brittle materials : Application to rock fragmentation by blasting. *International journal for numerical and analytical methods in geomechanics*, 29(7) :729-749. <https://doi.org/10.1002/nag.436>.

## 8.2 Articles soumis

- S2.** Tounsi, H., Rouabhi, A., & Jahangir, E. A laboratory investigation of the thermo-mechanical behaviour of frozen soils. *Cold Regions Science and Technology*.
- S1.** Tounsi, H., Rouabhi, A., & Jahangir, E. Thermo-Hydro-Mechanical modeling of artificial ground freezing taking into account the salinity of the saturating fluid. *Computers and Geotechnics*.

## 8.3 Articles en préparation

- P1.** Azabou, M., Rouabhi, A., & Blanco-Martín, L. Effect of insoluble materials on the phenomenological behavior of rock salt. *Computers and Geotechnics*.

## 8.4 Chapitres de livre

- L2.** Rouabhi, A., & Tijani, M. (2017). Modélisation thermo-hydraulique de la congélation artificielle des terrains. *Manuel de mécanique des roches Tome V - Thermomécanique des roches*. Presses des MINES.
- L1.** Hevin, G., Balland, C., Billiotte, J., Tessier, B., Hadj-Hassen, F., Rouabhi, A., Blanco-Martín, L., Staudtmeister, K., Leuger, B., Zapf, D., Hertz, E., Tribout D., & Thelier, N. (2017). Expérience de fissuration thermique dans une mine de sel. *Manuel de mécanique des roches Tome V - Thermomécanique des roches*. Presses des MINES.

## 8.5 Conférences avec actes

- C12.** Tounsi, H., Rouabhi, A., Tijani, M., & Guérin, F. (2019). 3D numerical modeling of artificial ground freezing in mining engineering. In World Tunnel Congress 2019.
- C11.** Blanco-Martín, L., Herchen, K., Rouabhi, A., Labaune, P., & Lux, K. H. (2018). Use of laboratory tests in constitutive models for rock salt : A focus on volumetric strains. In Mechanical Behavior of Salt IX.
- C10.** Labaune, P., Rouabhi, A., Tijani, M., Martín, L. B., & You, T. (2017). Comparison between stress-and strain-based dilatancy criteria for salt cavern design. In SMRI Fall Meeting.
- C9.** Mahjoub, M., Rouabhi, A., Tijani, M., & Granet, S. (2015). A damage model for transversely isotropic materials. In Petrus PhD Conference 2015.
- C8.** Vitel, M., Rouabhi, A., Tijani, M., & Guérin, F. (2014). A new approach for modeling heat transfer between a freeze pipe and the surrounding ground. In ISRM Regional Symposium-EUROCK 2014. International Society for Rock Mechanics and Rock Engineering.
- C7.** Mousset, C., Charnavel, Y., Hévin, G., & Rouabhi, A. (2014). Evaluating and improving the accuracy of salt cavern thermodynamic models using *in situ* downhole data.

In SMRI Technical Conference.

- C6. El Murr, A., Hadj-Hassen, F., **Rouabhi, A.**, & Tijani, M. (2013). A Fully coupled thermo-hydro-mechanical model for the analysis of the lining behavior of underground caverns in an AA-CAES system. In V International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering.
- C5. Hadj-Hassen, F., Tijani, M., **Rouabhi, A.**, & Hertz, E. (2012). Interpretation of convergence movement in room and pillar mining by integrating creep of salt and swelling of marl under water effect. In Mechanical Behaviour of Salt VII.
- C4. Tijani, M., Hadj-Hassen, F., **Rouabhi, A.**, Schleifer, J., & Gatelier, N. (2012). Effect of insoluble materials on salt behavior during creep tests. In Mechanical Behaviour of Salt VII.
- C3. Boualleg, R., Sellami, H., **Rouabhi, A.**, Menand, S., & Simon, C. (2007). Effect of rocks anisotropy on deviation tendencies of drilling systems. In 11th ISRM Congress. International Society for Rock Mechanics.
- C2. **Rouabhi, A.**, Tijani, M., Charnavel, Y., & You, T. (2007). Temperature modelling during salt cavern leaching process. In SMRI spring meeting.
- C1. Rejeb, A., Millard, A., **Rouabhi, A.**, & Tijani, M. (2006). Modelling approaches of the excavation damaged zone (EDZ) around the old tunnel at the argillaceous Tournemire site. In Proc. of the GeoProc Int. Conf. on Coupled THMC Processes in Geosystems (pp. 22-25).

## 8.6 Rapports scientifiques et techniques

- R35. **Rouabhi, A.** (2019). SOLETANCHE BACHY - Calcul thermique d'une tranchée. Rapport P190307AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R34. Kaplan, J., **Rouabhi, A.**, Thenevin, I. & Sellami, H. SOLETANCHE BACHY - Modeling of rock fracturing using Electropulse Direct Technology. Rapport R190201ITHE. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R33. **Rouabhi, A.** (2019). AIR LIQUIDE - Étude d'un stockage d'hélium en cavité saline. Rapport P190211AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R32. Hadj-Hassen, F. & **Rouabhi, A.** (2018). SALINS - Étude des conditions de stabilité du nouveau projet d'extension de la cavité S811. Rapport 20180615FHAD. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R31. **Rouabhi, A.**, Tijani, M., & Hadj-Hassen, F. (2016). SALINS - Mine de sel d'Einville au Jard. Mesures des déformations des piliers. Mise à jour du 15/12/2015. Rapport R160502AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R30. **Rouabhi, A.**, Tijani, M., & Hadj-Hassen, F. (2016). SALINS - Mine de Varangeville. Mesures des déformations des piliers. Mise à jour du 15/12/2015. Rapport R160429AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R29. L. Blanco Martin, **Rouabhi, A.**, Hadj-Hassen, F., & J. Billiotte (2016). SMRI - STARFICH project - Three-dimensional modeling of the *in situ* thermo-mechanical fracturing tests in Varangeville Mine, Rapport R160315LBLA. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R28. **Rouabhi, A.** (2015). TOTAL - Congélation de sols saturés de saumure : Application au dimensionnement d'une barrière étanche. Rapport R150601AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.

- R27. Rouabhi, A.** (2015) TOTAL - Optimisation du système de congélation à l'échelle d'un puits. Rapport R150702AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R26. Rouabhi, A.** (2015). TOTAL - Dimensionnement d'une barrière étanche par congélation artificielle des terrains. Rapport R151118AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R25.** Hadj-Hassen, F., **Rouabhi, A.**, & Tijani, M. (2015). NOVACARB - Étude géomécanique de l'exploitation extensive de sel par pistes stables dans la concession de Lenoncourt. Rapport R150215FHAD. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R24. Rouabhi, A.**, Hadj-Hassen, F., & Tijani, M. (2015). SOLVAY - Dimensionnement des cavités de stockage de gaz dans le site de Torrelavega. Rapport R150107FHAD. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R23. Rouabhi, A.** (2014). GÉOSTOCK - Une nouvelle loi de comportement des roches salines : Prise en compte du phénomène de dilatance. Rapport R141217AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R22.** Tijani, M., & **Rouabhi, A.** (2014). Action SDTE CARNOT 2010/00508 - Rhéologie du sel gemme. Rapport R140120MTIJ. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R21.** Hadj-Hassen, F., & **Rouabhi, A.**, Tijani, M. (2014). SALINS - Actualisation de l'étude de stabilité de la cavité F811 dans l'exploitation de sel par dissolution de Saint-Pandelon. Rapport R140430FHAD. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R20.** Hadj-Hassen, F., **Rouabhi, A.**, & Tijani, M. (2014). SALINS - Avis sur l'étude de 2001 concernant l'exploitation du champ de Gellenoncourt par foudroyage. Rapport R140613FHAD. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R19.** Hadj-Hassen, F., **Rouabhi, A.**, Tijani, M. (2013). SOLVAY - Étude de la subsidence et de la stabilité des cavités de la plateforme AT03 de l'exploitation de sel par dissolution dans la concession d'Attignat. Rapport R130717FHAD. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R18. Rouabhi, A.** (2012). SOLVAY - Note de synthèse sur le stockage d'air comprimé et de gaz naturel dans les cavités salines de Matacães - Torres Vedras, Portugal. Rapport R120316FHAD. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R17. Rouabhi, A.** (2012). STORENGY - Problèmes thermodynamiques liés aux stockages de fluides dans des cavités souterraines - Logiciel DEMETHER, Notice de Programmation - Utilisation. Rapport R120802AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R16. Rouabhi, A.** (2012). STORENGY - Problèmes thermodynamiques liés aux stockages de fluides dans des cavités souterraines - Notice de conception de DEMETHER. Rapport R120801AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R15. Rouabhi, A.** (2012). Projet ANR SEARCH - Thermodynamique de l'air humide : Caractérisation du système puits - cavité. Rapport R120803AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R14. Rouabhi, A.**, Tijani, M., & Hadj-Hassen, F. (2012). SALINS - Mine de sel d'Einville au Jard. Mesures des déformations des piliers. Mise à jour du 28/12/2012. Rapport R121228AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R13. Rouabhi, A.**, Tijani, M., & Hadj-Hassen, F. (2012). SALINS - Mine de Varangeville. Mesures des déformations des piliers. Mise à jour du 15/12/2012. Rapport R121215AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.

- 
- R12. Rouabhi, A.** (2011). SOLVAY - Stockage d'air comprimé et de gaz naturel dans les cavités salines de Matacães. Rapport R111230AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R11. Rouabhi, A.** (2009). STORENGY - Dilatance du sel gemme. Rapport R080403AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R10. Rejeb, A. Rouabhi, A., Millard, A., Maßmann, J., & Uehara, S.** (2008). DECOVALEX international project - Hydro-mechanical response of the Tournemire argillite to the underground openings excavation : Unsaturated zones and mine-by-test experiment. Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN).
- R9. Hadj-Hassen, F., Rouabhi, A., & Tijani, M.** (2007). SOLVAY - Dimensionnement de l'exploitation de sel par dissolution dans la concession d'Attignat. Rapport R070613FHAD. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R8. Rouabhi, A., & Rejeb, A.** (2007). IRSN - Cicatrisation des argilites. Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN).
- R7. Rouabhi, A., & Duchène, M.** (2006). BPB PLACO - Étude de la stabilité d'une galerie sous le bois de Bernouille suite a une éventuelle explosion d'un stock d'explosif. Rapport R060214AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R6. Rouabhi, A.** (2005). MODEX-REP european project - The hydro-mechanical behaviour of the Callovo-Oxfordian argilites and the numerical modelling of the shaft sinking. Rapport R051213AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R5. Rouabhi, A.** (2005). IRSN - Études expérimentale et théorique du comportement des argilites en vue de la compréhension des zones endommagées autour des ouvrages souterrains du site de Tournemire. Rapport R051216AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R4. Rouabhi, A., Tijani, M., & Hadj-Hassen, F.** (2005). SALINS - Étude de la possibilité d'extension de la cavité saline 811 a Dax. Rapport R050511MTIJ. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R3. Rouabhi, A.** (2004). LESSFINE european project - Numerical simulations of rock fragmentation by blasting. Rapport R040718AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R2. Rouabhi, A.** (2004). LESSFINE european project - Analysis and modelling of chamber blasting tests. Rapport R040719AROU. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.
- R1. Tijani, M., & Rouabhi, A.** (2002). LESSFINE european project - Mechanical behavior of rocks. Rapport R020920MTIJ. Centre de Géosciences, MINES ParisTech.

# Annexe B

## Publications choisies

---

- 1) **Rouabhi, A.**, Tijani, M., Moser, P., & Goetz, D. (2005). Continuum modelling of dynamic behaviour and fragmentation of quasi-brittle materials : Application to rock fragmentation by blasting. *International journal for numerical and analytical methods in geomechanics*, 29(7) :729-749. <https://doi.org/10.1002/nag.436>.
- 2) **Rouabhi, A.**, Tijani, M., & Rejeb, A. (2007). Triaxial behaviour of transversely isotropic materials : Application to sedimentary rocks. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 31(13) :1517-1535. <https://doi.org/10.1002/nag.605>.
- 3) **Rouabhi, A.**, Labaune, P., Tijani, M., Gatelier, N., & Hévin, G. (2019). Phenomenological behavior of rock salt : On the influence of laboratory conditions on the dilatancy onset. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 11 :723-738. <https://doi.org/10.1016/j.jrmge.2018.12.011>.
- 4) **Rouabhi, A.**, Hévin, G., Soubeyran, A., Labaune, P., & Louvet, F. (2017). A multiphase multicomponent modeling approach of underground salt cavern storage. *Geomechanics for Energy and the Environment*, 12 :21-35. <https://doi.org/10.1016/j.gete.2017.08.002>.
- 5) **Rouabhi, A.**, Jahangir, E., & Tounsi, H. (2018). Modeling heat and mass transfer during ground freezing taking into account the salinity of the saturating fluid. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 120 :523-533. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.12.065> ;

# Continuum modelling of dynamic behaviour and fragmentation of quasi-brittle materials: application to rock fragmentation by blasting

A. Rouabhi<sup>1,\*†</sup>, M. Tijani<sup>1</sup>, P. Moser<sup>2</sup> and D. Goetz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centre de Géotechnique et d'Exploitation du Sous-Sol, Ecole des Mines de Paris, France

<sup>2</sup>Department of Mining Engineering, University of Leoben, Austria

## SUMMARY

Fragmentation plays an important role in a wide variety of industrial processes such as blasting, demolition, crushing, cutting, etc., in which one desires to cause fragmentation in the most efficient and controlled manner. Nevertheless, a consistent theoretical description of this process is not yet available. In this paper, we present a computational methodology to simulate both the behaviour and the fragmentation of quasi-brittle materials, such as rocks and concrete, under dynamic loadings. We consider that the fragmentation process is a natural extension of the fracture process. In order to describe the dynamic fracture process, a suitable phenomenological constitutive model is developed and implemented in a finite element code. Concerning the dynamic fragmentation, a general formulation of predicting the fragment size distribution is provided. This formulation is based on a post-processing analysis of the history of the material's thermodynamic state. The complete approach is then applied to the modelling of the fragmentation of chamber blasting tests of limestone cylindrical samples. Copyright © 2005 John Wiley & Sons, Ltd.

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

## 1. INTRODUCTION

A fragment is produced by the intersection of a number of cracks, each crack forming surfaces on two adjacent fragments. Therefore, the fragmentation can be viewed as the natural extension of the fracture process. The most successful approach dealing with fracture is the fracture mechanics which has been extremely successful in cases where the behaviour of a single, large crack in brittle material is of prime interest. However, the response of a system of cracks under stress-wave loading is less well understood. For such cases, considerable efforts have been directed toward developing continuum (see, e.g. References [1, 2]), discontinuum (see, e.g. References [3, 4]) and continuum-discontinuum [5] descriptions of fracture, fragmentation, and

\*Correspondence to: Ahmed Rouabhi, Centre de Géotechnique et d'Exploitation du Sous-Sol, Ecole des Mines de Paris, 35, Rue Saint-Honoré - 77305 Fontainebleau Cedex, France.

†E-mail: ahmed.rouabhi@ensmp.fr



wave propagation to evaluate complex fracturing events. Others workers have preferred to apply a micro-statistical fracture mechanics approach [6] to the problem of dynamic failure and fragmentation of solids. Until now, as far as the authors know, the most appropriate approach has not been identified. Currently, there are a variety of numerical models dealing with fracture and fragmentation which are far from achieving the ultimate goal to get reliable and accurate prediction of the fragment size distribution from the set of geometry parameters, material properties (dynamic and static), initial conditions and boundary conditions. It is outside the scope of this paper to describe all the models available in the literature.

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

This approach will be used to predict the particle size distributions of laboratory blasting tests. These tests concern the fragmentation of cylindrical limestone samples which are blasted with a constant diameter PETN charge. The blasted material was collected and in some cases a rebuilding attempt was made. Figure 1 shows typical results of such rebuilding obtained from the blasting of a cylindrical and a cubical sample. Both figures show a radial fractured region and a material missing zone which indicates that, near the blasthole, the fracture process is so intense that any rebuilding attempt failed. It is widely accepted that this zone is the result of compressive shear loadings. In this study, the response of the structure was our main interest. At present, the proposed model cannot handle the interaction between solid and fluid (detonation



Figure 1. Rebuilt cylindrical and cubical samples.

gases) problems. Then, the blast loading is taken into account by using a defined pressure–time history on the borehole wall.

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

Concerning the dynamic fragmentation, a general formulation of predicting the fragment size distribution is provided [7]. In this formulation, a mean fragment size is linked to a mechanical quantity, which is assumed to be the origin of the fragmentation process, by an intrinsic function, referred to us as the *fragmentation law*, which can be identified by using suitable laboratory fragmentation tests. The mechanical quantity is given by the resolution of the Initial Boundary-Value Problem where the developed constitutive model is considered.

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

## 2. BASIC FORMULATION OF THE DYNAMIC FRAGMENTATION PROBLEM

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

$$M(s) = \int_{\Omega} \Phi(s, s_m(\mathbf{x}), \alpha(\mathbf{x})) \, dm \quad (1)$$

where  $s_m$  is the mean or average fragment size at a given position  $\mathbf{x} \in \Omega$ ;  $\alpha$  the shape factor at a given position  $\mathbf{x} \in \Omega$ ;  $\Phi$  the specific cumulative mass; and  $dm$  the elementary mass.

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

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

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

The relative cumulative passing in % of mass having a size less than or equal to  $s$  is

$$PA(s) = 100 \times \frac{M(s)}{\int_{\Omega} dm} \quad (3)$$

Now, our key feature to deal with the dynamic fragmentation under complex loadings is to assume that we can characterize the fragmentation event by the prediction of the mean fragment size  $s_m$  which can be related, at the *local level*, to a mechanical quantity  $G$  (strain rate, strain energy, etc.). This relationship can be written formally as

$$s_m(\mathbf{x}) = \psi(G(\mathbf{x})) \quad \text{in } \Omega \quad (4)$$

$\psi$  is an *intrinsic* (only material dependent) scalar positive function which can be identified by considering special fragmentation tests. Concerning the mechanical quantity, it should be calculated by the resolution of the Initial Boundary-Value Problem. Furthermore, we introduce a critical mechanical quantity  $G_d$  to distinguish between dynamic and static fragmentation. In fact, at very low rates of loading, most materials resist the fracture until a critical stress is reached. This is the static failure regime, in which fragmentation is dominated by the growth of a single weakest flaw. The dynamic regime is entered when growth of this flaw cannot relieve the applied loading, stresses rise in the adjacent material, and new flaws begin to nucleate and grow. This transition between static and dynamic regime is evidently not easy to be detected. However, in our model, the critical mechanical quantity can be related to the transition strain rate determined for many materials by using techniques at high strain rates such as the Split Hopkinson Pressure Bar Technique.

With this consideration, Equation (1) becomes

$$M(s) = \int_{\Omega^{\star}} \phi(s, s_m(\mathbf{x}), \alpha) \rho(\mathbf{x}) d\Omega^{\star} \quad (5)$$

where  $\Omega^{\star}$  is defined as

$$\Omega^{\star} = \{\mathbf{x} \in \Omega / G(\mathbf{x}) \geq G_d\} \quad (6)$$

Equation (5) may also be rewritten as

$$M(s) = \int_{\Omega} \mathcal{H}(G(\mathbf{x}) - G_d) \phi(s, s_m(\mathbf{x}), \alpha) \rho(\mathbf{x}) d\Omega \quad (7)$$

where  $\mathcal{H}$  is the Heaviside function and  $\rho$  is the material density.

### 3. FRAGMENTATION LAW

In the present approach, we assume that the mechanical quantity  $G$  is the strain energy density (strain energy per unit volume). In what follows we shall be concerned with the form of the fragmentation law. Let us consider a body  $\Omega$  of volume  $V$  which is subjected to a homogeneous loading. Let  $[0, T] \subset \mathbb{R}_+$  be the time interval of interest. We assume that  $\Omega$  will be fragmented into equal particles of size  $s_m$ . The state of deformation of the body can be described by the energy dissipated during the deformation process which can be expressed as

$$G(\mathbf{x}) = \int_0^T \underline{\sigma} : \underline{\dot{\epsilon}} d\tau, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (8)$$

Here, a dot denotes the rate with respect to time.  $\underline{\underline{\sigma}}$  and  $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$  are respectively the stress and the strain rate tensors. Therefore, the total strain energy in the domain  $\Omega$  is

$$W = \int_{\Omega} G(\mathbf{x}) dV \quad (9)$$

Since the deformation state within the body is homogeneous, Equation (9) becomes

$$W = GV \quad (10)$$

In accordance with the theory originally advanced by Griffith (1920), we suppose that the total energy is used to create new surfaces, thus

$$W = GV = A\gamma \quad (11)$$

where  $A$  and  $\gamma$  are, respectively, the total new created surface and the surface energy density which is a material parameter. On the other hand, we have

$$\frac{V}{A} = \frac{v}{a} \quad (12)$$

where  $v$  and  $a$  are, respectively, the volume and the surface of one fragment. For spherical fragments we have  $6V = As_m$ . Since the particle's shape is more complex than the spherical one, we suppose the following expression

$$\frac{V}{A} = cs_m^{1/n}, \quad n > 0, \quad c > 0 \quad (13)$$

Finally, combining Equations (11) and (13), the fragmentation law which relate the mean fragment size to the strain energy density  $G$  can be expressed as

$$s_m(\mathbf{x}) = \kappa G(\mathbf{x})^{-n} \quad (14)$$

where  $\kappa$  and  $n$  are material parameters which can be identified by using appropriate fragmentation tests.

#### 4. CONSTITUTIVE MODELLING

*Notation:* throughout this section, the number of underlines beneath a symbol indicates the tensorial order of that variable. Superscript <sup>t</sup> indicates the transpose operation, while 'Tr' is the trace operator. Symbol ':' denote the inner product with double contraction, e.g.  $\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\epsilon}} = \sigma_{ij}\epsilon_{ji}$ ,  $(\underline{\underline{H}} : \underline{\underline{\epsilon}})_{ij} = H_{ijkl}\epsilon_{lk}$  where the index denote cartesian components and repeated subscript imply summation unless otherwise indicated. Symbol '.' denote the outer product with single contraction, e.g.  $(\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{\epsilon}})_{ij} = \sigma_{ik}\epsilon_{kj}$ . The dyadic or tensor product is indicated with ' $\otimes$ ', e.g.  $(\underline{\underline{\sigma}} \otimes \underline{\underline{\epsilon}})_{ijkl} = \sigma_{ij}\epsilon_{kl}$ , whereas ' $\otimes$ ' denotes the symmetrized dyadic product defined as  $\underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}} : \underline{\underline{C}} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{C}}^s \cdot \underline{\underline{B}}$ , for any arbitrary second-order tensors  $\underline{\underline{A}}$ ,  $\underline{\underline{B}}$ ,  $\underline{\underline{C}}$ , where  $\underline{\underline{C}}^s = (\underline{\underline{C}} + \underline{\underline{C}}^t)/2$  is the symmetric part of  $\underline{\underline{C}}$ .  $\underline{\underline{I}}$  is the second-order identity tensors.

It is not a trivial task to derive proper material law for quasi-brittle materials in the three-dimensional stress state and which can be used in the hole range of loadings (from quasi-static to dynamic). Materials such as concrete and rocks undergo elastic, plastic and viscous behaviour, they are anisotropic, brittle in tension as well as in shear and ductile under high pressure. In recent years there has been a tremendous effort aimed at developing accurate models that predict the response of such materials under various loading conditions. Most of them are of the

phenomenological type. The aim of a phenomenological model is to reproduce mathematically the macroscopic stress–strain relations for different loading conditions, neglecting the microscopic mechanism of the behaviour. The plasticity/viscoplasticity and the damage approaches falls into this category.

In order to estimate stress wave induced fracturing, a coupled elasto-viscoplastic and rate dependent damage model has been developed. Within the regime of load application, an isotropic elasticity tensor is used to govern the elastic material behaviour. A pressure-dependent elasto-viscoplastic model is used for compressive regime. A second order tensor measure of damage is used to represent the anisotropic degradation of the elasticity tensor under tensile regime. Only the isothermal case will be considered.

#### 4.1. Rate-dependent plasticity theory applied to modelling quasi-brittle materials behaviour under compressive loading

The material behaviour is assumed to be isotropic during the entire deformation history. We assume that the softening behaviour of quasi-brittle materials is a purely material property. Isotropic softening will be considered and it will be controlled by the change of the uniaxial compressive strength. Furthermore, we assume the additive decomposition of the total strain tensor  $\underline{\underline{\varepsilon}}$  into elastic and viscoplastic parts, respectively, denoted by  $\underline{\underline{\varepsilon}}^e$  and  $\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}$ :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}^e + \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp} \quad (15)$$

For linearized elasticity, the stress tensor  $\underline{\underline{\sigma}}$  can be written as

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\mathbb{H}}} : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}) \quad (16)$$

where  $\underline{\underline{\mathbb{H}}}$  is the elasticity tensor which, in the case of isotropic behaviour, is given by

$$\underline{\underline{\mathbb{H}}} = \lambda \underline{\underline{\mathbb{I}}} \otimes \underline{\underline{\mathbb{I}}} + 2\mu \underline{\underline{\mathbb{I}}} \otimes \underline{\underline{\mathbb{I}}} \quad (17)$$

where  $\lambda$  and  $\mu$  are the Lamé elastic parameters. In classical plasticity/viscoplasticity,  $\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}$  always denotes a vector parallel to the normal of a smooth scalar potential function  $Q = Q(\underline{\underline{\sigma}})$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp} = \dot{\gamma} \underline{\underline{m}}(\underline{\underline{\sigma}}) = \dot{\gamma} \frac{\partial Q}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}(\underline{\underline{\sigma}}) \quad (18)$$

The parameter  $\dot{\gamma} \geq 0$  is the plastic multiplier. For the establishment of this evolution law, the only restriction that must be fulfilled is the dissipation inequality given by the Clausius–Duhem inequality which, in this case, can be reduced to

$$\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{m}} \geq 0 \quad (19)$$

In this study, the Drucker–Prager potential function is selected

$$Q(\underline{\underline{\sigma}}) = \frac{\beta + 2}{\sqrt{6}} \|\underline{\underline{s}}\| + \frac{\beta - 1}{3} \text{Tr}(\underline{\underline{\sigma}}) \quad (20)$$

where  $\underline{\underline{s}}$  is the deviatoric stress tensor and  $\beta \geq 1$  is a material parameter. For the plastic multiplier, it will be assumed to be expressed as

$$\dot{\gamma}(\underline{\underline{\sigma}}, \xi) = v_c \left[ 1 - \exp \left( - \left\langle \frac{\mathbf{F}(\underline{\underline{\sigma}}, \xi)}{R_c(\xi)} \right\rangle^{n_c} \right) \right] \quad (21)$$

where  $\langle x \rangle = \max(x, 0)$ ,  $\xi$  is a scalar variable characterizing the isotropic softening viscoplasticity

and  $\mathbf{F}(\underline{\underline{\sigma}}, \xi)$  is the Mohr–Coulomb yield function given by the following expression:

$$\mathbf{F}(\underline{\underline{\sigma}}, \xi) = K\sigma_1 - \sigma_3 - R(\xi) \quad \text{for } \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3 \quad (22)$$

$K \geq 1$ ,  $v_c$  and  $n_c$  are material parameters.  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  and  $\sigma_3$  are the principal stresses.  $v_c$  represents the maximum viscoplastic rate. This parameter is introduced to agree with the concept of the ultimate fracture velocity [9, 10].  $R_c$  is the uniaxial compressive strength which is assumed to be a decreasing function of  $\xi$ .

It is noteworthy that the Clausius–Duhem dissipation inequality (19) is satisfied if the following condition is fulfilled:

$$\beta \geq 2 \times \frac{1 + \bar{K}}{2 - \bar{K}} \quad \text{with } \bar{K} = \frac{K - 1}{\sqrt{K^2 + K + 1}} \quad (23)$$

For the isotropic softening, it will be controlled by the change of the uniaxial compressive strength, thereby translating the failure surface along the hydrostatic axis (away from the tensile region) to finally arrive at a residual state. The reduction of the compressive strength is assumed to be given by the following relationship:

$$R(\xi) = R_c[\alpha + (1 - \alpha)\exp(-\omega_c \xi^2)], \quad \alpha \in [0, 1], \quad \omega_c \geq 0 \quad (24)$$

where  $R_c$ ,  $\alpha$  and  $\omega_c$  are material parameters. Finally,  $\dot{\xi}$  is defined as follows:

$$\dot{\xi} = \frac{\|\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}^{\text{vp}}\|}{\sqrt{1 + \beta^2/2}} \quad (25)$$

#### 4.2. Damage theory applied to modelling quasi-brittle materials behaviour under tensile loading

When we deal with tensile loading, the formation of cracks induces a directional bias to the material structure as can be seen in Figure 1. In fact, tensile loading in one direction leaves the tensile capacity intact in the transverse direction, the evolution of the corresponding yield surface in the stress space by an isotropic softening rule is questionable. To overcome this difficulty, several approaches have been investigated. Among them, one can find the use of the damage theory with a higher order damage tensor. The second-order symmetric damage tensors are the most commonly employed because they are mathematically simpler and yet can describe most essential features of anisotropic damage. Though this second-order damage tensor cannot describe a more complicated damage state than orthotropy, it has been often employed in the development of anisotropic damage theories [11–14], to cite only a few.

In what follows, we will use the following damage tensor:

$$\underline{\underline{\Theta}} = \sum_{i=1}^3 \Theta_i \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i \quad (26)$$

where  $\Theta_i$  and  $\mathbf{n}_i$  are, respectively, the principal values and the unit vectors of principal directions of the tensor  $\underline{\underline{\Theta}}$ .

The relation between effective stress  $\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}$  and effective strain  $\underline{\underline{\tilde{\epsilon}}}$  describes the constitutive behaviour of the undamaged material, which for the sake of simplicity, is assumed to be linear elastic and isotropic

$$\underline{\underline{\tilde{\sigma}}} = \underline{\underline{\mathbb{H}}}_0 : \underline{\underline{\tilde{\epsilon}}} = 2\mu\underline{\underline{\tilde{\epsilon}}} + \lambda \text{Tr}(\underline{\underline{\tilde{\epsilon}}}) \quad (27)$$

where  $\underline{\underline{H}}_0$  is the Hook isotropic elasticity tensor of the undamaged material. The relation between nominal stress  $\underline{\underline{\sigma}}$  and nominal strain  $\underline{\underline{\varepsilon}}$  describes the constitutive behaviour of the damaged material

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{H}}(\underline{\underline{\Theta}}) : \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (28)$$

where  $\underline{\underline{H}}_0$  is the Hook elasticity tensor for the damaged material. The nominal stress tensor  $\underline{\underline{\sigma}}$  was related to the effective stress tensor  $\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}$  by considering the linear transformation given by Cordebois and Sidoroff [11]

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\Theta}}^{-1/2} \cdot \underline{\underline{\tilde{\sigma}}} \cdot \underline{\underline{\Theta}}^{-1/2} \quad (29)$$

In order to find the relation between nominal strain tensor and effective strain tensor, the energy equivalence concept was used and the following equation was obtained:

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\Theta}}^{1/2} \cdot \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}} \cdot \underline{\underline{\Theta}}^{1/2} \quad (30)$$

Combining Equations (29) and (30) with Equation (27), Equation (28) becomes

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\mu\underline{\underline{\Theta}}^{-1} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}} \cdot \underline{\underline{\Theta}}^{-1} + \lambda(\underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\Theta}}^{-1})\underline{\underline{\Theta}}^{-1} \quad (31)$$

Note that, Equation (31) together with Equation (28) lead to the following expression of the stiffness tensor:

$$\underline{\underline{H}}(\underline{\underline{\Theta}}) = \lambda\underline{\underline{\Theta}}^{-1} \otimes \underline{\underline{\Theta}}^{-1} + 2\mu\underline{\underline{\Theta}}^{-1} \underline{\underline{\Theta}} \underline{\underline{\Theta}}^{-1} \quad (32)$$

$\underline{\underline{\Theta}}$  is considered as an internal state variable which characterises the anisotropic phenomenon of microcrack distribution in the material. In order to establish a thermodynamically consistent evolution law of this internal variable, the only thermodynamic restriction to be fulfilled is the Clausius–Duhem dissipation inequality which, in this case, can be written as

$$\underline{\underline{w}} : \dot{\underline{\underline{\Theta}}} \geq 0 \quad (33)$$

where  $\underline{\underline{w}}$  is the thermodynamic conjugate force associated to the state variable  $\underline{\underline{\Theta}}$  and which can be expressed as

$$\underline{\underline{w}} = \frac{1+\nu}{E} \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{\Theta}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} - \frac{\nu}{E} (\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\Theta}}) \underline{\underline{\sigma}} \quad (34)$$

This force has no clear physical meaning, which makes it difficult to propose and interpret damage rules [15]. This reason motivates Carol *et al.* [14] to suggest a new internal state variable  $\underline{\underline{L}}$ . This variable is a function of the history up to time  $t$  of the damage tensor  $\underline{\underline{\Theta}}$  and is given by the following differential equation:

$$\dot{\underline{\underline{L}}} = 2\underline{\underline{\Theta}}^{-1/2} \cdot \dot{\underline{\underline{\Theta}}} \cdot \underline{\underline{\Theta}}^{-1/2} \quad \text{with } \underline{\underline{L}}(t=0) = \underline{\underline{0}} \quad (35)$$

Thus, the new thermodynamic conjugate force corresponding to  $\underline{\underline{L}}$  can be simply expressed as

$$\underline{\underline{a}} = \frac{1}{2} \underline{\underline{\Theta}}^{1/2} \cdot \underline{\underline{w}} \cdot \underline{\underline{\Theta}}^{1/2} = \frac{1}{2} \underline{\underline{\tilde{\sigma}}} \cdot \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}} \quad (36)$$

Note that this conjugate force has the same principal axes as  $\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}$  and  $\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}$  and its first invariant is equal to the elastic stored energy

$$a_i = \frac{1}{2} \tilde{\sigma}_i \tilde{\varepsilon}_i \text{ (no summation)}, \quad \text{Tr}(\underline{\underline{a}}) = \frac{1}{2} \underline{\underline{\tilde{\sigma}}} : \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}} = \frac{1}{2} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (37)$$

With these considerations, inequality (33) becomes

$$\underline{\underline{w}} : \dot{\underline{\underline{\Theta}}} = \underline{\underline{a}} : \dot{\underline{\underline{L}}} \geq 0 \quad (38)$$

As given by Equation (36),  $\underline{q}$  does not distinguish between tension and compression, which is a fundamental aspect of quasi-brittle material's behaviour. In order to handle this restriction, Carol *et al.* [14] propose to redefine the conjugate force as follows:

$$\underline{q} = \frac{1}{2} \langle \tilde{\underline{\sigma}} \rangle \cdot \langle \tilde{\underline{\varepsilon}} \rangle \quad (39)$$

It is clear from Equation (39) that the principal values  $a_k$  of  $\underline{q}$  are positive.

Finally, with these considerations, we introduce the following damage evolution law:

$$\dot{\underline{L}} = \sum_{k=1}^3 \dot{\gamma}_d(a_k) \tilde{\underline{n}}_k \otimes \tilde{\underline{n}}_k \quad (40)$$

where  $\tilde{\underline{n}}_k$  are the principal directions of  $\underline{q}$ . For the plastic multiplier, we will use a similar definition of that used in the viscoplastic compression model

$$\dot{\gamma}_d(a_k) = v_d \left[ 1 - \exp \left( - \left\langle \frac{a_k}{R_d} - 1 \right\rangle^{n_d} \right) \right] \quad (41)$$

where  $v_d$ ,  $R_d$  and  $n_d$  are material parameters.  $v_d$  represents the maximum damage rate associated with the material microcracking.

Using evolution law given by Equation (40), and noting that  $x\dot{\gamma}_d(x) \geq 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^+$ , we can prove easily that inequality (38) is satisfied:

$$\underline{q} : \dot{\underline{L}} = \sum_{k=1}^3 a_k \tilde{\underline{n}}_k \otimes \tilde{\underline{n}}_k : \sum_{k=1}^3 \dot{\lambda}_d(a_k) \tilde{\underline{n}}_k \otimes \tilde{\underline{n}}_k = \sum_{k=1}^3 a_k \dot{\lambda}_d(a_k) \geq 0 \quad (42)$$

#### 4.3. Coupled response of the elasto-viscoplastic and the rate-dependent damage models

In this section, we try to link the independent models developed earlier. As the first step, we assume the additive decomposition of the total nominal strain tensor

$$\underline{\varepsilon} = \underline{\varepsilon}^e + \underline{\varepsilon}^{vp} \quad (43)$$

On the other hand, the relation between effective stress  $\tilde{\underline{\sigma}}$  and effective elastic strain  $\tilde{\underline{\varepsilon}}^e$ , which describes the constitutive behaviour of the undamaged material, is assumed to be expressed as

$$\tilde{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{H}}_0 : \tilde{\underline{\varepsilon}}^e = 2\mu \tilde{\underline{\varepsilon}}^e + \lambda \text{Tr}(\tilde{\underline{\varepsilon}}^e) \underline{\underline{I}} \quad (44)$$

The relation between nominal stress  $\underline{\sigma}$  and nominal elastic strain  $\underline{\varepsilon}^e$  describes the constitutive behaviour of the damaged material

$$\underline{\sigma} = \underline{\underline{H}}(\underline{\Theta}) : \underline{\varepsilon}^e \quad (45)$$

The effective stress tensor is related to the nominal stress tensor by Equation (29). The energy equivalence approach allows us to find the relationship between the effective elastic strain tensor and the nominal elastic strain tensor

$$\tilde{\underline{\varepsilon}}^e = \underline{\underline{\Theta}}^{-1/2} \cdot \underline{\varepsilon}^e \cdot \underline{\underline{\Theta}}^{-1/2} \quad (46)$$

Finally, the Clausius–Duhem dissipation inequality becomes, in this case

$$\underline{\sigma} : \dot{\underline{\varepsilon}}^{vp} + \underline{q} : \dot{\underline{L}} \geq 0 \quad (47)$$



where  $\underline{a}$  can take the following new form

$$\underline{a} = \frac{1}{2} \langle \underline{\tilde{\sigma}} \rangle \cdot \langle \underline{\tilde{\varepsilon}}^e \rangle \quad (48)$$

It is noteworthy that the last inequality is the sum of the viscoplastic dissipation and the damage dissipation. Thus, if we consider the evolution laws of  $\underline{\varepsilon}^{vp}$  and  $\underline{L}$  given, respectively, by Equations (18) and (40), inequality (47) will be respected.

#### 4.4. Stiffness recovery

The previous model presumes that damage is always active, i.e. damage continues to grow whether the microcracks are open or closed. However, it is obvious that damage is promoted mainly in the tensile stress regime, whereas compressive stresses tend to close the microcracks. This scenario motivates the introduction of a unilateral condition, i.e. the active/passive condition, due to the microcrack–closure–reopening effect.

A common approach in the literature for discerning the different response in tension and compression is to extract the tensile stresses or strains by introducing projection operators [16]. In this study, we select a second-order projection operator defined as

$$\underline{P} = \sum_{k=1}^3 \mathcal{H}(\varepsilon_k^e) \mathbf{n}_k \otimes \mathbf{n}_k \quad (49)$$

$\varepsilon_k^e$  are the principal values of the nominal elastic strain tensor and  $\mathbf{n}_k$  are its principal directions.

Using this projection operator, we define an active damage tensor as follows:

$$\underline{\Theta}^{ac} = \underline{I} + \underline{P}[\underline{\Theta} - \underline{I}]\underline{P} \quad (50)$$

After this definition, three basic properties of  $\underline{\Theta}^{ac}$  can be mentioned

1. For undamaged state:  $\underline{\Theta}^{ac} = \underline{\Theta} = \underline{I}$ .
2. For triaxial compression ( $\underline{P} = \underline{0}$ ):  $\underline{\Theta}^{ac} = \underline{I}$ .
3. For triaxial tension ( $\underline{P} = \underline{I}$ ):  $\underline{\Theta}^{ac} = \underline{\Theta}$ .

#### 4.5. Uniaxial computational results

The present model has been implemented in a transient dynamic finite element code VIPLEF3D [17]. In this numerical tool, the time derivative, arising in the local form of the momentum equations, is replaced by the well-known Newmark algorithm. Large strain computation was taken into account by decomposing the body motion into small steps and by updating not only the body's geometry but also the stress state. Given the complexity of the constitutive relations and their aim which is to model quasi-brittle materials in fast dynamics, we have chosen to implement an explicit scheme because time integration needs to be extremely fast in 3D transient dynamics where time increments are very small and where the number of degree of freedom is very high.

In order to demonstrate the capability of the model to reproduce the major characters of the macroscopic behaviour of quasi-brittle materials, uniaxial computational tests is considered. In this section values of material parameters have been selected for illustrative purposes only. Figure 2 illustrates the applied strain–time curve. The result of this loading is reported in Figure 3. As shown, damage controls the response under tension, while plasticity is active under compression. Under tension regime the material unloads at the degraded secant stiffness. Under

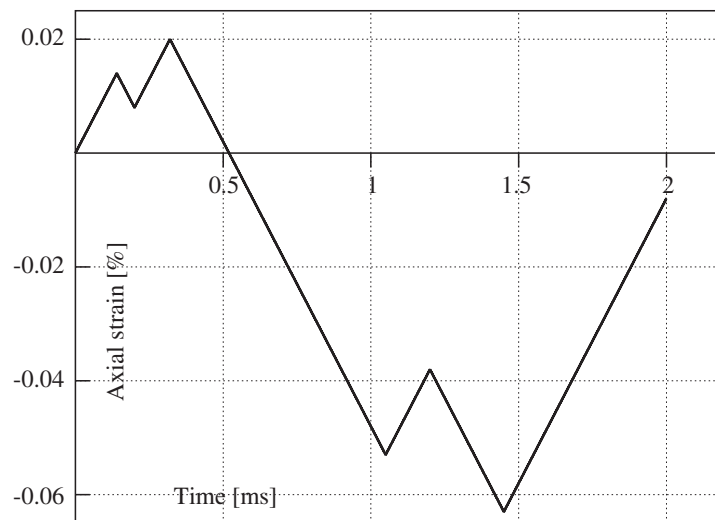


Figure 2. Applied strain for uniaxial tests.

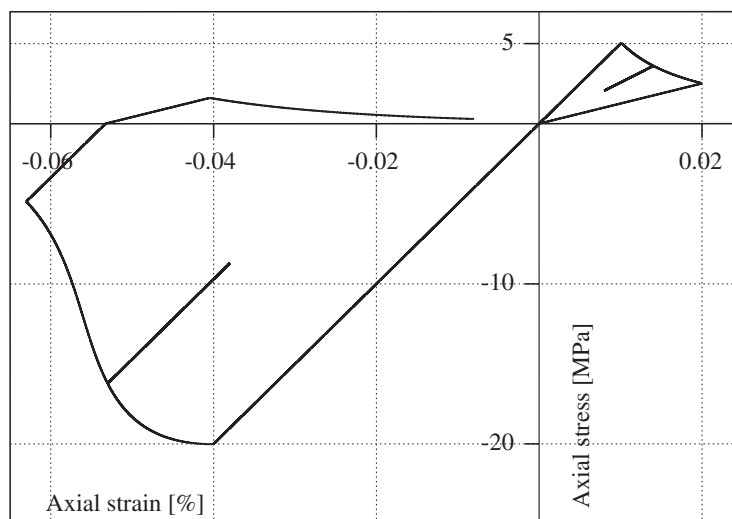


Figure 3. Model response for uniaxial tests.

compressive regime the elastic stiffness is recovered simulating the closing of microcracks. Once the compressive stress exceeds the yield stress, the material exhibits a softening plastic response. Upon reversing the strain path, the stress follows the elastic response with the undamaged secant stiffness. When the loading cycle is back to tension, the degraded secant stiffness is recovered, simulating the re-opening of the microcracks. Note that all tests were carried out with a constant slow strain rate.

Figure 4 shows the response of the model under various strain rates. As it can be seen, the response is dependent upon the strain rate. In Figure 5 the dynamic increase factor (DIF), i.e. the ratio of the dynamic to static strength, is reported, in a semi-log plot, as function of strain rate. These results are in agreement with experiments commonly found in the literature [18–30].

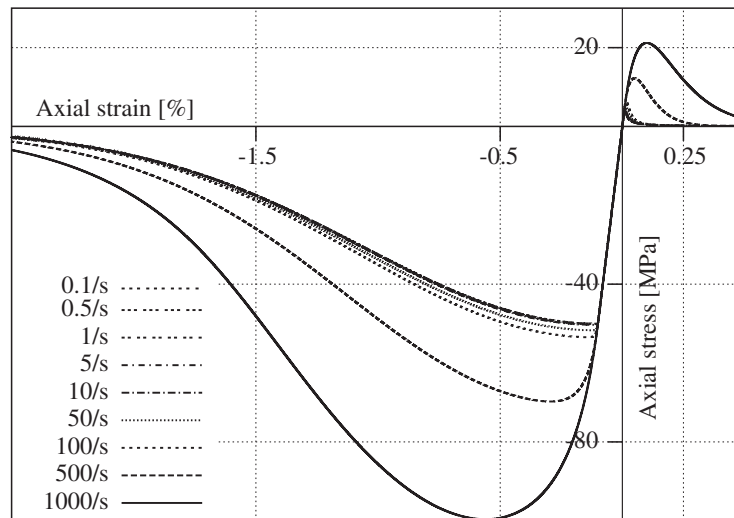


Figure 4. Model response under several strain rates.

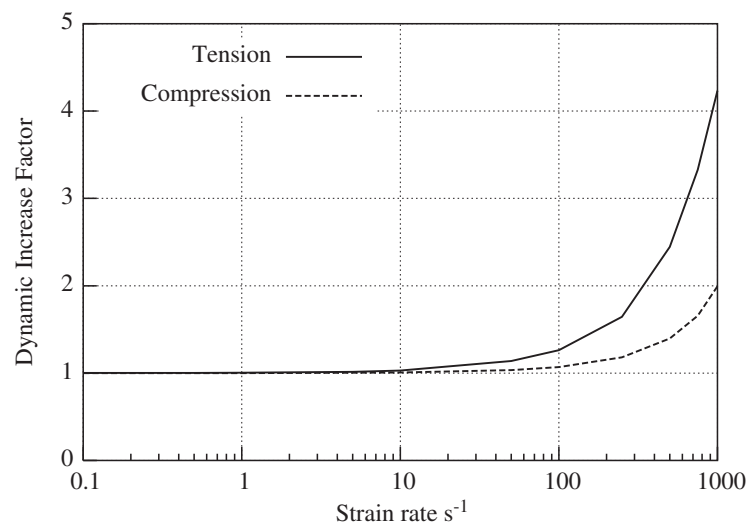


Figure 5. Dynamic increase factor.

## 5. EXPLOSIVE–MATERIAL INTERACTION: BOUNDARY CONDITIONS

At present, the proposed model cannot handle the interaction between solid and fluid (detonation gases) problems. Then, the blast loading is taken into account by using a defined pressure–time history on the borehole wall. The key feature to handle the characteristics of the loading pulse was to assume that the mechanical energy transmitted by the explosive to the surrounding media cannot, in no case, exceed the chemical energy released by the detonation. This chemical energy can be estimated by considering the Chapman–Jouguet state. If we assume that the detonation gases can be described by the polytropic equation of state with a polytropic gas constant  $\gamma$ , then the specific chemical energy released by the detonation can be

approximated by [31]

$$e_0 = \frac{D^2}{2(\gamma^2 - 1)} \quad (51)$$

where  $D$  is the detonation velocity.

On the other hand, the mechanical energy used in the fragmentation process can be found by using the first law of thermodynamics. Thus, if we neglect the thermal power supply, one can evaluate the mechanical energy used in the fragmentation process as follows:

$$E_m(t) = \int_0^t [\dot{E}(\Omega) + \dot{K}(\Omega)] d\tau = \int_0^t P(\Omega) d\tau \quad (52)$$

where  $E$  and  $K$  are the internal and the kinetic energy, respectively, of the body  $\Omega$  at the time  $t$ , whereas  $P$  represents the mechanical power supply.

Furthermore, for detonation with high velocity, we can assume that the applied pressure acts uniformly along the borehole-axis. As a consequence, for  $n$  cylindrical charges with radius  $R_i$  and height  $H_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ), Equation (52) becomes

$$E_m(t) = \sum_{i=1}^n 2\pi R_i H_i \int_0^t p_i(\tau) \dot{u}_i(\tau) \left(1 + \frac{u_i(\tau)}{R_i}\right) d\tau \quad (53)$$

where  $u_i$  is the radial displacement of the borehole wall  $i$  and  $p_i$  is the pressure pulse applied on this wall.

In this study, the applied pressure pulse is assumed to be expressed as

$$p(t) = P_m \frac{e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}}{e^{-\lambda_1 T_m} - e^{-\lambda_2 T_m}} \quad (54)$$

where  $T_m$  is the rise time of the blast pulse which can be expressed as

$$T_m = \frac{\ln(\lambda_1/\lambda_2)}{\lambda_1 - \lambda_2} \quad (55)$$

$P_m$  denotes the peak value of  $p(t)$ . By varying values of  $\lambda_1$  and  $\lambda_2$ , different shapes of blast loadings can be reproduced. Figure 6 illustrates a typical blast pulse obtained with  $T_m = 0.005$  ms and  $\lambda_1 = 2/T_m$ .

Figure 7 shows the evolution of the mechanical energy (52). This graph represents a typical result obtained from the simulation of a cylindrical rock sample with a diameter of 100 mm. As it can be seen, the energy tends asymptotically towards the chemical energy released by the detonation.

## 6. NUMERICAL SIMULATION OF CHAMBER BLASTING TESTS

The chamber blasting tests concern the fragmentation of three types of cylindrical limestone samples which were blasted with a constant 5 mm diameter PETN charge. The chamber in which the samples were blasted, allowed the collection close to 100% of the blasted material for analysis. The blasted material was screened and the fragmentation distributions were determined.

Parameters of the developed constitutive model were fitted to the specific type of material from a series of classical experiments. Table I gives these calibrated parameters for the three

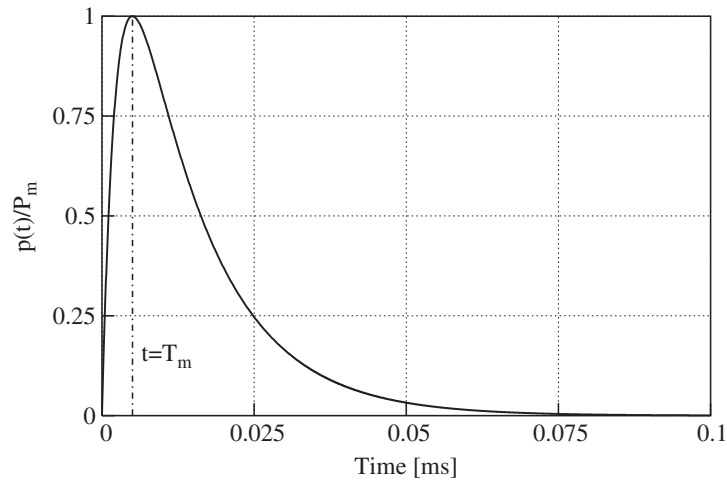


Figure 6. Pressure-time history form function.

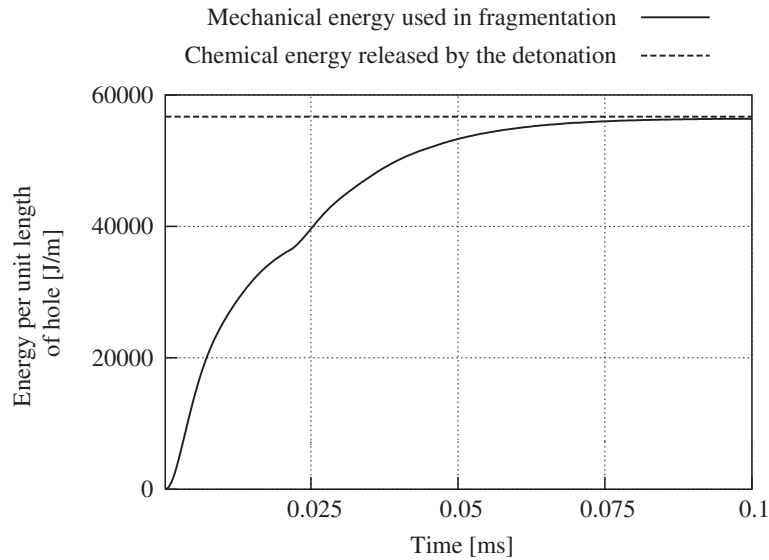


Figure 7. Evolution of the mechanical energy.

Table I. Material parameters.

	$E$ [GPa]	$\nu$	$K$	$\alpha$	$\beta$	$\omega_c$	$R_c$ [MPa]	$v_c$ [m/s]	$n_c$	$R_d$ [J/m <sup>3</sup> ]	$v_d$ [m/s]	$n_d$	$\rho$ [kg/m <sup>3</sup> ]
Lim.I	64	0.26	3	0.1	2	5000	120	1.50	1	451.25	900	1	2560
Lim.II	57	0.21	3	0.1	2	5000	65	1.45	1	95.53	1850	1	2680
Lim.III	35	0.20	3	0.1	2	5000	60	1.42	1	96.57	1450	1	2600

considered limestone types. Numerical results were calculated for samples with diameters varying from 100 to 300 mm. Numerical solutions were obtained by using uniform discretizations with 6 noded quadrilateral elements. 300 and 100 elements were used for

samples with diameters, respectively, 300 and 100 mm. The time step used for computations, which were done with large strain formulation, was  $\Delta t = 10^{-6}$  ms.

Concerning the boundary conditions, the peak stress  $P_m$  and the rising time were obtained as follows: we fix  $T_m$  and  $\lambda_1$  equal, respectively, to 0.005 ms and to  $2/T_m$  and we calibrate  $P_m$ .  $\lambda_1$  is estimated by considering that the blast pulse will be strongly attenuated after 0.1 ms. The calibration consists of varying  $P_m$  until the mechanical energy transmitted to the rock tends asymptotically towards the chemical energy released by the detonation (Figure 7). Numerical calculations were done on samples with 100 mm in diameter. Table II gives the calibrated values for the considered limestones. Once the boundary condition and the rheological parameters are identified for a given material, one can make, for the same material, different simulations with different geometries. Obtained numerical results indicate that the only damage tensor component which was influenced by stress waves is the tangential one. Otherwise, slabbing regions are absent which is in good agreement with experimental observations.

To illustrate the fracture process, the isotropic softening variable  $\xi$  and tangential component of the damage tensor  $\Theta_\theta$  are plotted against the radius, at different times, for a sample with 200 mm in diameter of the limestone type II. The isotropic softening variable plots shown in Figure 8, clearly demonstrate the propagation of a shear failure zone from the inner surface of the sample. From Figure 9, it is easy to pointed out that failure mechanisms due to tangential stress are activated not only from the inner surface but also from the outside surface of the sample. In these regions, rock is broken into sectors by radial cracks. These results are qualitatively in agreement with experimental observations made on rebuilt samples.

In our approach, the fragmentation is viewed as an extension of the fracture process. So, when the numerical calculations are complete, the history of the thermodynamic state is

Table II. The peak value of the pressure–time history.

	Lim.I	Lim.II	Lim.III
$P_m$ [MPa]	2825	2800	2675

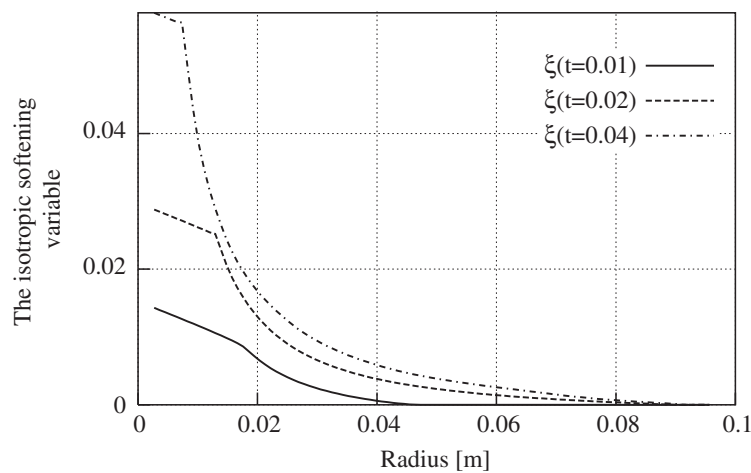


Figure 8. The isotropic softening variable as a function of radius.

post-processed in order to calculate the mechanical quantity  $G$  introduced by Equation (4) and which is, in this case, the strain energy density given by Equation (8). Figure 10 shows, in a log–log plot, typical results obtained from the numerical simulation of the fracture process for samples of limestone type III with different diameters. This graph represents the strain energy density as a function of radius.

Now, let us consider the fragmentation law. Once the mechanical quantity is calculated in each point of the fragmented body, we can find by curve fitting the intrinsic function  $\psi$  (Equation (4)). If we consider the fragmentation law advanced previously (Equation (14)), this means that the fitting procedure will give us the numerical values of the material parameters  $\kappa$  and  $n$ . By using only these two parameters, we have pointed out that we cannot handle the large range of the strain energy density. In order to overcome this

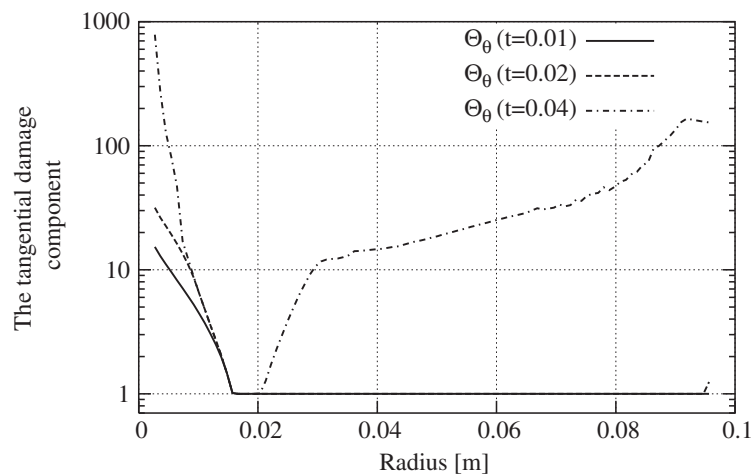


Figure 9. The tangential damage component as a function of radius.

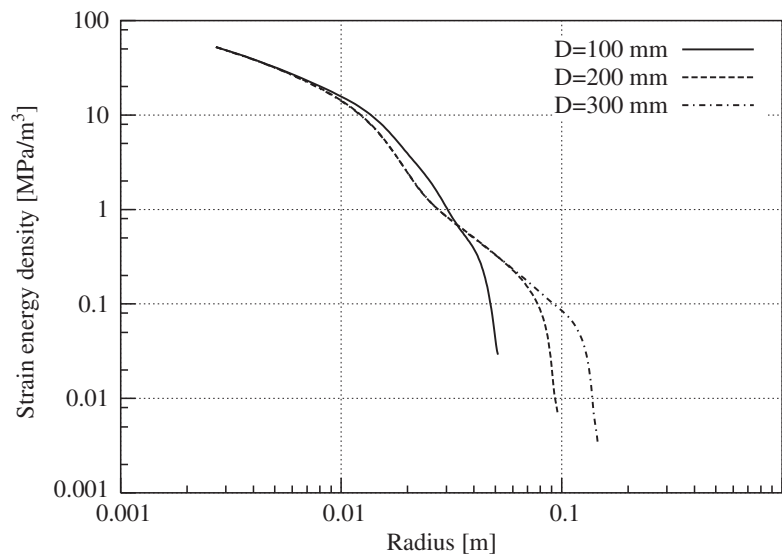


Figure 10. Typical result for the strain energy density as a function of radius.

limitation, we have introduced a critical strain energy density  $G_c$  and two regimes with different power factors

$$s_m(\mathbf{x}) = \psi(G(\mathbf{x})) = \begin{cases} \kappa \left( \frac{G(\mathbf{x})}{G_c} \right)^{-n_1} & \text{for } G(\mathbf{x}) \in [G_d, G_c[ \\ \kappa \left( \frac{G(\mathbf{x})}{G_c} \right)^{-n_2} & \text{for } G(\mathbf{x}) \in [G_c, +\infty[ \end{cases} \quad (56)$$

Calculated parameters for the considered rocks are given in Table III. We add to these parameters the shape factor  $\alpha$  which was assumed to be constant and equal to 3. At this stage, it should be noted that these parameters are intrinsic to the considered materials. They do not change with the geometry and loading conditions. Figure 11 shows the fragmentation law for the different limestone types.

Finally, knowing the intrinsic function  $\psi$ , we calculate the mean fragment size and, therefore, the fragment size distribution of each sample by considering Equation (7). For the considered samples, we assume that the fragmentation process is always dynamic, so we do not need numerical values for the parameter  $G_d$ . Figures 12–14 show numerical predictions which are compared to experimental data. These graphs represent the cumulative passing given by Equation (3) versus the fragment size. As it can be seen, calculations are in good agreement with

Table III. Parameters of the fragmentation laws.

	$\kappa$ [mm]	$G_c$ [MPa/m <sup>3</sup> ]	$n_1$	$n_2$	$\alpha$
Lim.I	1.215	3.407	0.898	1.570	3
Lim.II	1.120	7.413	0.798	2.522	3
Lim.III	0.543	6.240	1.040	1.956	3

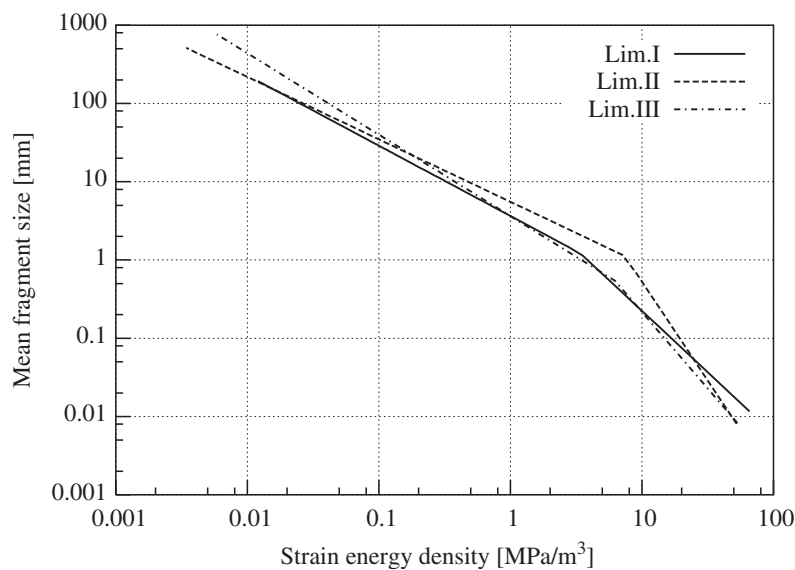


Figure 11. The fragmentation law for different limestone types.



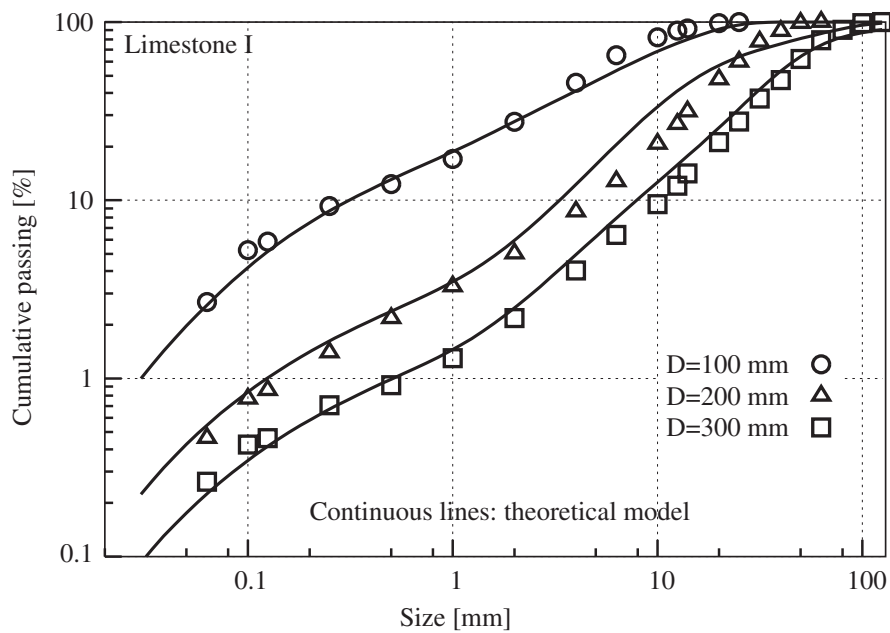


Figure 12. Comparison of experimental distributions with calculated distributions.

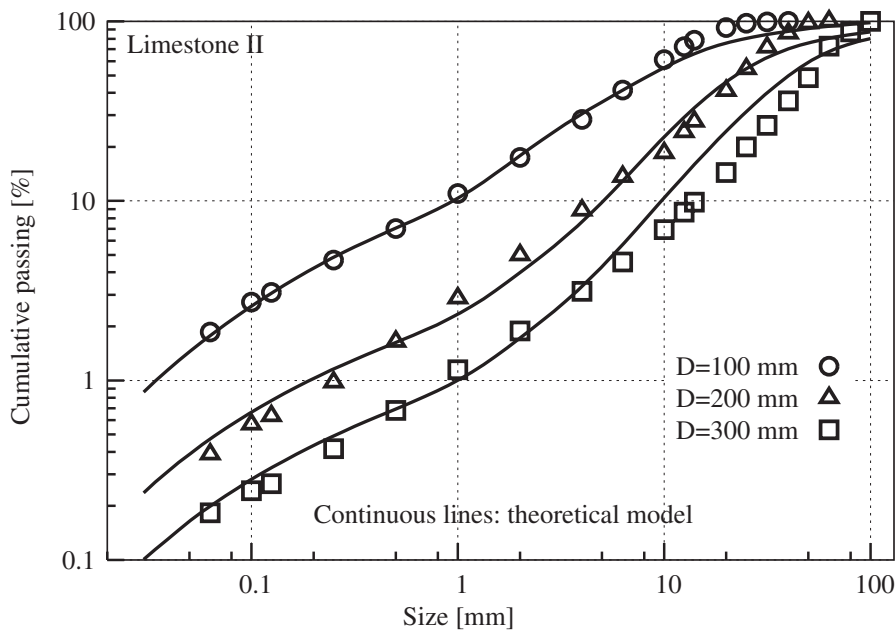


Figure 13. Comparison of experimental distributions with calculated distributions.

experimental results. The quality of the predicted results show that the proposed model is a very promising approach to simulate the dynamic fragmentation of quasi-brittle materials. However, in order to be sure about its predictive power, in the future, further complex situations must be analysed.

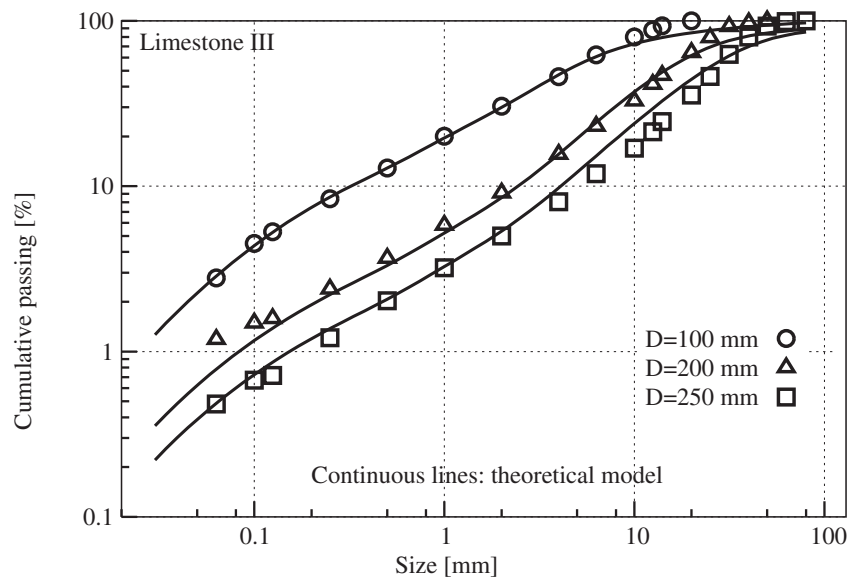


Figure 14. Comparison of experimental distributions with calculated distributions.

## 7. CONCLUSIONS AND PROSPECTS

A formulation for describing and predicting the behaviour and fragmentation of quasi-brittle materials under high dynamic loadings has been constructed utilizing the following main assumptions:

- Material's heterogeneity on a large scale is ignored. On a small scale, we assume that a laboratory-sized specimen is mechanically homogeneous and continuous.
- The time-dependent fracture process can be described by using a phenomenological model which reproduces mathematically the macroscopic stress–strain relations for different loading conditions, neglecting the microscopic mechanisms of the behaviour.
- Based on the history of the material's thermodynamic state, we postulate that we can go up to the fragment size by a post-processing analysis.

Therefore, using these considerations a suitable constitutive model for quasi-brittle materials has been developed. The model is capable of describing the rate-dependent non-linear behaviour and the load-induced anisotropy. This constitutive model is then implemented in a finite element program (VIPLEF3D).

On the other hand, based on experimental laboratory blasting tests, a dynamic fragmentation model is introduced to account for the fragment size distribution.

The developed approach is then applied to the modelling of the laboratory rock fragmentation by blasting. The model capabilities are then evaluated through the comparison between experimental and numerical results.

However, this work still asks more questions than it answers. Concerning the dynamic fragmentation problem, the phenomenal model used to predict the fragment size distribution seems to be an attractive approach, especially when the material to be fragmented is well characterized before energy input. However, the local relationship between the mean fragment size and the mechanical quantity appears to be not valid for low dynamic loadings where the

fragmentation can be defined as a structural failure. In this regard, further studies must be undertaken to better clarify the transition between static and dynamic fragmentation. Additional high-quality experimental data are also needed to derive a general fragmentation model.

For the rock fragmentation problem, in our numerical modelling the blast loading is introduced by using a pressure–time history on the borehole. This pressure–time history is only a crude approximation and further studies must be undertaken for better taking into account the coupling problem involving detonation process and the breaking, the fracturing and the fragmentation of the rock. The crush action of shock wave around the borehole must also be the result of the coupled problem.

Moreover, in real blasting problems, it is evident that the rock mass properties will dominate the fragmentation process. Indeed, the properties of both the intact rock and the discontinuities play an important role in determining the most suitable fragmentation distribution with a minimum cost. Based on the approach developed in this paper, the blasting fragmentation distribution of the intact rock can be obtained. On the other hand, the initial block distribution can also be determined by using probability and statistics methods. Thus, future work can focus on the way to combine these different data in order to develop a complete methodology which can be used in real industrial applications.

## REFERENCES

1. Grady DE, Kipp ME. Continuum modelling of explosive fracture in oil shale. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences and Geomechanics Abstracts* 1980; **17**:147–157.
2. Preece D, Thore BJ, Baer MR, Swegle JW. Computer simulation of rock blasting: a summary of work from 1987 to 1993. *SAND29-1027*, Unlimited Release 1994.
3. Potyondy DO, Cundall PA. Modeling of shock-and gas-driven fractures induced by a blast using bonded assemblies of spherical particles. *Rock Fragmentation by Blasting*. Balkema: Rotterdam, Brookfield, 1996.
4. Donzé FV, Bouchez J, Magnier SA. Modeling fractures in rock blasting. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 1997; **34**(8):1153–1163.
5. Munjiza A, Owen RJ, Bicanic N. A combined finite-discrete element method in transient dynamics of fracturing solids. *Engineering-Computations* 1995; **12**:145–174.
6. Curran DR, Seaman L, Shockey DA. Dynamic failure of solids. *Physics Reports* 1987; **147**(5,6):253–388.
7. Rouabhi A. Dynamic behaviour and fragmentation of quasi-brittle materials: application to rock fragmentation by blasting. *Thèse de doctorat*. Ecole des Mines de Paris, France, 2004.
8. Lemaitre J, Chaboche JL. *Mécanique des matériaux solides*. Dunod: France, 1985.
9. Freund LB. *Dynamic Fracture Mechanics*. Cambridge University Press: Cambridge, 1990.
10. Nikolaevskiy VN. *Geomechanics and Fluidodynamics*. Kluwer: Dordrecht, 1996.
11. Cordebois JP, Sidoroff F. Endommagement anisotrope en élasticité et plasticité. *J. Méc. théorique et appliquée* 1982; **numéro spécial**:45–60.
12. Murakami S, Kamiya K. Constitutive and damage evolution equations of elastic-brittle materials based on irreversible thermodynamics. *International Journal of Mechanical Sciences* 1997; **39**(4):473–486.
13. Halam D, Dragon A. An anisotropic model of damage and frictional sliding for brittle materials. *European Journal of Mechanics – A/Solids* 1998; **17**(3):439–460.
14. Carol I, Rizzi E, Willam K. On the formulation of anisotropic elastic degradation. I. Theory on a pseudo-logarithmic damage tensor rate. *International Journal of Solids and Structures* 2001; **38**:491–518.
15. Chaboche JL. Damage-induced anisotropy: on the difficulties associated with the active-passive unilateral conditions. *International Journal of Damage Mechanics* 1992; **1**:148–171.
16. Ortiz M. A constitutive theory for the inelastic behavior of concrete. *Mechanics of Materials* 1985; **4**:67–93.
17. Tijani M. *VIPLEF3D User's Manual, Version 001204*. Ecole des Mines de Paris, France, 2000.
18. Perkins RD, Green SJ, Friedman M. Uniaxial stress behavior of porphyritic tonalite at strain rates to  $10^3$ /seconds. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 1970; **7**:527–535.
19. Peng SS. Time-dependent aspects of rock behaviour as measured by a servocontrolled hydraulic testing machine. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences and Geomechanics Abstracts* 1973; **10**:235–246.

20. Chong KP, Hoyt PM, Smith JW, Paulsen BY. Effects of strain rate on oil shale fracturing. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences and Geomechanics Abstracts* 1980; **17**:35–43.
21. Gran JK, Florence AL, Colton JD. Dynamic triaxial tests of high-strength concrete. *Journal of Engineering Mechanics* 1989; **115**(5):891–904.
22. Yalun Y. On the effect of dynamic fracture of rocks on the blasting. *Fragblast'90*, Brisbane 1990.
23. Reinhardt HW, Rossi P, Van Mier JGM. Joint investigation of concrete at high rates of loading. *Materials and Structures* 1990; **23**:213–216.
24. Olsson WA. The compressive strength of tuff as a function of strain rate from  $10^{-10}$  to  $10^3 \text{ sec}^{-1}$ . *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences and Geomechanics Abstracts* 1991; **28**(1):115–118.
25. Gary G, Bailly P. Behaviour of quasi-brittle material at high strain rate. Experiments and modelling. *European Journal of Mechanics – A/Solids* 1998; **17**(3):403–420.
26. Malvar LJ, Crawford E. Dynamic increase factors for concrete. *28th DDESB Seminar*, Orlando, FL, 1998.
27. Tedesco JW, Ross CA. Strain-rate-dependent constitutive equations for concrete. *Transactions of the ASME* 1998; **120**:398–405.
28. Zhao J. Applicability of Mohr–Coulomb and Hoek–Brown strength criteria to the dynamic strength of brittle rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 2000; **37**:1115–1121.
29. Frew DJ, Forrestal MJ, Chen W. A split hopkinson pressure bar technique to determine compressive stress–strain data for rock materials. *Experimental Mechanics* 2001; **41**(1):40–46.
30. Grote DL, Park SW, Zhou M. Dynamic behavior of concrete at high strain rates and pressures: I. experimental characterization. *International Journal of Impact Engineering* 2001; **25**:869–886.
31. Meyers MA. *Dynamic Behavior of Materials*. Wiley: New York, 1994.
32. Peerlings RHJ, Geers MGD, De Borst R, Brekelmans WAM. A critical comparison of nonlocal and gradient-enhanced softening continua. *International Journal of Solids and Structures* 2001; **38**:7723–7746.
33. Engelen RAB, Geers MGD, Baaijens PT. Nonlocal implicit gradient-enhanced elasto-plasticity for the modelling of softening behaviour. *International Journal of Plasticity* 2003; **19**:403–433.

INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL AND ANALYTICAL METHODS IN GEOMECHANICS  
*Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.* 2007; **31**:1517–1535  
Published online 7 February 2007 in Wiley InterScience (www.interscience.wiley.com). DOI: 10.1002/nag.605

## Triaxial behaviour of transversely isotropic materials: Application to sedimentary rocks

A. Rouabhi<sup>1,\*</sup>, M. Tijani<sup>1</sup> and A. Rejeb<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Centre de Géosciences, Ecole des Mines de Paris, Fontainebleau, France*

<sup>2</sup>*Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire, Fontenay-Aux-Roses, France*

### SUMMARY

Failure and long-term behaviour of oriented solids are studied. Transversely isotropic materials are considered and a mathematical formulation that respect the material symmetry is developed and applied to model the triaxial behaviour of sedimentary rocks. Two failure criteria and a viscoplastic constitutive model that describe, respectively, triaxial failure and triaxial creep tests are presented and discussed. The application of the developed models to describe the mechanical behaviour of Tournemire shale shows that theoretical predictions are in good agreement with the experimental data. In the present paper, the developed approach is applied to sedimentary rock materials, nevertheless, it can be generalized to any material that exhibits transverse isotropy. Copyright © 2007 John Wiley & Sons, Ltd.

Received 6 February 2006; Revised 18 December 2006; Accepted 27 December 2006

KEY WORDS: rocks; transverse isotropy; triaxial stresses; failure surface; viscoplasticity

### 1. INTRODUCTION

Based on experimental data, different approaches have been proposed to describe the deformation and the failure behaviour of anisotropic rocks. It is not the purpose of this paper to establish an exhaustive summary of the works devoted to anisotropic solids. The present work is devoted to study the behaviour of transversely isotropic solids under triaxial loadings (failure and creep tests). We mention only some review papers addressing the state of art on the study of anisotropic materials [1–8].

Even though suitable framework allowing to establish constitutive equations for anisotropic solids that respect the material symmetry is furnished by the theory of representation for tensor functions (see, for example, References [1, 9–11]), the formulation of adequate laws, that describe the mechanical behaviour of these solids, with a reasonable number of material constants which

\*Correspondence to: A. Rouabhi, Centre de Géosciences, Groupe Hydro-Géo-Ingénierie, Ecole des Mines de Paris, 35, Rue Saint-Honoré, 77305 Fontainebleau Cedex, France.

†E-mail: ahmed.rouabhi@ensmp.fr

can be easily identified, remains a complex task. The purpose of the present paper is to propose an approach that captures the principal features of the triaxial behaviour of transversely isotropic solids such as sedimentary rocks, and which preserves not only the mathematical rigour but also the simplicity of material parameters' identification.

Any constitutive equation must be independent of the frame of reference or observer. This means, mathematically, that constitutive equations must be invariant under an orthogonal transformation within the considered group of material symmetries [12]. In order to satisfy this principle of material frame-indifference, many authors have adopted a simplified theory employing a linear transformation which uses a fourth-order tensor that specify the mechanical anisotropy, see, for instance Hill [13], Boehler and Sawczuk [2], Cazacu *et al.* [3]. This method has been used essentially to describe the short-term behaviour in terms of failure surfaces.

To simulate the non-linear constitutive behaviour of composite materials, Car *et al.* [14] proposed an approach based on establishing a one-to-one relationship between the behaviour of the real anisotropic material and that of an isotropic fictitious one. The problem is then resolved in the isotropic fictitious space and the results are transported to the real field. The advantage of their approach is that one can use established models for isotropic materials. In the present work, this concept of isotropic equivalent formulation is used to develop constitutive models for transversely isotropic sedimentary rocks' inelastic behaviour.

In order to describe the short-term strength, two failure criteria are proposed. The first criterion is based on the Drucker–Prager criterion that was formulated to account for the hydrostatic pressure sensitivity. The redefined Drucker–Prager criterion for transversely isotropic solids requires four material constants. As for the second criterion, it incorporates the effect of all three principal stresses, including that of intermediate one. It is based on the Mohr–Coulomb criterion but with a modified Lode-dependence function. The redefined Mohr–Coulomb criterion for the transversely isotropic solids requires, in this case, five material constants. Material constants for both criteria are identified, for the considered example in this work, from triaxial compression, as well as triaxial extension failure experiments.

On the other hand, a viscoplastic constitutive model is developed and applied to describe the long-term behaviour of Tournemire shale. This model, based on Lemaître's law [15], needs five material constants which are calibrated, for Tournemire shale, from triaxial creep tests.

It is of interest to note that these developments were already applied to a practical engineering problem which deals with the understanding of the excavation disturbed zone around the underground excavations of Tournemire site (France) [16].

This paper is organized as follows. Section 2 gives some important definitions of tensor functions that are used in our developments. In Section 3, the formulation of the stress space transformation is outlined, followed by the restrictions which are assumed on the material parameters specifying the mechanical anisotropy. Section 4 describes the proposed failure criteria. Then, in the following section, the viscoplastic constitutive model is provided. Section 6 is devoted to apply the whole developments to the Tournemire shale and to identify, from laboratory tests, its material constants.

## 2. MATHEMATICAL PRELIMINARIES

### *Notation*

Throughout this paper, the number of underlines beneath a symbol indicates the tensorial order of that variable. Superscript 't' indicates the transpose operation, while 'tr' is the trace operator.

Symbol ‘:’ denotes the inner product with double contraction, e.g.  $\underline{a} : \underline{b} = a_{ij}b_{ji}$ , where the index denotes cartesian components and repeated subscript imply summation unless otherwise indicated.  $\underline{a} \underline{b}$  denotes the outer product with single contraction, i.e.  $(\underline{a} \underline{b})_{ij} = a_{ik}b_{kj}$ . ‘ $\otimes$ ’ indicates the dyadic or the tensor product, e.g.  $(\underline{a} \otimes \underline{b})_{ijkl} = a_{ij}b_{kl}$ , whereas ‘ $\overline{\otimes}$ ’ denotes the symmetrized dyadic product defined as  $(\underline{a} \overline{\otimes} \underline{b})_{ijkl} = (a_{ik}b_{jl} + a_{il}b_{jk})/2$ .  $\underline{\underline{1}}$  and  $\underline{\underline{\underline{1}}}$  are, respectively, the second-order and the fourth-order identity tensors.

Let us consider a transversely isotropic solid with a privileged direction defined by the unit vector  $\mathbf{e}$ . In planes perpendicular to  $\mathbf{e}$ , the solid is isotropic. The material structure can be defined by the symmetric tensor [2]

$$\underline{\underline{c}} = \mathbf{e} \otimes \mathbf{e} \quad (1)$$

Let  $\mathcal{T}$  be the space of the second-order tensors. We define the following symmetry groups:

$$\mathcal{O} = \{\underline{\underline{\omega}} \in \mathcal{T} \mid \underline{\underline{\omega}} \underline{\underline{\omega}}^t = \underline{\underline{1}}\} \quad (2)$$

$$\mathcal{G} = \{\underline{\underline{\omega}} \in \mathcal{O} \mid \underline{\underline{\omega}} \underline{\underline{c}} \underline{\underline{\omega}}^t = \underline{\underline{c}}\} \quad (3)$$

$\mathcal{O}$  is the orthogonal second-order tensors subspace of  $\mathcal{T}$ .  $\mathcal{G}$  is referred to as the material symmetry group.

Now, consider the scalar and the tensor valued functions, denoted by  $\varphi$  and  $\underline{\underline{c}}$  of tensor variables, denoted by  $\underline{\underline{a}}$  and  $\underline{\underline{b}}$ . Then, from the representation theorems [12], one has the following definitions, where  $\mathcal{S}$  is the subspace of second-order symmetric tensors:

#### Definition 1

A scalar-valued function  $\varphi(\underline{\underline{a}})$  of a tensor variable  $\underline{\underline{a}} \in \mathcal{S}$  is isotropic relative to  $\mathcal{O}$ , i.e. invariant under any orthogonal transformation within the considered group, if and only if it can be expressed as a function of the principal invariants of  $\underline{\underline{a}}$

$$\varphi(\underline{\underline{a}}) = \varphi(\text{tr}(\underline{\underline{a}}), \text{tr}(\underline{\underline{a}}^2), \text{tr}(\underline{\underline{a}}^3)) \quad (4)$$

where  $\underline{\underline{a}}^n$  denotes the outer product  $\underline{\underline{a}} \underline{\underline{a}} \dots \underline{\underline{a}}$  ( $n$  times).

#### Definition 2

A polynomial tensor function  $\underline{\underline{c}}(\underline{\underline{a}}, \underline{\underline{b}})$  of two variables  $(\underline{\underline{a}}, \underline{\underline{b}}) \in \mathcal{S}^2$ , i.e. the component of  $\underline{\underline{c}}$  are polynomials in the components of the  $\underline{\underline{a}}$  and  $\underline{\underline{b}}$ , is isotropic relative to  $\mathcal{O}$  if and only if it has a representation of the form

$$\begin{aligned} \underline{\underline{c}}(\underline{\underline{a}}, \underline{\underline{b}}) = & \varphi_0 \underline{\underline{1}} + \varphi_1 \underline{\underline{a}} + \varphi_2 \underline{\underline{a}}^2 + \varphi_3 \underline{\underline{b}} + \varphi_4 \underline{\underline{b}}^2 + \varphi_5 (\underline{\underline{a}} \underline{\underline{b}} + \underline{\underline{b}} \underline{\underline{a}}) \\ & + \varphi_6 (\underline{\underline{a}}^2 \underline{\underline{b}} + \underline{\underline{b}} \underline{\underline{a}}^2) + \varphi_7 (\underline{\underline{a}} \underline{\underline{b}}^2 + \underline{\underline{b}}^2 \underline{\underline{a}}) + \varphi_8 (\underline{\underline{a}}^2 \underline{\underline{b}}^2 + \underline{\underline{b}}^2 \underline{\underline{a}}^2) \end{aligned} \quad (5)$$

where  $\varphi_1, \dots, \varphi_8$  are polynomials in the 10 basic invariants

$$\text{tr}(\underline{\underline{a}}), \text{tr}(\underline{\underline{a}}^2), \text{tr}(\underline{\underline{a}}^3), \text{tr}(\underline{\underline{b}}), \text{tr}(\underline{\underline{b}}^2), \text{tr}(\underline{\underline{b}}^3), \text{tr}(\underline{\underline{a}} \underline{\underline{b}}), \text{tr}(\underline{\underline{a}} \underline{\underline{b}}^2), \text{tr}(\underline{\underline{b}} \underline{\underline{a}}^2), \text{tr}(\underline{\underline{a}}^2 \underline{\underline{b}}^2) \quad (6)$$

## 3. STRESS SPACE TRANSFORMATION

## 3.1. The fictitious stress tensor

Consider a scalar-valued function (strain energy, failure criterion, ...)  $\varphi(\underline{\underline{\sigma}})$  of the symmetric Cauchy stress tensor  $\underline{\underline{\sigma}}$ . In order to respect the material frame-indifference,  $\varphi$  must necessarily be invariant under an orthogonal transformation within the considered group of material symmetries. Therefore, for transverse isotropy,  $\varphi$  must satisfy the following relation:

$$\forall \underline{\underline{\sigma}} \in \mathcal{S} \quad \forall \underline{\underline{\omega}} \in \mathcal{G}: \quad \varphi(\underline{\underline{\omega}} \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{\omega}}^t) = \varphi(\underline{\underline{\sigma}}) \quad (7)$$

which means that  $\varphi$  must be an invariant relative to  $\mathcal{G}$ . On the other hand, it can be shown that by adding the structural tensor  $\underline{\underline{e}}$  to the original arguments of  $\varphi$ , one can construct a function which is invariant relative to  $\mathcal{O}$  [10]. Thus, for transversely isotropic material, any scalar function can be expressed as

$$\varphi(\underline{\underline{\sigma}}) = \bar{\varphi}(\bar{\underline{\underline{\sigma}}}) \quad (8)$$

with

$$\bar{\underline{\underline{\sigma}}} = \underline{\underline{\ell}}(\underline{\underline{\sigma}}, \underline{\underline{e}}) \quad (9)$$

where  $\bar{\varphi}$  and  $\underline{\underline{\ell}}$  are invariant relative to  $\mathcal{O}$ . Considering this generalization, one can take all the advantages of the well-established theory of the representation of isotropic functions.  $\bar{\underline{\underline{\sigma}}}$  can be interpreted as the stress tensor within a fictitious isotropic solid. The real stress  $\underline{\underline{\sigma}}$  and the fictitious stress are related by the transformation function  $\underline{\underline{\ell}}$ . To go further and allow analytical developments, in what follows, we shall assume that  $\underline{\underline{\ell}}$  is linear with respect to its first argument. In view of representation (5), this assumption leads to express  $\bar{\underline{\underline{\sigma}}}$  as follows:

$$\bar{\underline{\underline{\sigma}}} = \underline{\underline{\ell}}(\underline{\underline{\sigma}}, \underline{\underline{e}}) = \varphi_0 \underline{\underline{1}} + \varphi_1 \underline{\underline{\sigma}} + \varphi_2 \underline{\underline{e}} + \varphi_3 (\underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{e}} + \underline{\underline{e}} \underline{\underline{\sigma}}) \quad (10)$$

$\bar{\underline{\underline{\sigma}}}$  is linear with respect to  $\underline{\underline{\sigma}}$ , only if the coefficients  $\varphi_i$  satisfy the following restrictions:

$$\varphi_0 = c_1 \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}}) + c_2 \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{e}}), \quad \varphi_1 = c_3, \quad \varphi_2 = c_4 \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}}) + c_5 \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{e}}), \quad \varphi_3 = c_6 \quad (11)$$

where  $(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6) \in \mathbb{R}^6$  are constants.

$\bar{\underline{\underline{\sigma}}}$  can also be written as

$$\bar{\underline{\underline{\sigma}}} = \underline{\underline{\underline{\underline{\mathcal{L}}}}^c : \underline{\underline{\sigma}} \quad (12)$$

where  $\underline{\underline{\underline{\underline{\mathcal{L}}}}^c$  is a constant fourth-order tensor which can be written as

$$\underline{\underline{\underline{\underline{\mathcal{L}}}}^c = c_1 \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}} + c_2 \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{e}} + c_3 \underline{\underline{1}} + c_4 \underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{1}} + c_5 \underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{e}} + c_6 (\underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{e}}) \quad (13)$$

$\underline{\underline{\underline{\underline{\mathcal{L}}}}^c$  satisfies the minor symmetry conditions, i.e.  $\mathcal{L}_{ijkl}^c = \mathcal{L}_{jikl}^c = \mathcal{L}_{ijlk}^c$ . In order to satisfy the major symmetry, i.e.  $\mathcal{L}_{ijkl}^c = \mathcal{L}_{klij}^c$ , one must impose the condition  $c_2 = c_4$ .

Now, with these considerations in mind, we introduce the following relation:

$$\bar{\underline{\underline{\sigma}}} = a_3 [\underline{\underline{\underline{\underline{\mathcal{L}}}}^c : \underline{\underline{\sigma}}] \quad \text{with } a_3 = c_3 \neq 0 \quad (14)$$



in which, the fourth-order tensor  $\underline{\underline{\underline{\underline{\mathcal{L}}^c}}}$  is replaced by the tensor  $\underline{\underline{\underline{\underline{\mathcal{L}}}} = (1/c_3)\underline{\underline{\underline{\underline{\mathcal{L}}^c}}$  that can be expressed as

$$\underline{\underline{\underline{\underline{\mathcal{L}}}} = \underline{\underline{\underline{\underline{1}}}} + a_1 \underline{\underline{\underline{\underline{1}}}} \otimes \underline{\underline{\underline{\underline{1}}}} + a_2 (\underline{\underline{\underline{\underline{1}}}} \otimes \underline{\underline{\underline{\underline{e}}}} + \underline{\underline{\underline{\underline{e}}}} \otimes \underline{\underline{\underline{\underline{1}}}}) + a_4 \underline{\underline{\underline{\underline{e}}}} \otimes \underline{\underline{\underline{\underline{e}}}} + a_5 (\underline{\underline{\underline{\underline{e}}}} \otimes \underline{\underline{\underline{\underline{1}}}} + \underline{\underline{\underline{\underline{1}}}} \otimes \underline{\underline{\underline{\underline{e}}}}) \quad (15)$$

where  $(a_1, a_2, a_3, a_4, a_5) \in \mathbb{R}^5$  are the material constants that will specify the mechanical anisotropy. We observe that for  $a_1 = a_2 = a_4 = a_5 = 0$  and  $a_3 = 1$  we have  $\underline{\underline{\underline{\underline{\bar{\sigma}}}}} = \underline{\underline{\underline{\underline{\sigma}}}}$ .

Of particular importance, in the developments thereafter, are the following invariants:

$$N = -\underline{\underline{\underline{\underline{\sigma}}}} : \underline{\underline{\underline{\underline{e}}}} = -\underline{\underline{\underline{\underline{\sigma}}}} \cdot \underline{\underline{\underline{\underline{e}}}} \quad (16)$$

$$T = \|\underline{\underline{\underline{\underline{\sigma}}}} \underline{\underline{\underline{\underline{e}}}} + N \underline{\underline{\underline{\underline{e}}}}\| = (\text{tr}(\underline{\underline{\underline{\underline{\sigma}}}}^2) - N^2)^{1/2} \quad (17)$$

$$p = -(1/3) \text{tr}(\underline{\underline{\underline{\underline{\sigma}}}}) \quad (18)$$

$$q = ((3/2)\underline{\underline{\underline{\underline{s}}}} : \underline{\underline{\underline{\underline{s}}}})^{1/2} \quad (19)$$

$\underline{\underline{\underline{\underline{s}}}}$  is the stress deviator tensor and is given by

$$\underline{\underline{\underline{\underline{s}}}} = \underline{\underline{\underline{\underline{\sigma}}}} - (1/3) \text{tr}(\underline{\underline{\underline{\underline{\sigma}}}}) \underline{\underline{\underline{\underline{1}}}} \quad (20)$$

$N$  and  $T$  are, respectively, the intensity of the normal and the shear stress acting across the cut plane normal to the unit vector  $\underline{\underline{\underline{\underline{e}}}}$ .  $p$  is the mean or the hydrostatic stress (positive in compression).  $q$  is the Von Mises equivalent stress which, in triaxial test, is reduced to the absolute value of the difference between the axial and the lateral pressures.

In terms of these invariants, one can introduce the following invariants of  $\underline{\underline{\underline{\underline{\bar{\sigma}}}}}$

$$\bar{p} = a_3[(3a_1 + a_2 + 1)p + (1/3)(3a_2 + a_4 + 2a_5)N] \quad (21)$$

$$\bar{q} = |a_3|(q^2 + \alpha_1 T^2 + \alpha_2 p^2 + \alpha_3 N^2 + \alpha_4 pN)^{(1/2)} \quad (22)$$

with

$$\alpha_1 = 3a_5(a_5 + 2), \quad \alpha_2 = 9a_2(a_2 - 1) \quad (23)$$

$$\gamma = a_4 + 2a_5, \quad \alpha_3 = \gamma^2 + 3\gamma, \quad \alpha_4 = 3\gamma(2a_2 - 1) + 9a_2$$

The third invariant of  $\underline{\underline{\underline{\underline{\bar{\sigma}}}}}$  can be written, in terms of the Lode angle  $\bar{\theta} \in [0, \pi/3]$ , as

$$\cos(3\bar{\theta}) = \text{sgn}(a_3)(27/2) \det(\underline{\underline{\underline{\underline{\bar{\sigma}}}}})/\bar{q}^3, \quad \text{sgn}(x) = x/|x| \quad (24)$$

### 3.2. Restrictions on the fictitious stress tensor

In an attempt to arrive at relations which could be confronted easily with experimental data, we propose, in this section, to reduce the number of parameters defining  $\underline{\underline{\underline{\underline{\bar{\sigma}}}}}$ . Since rock specimens are mainly submitted to triaxial stress state, it appears therefore reasonable to start this analysis by considering a triaxial test on a transversely isotropic material (Figure 1). We denote by  $\Theta$  the angle between the axis  $\underline{\underline{\underline{\underline{z}}}}$  of the specimen and the privileged direction  $\underline{\underline{\underline{\underline{e}}}}$  of the material.

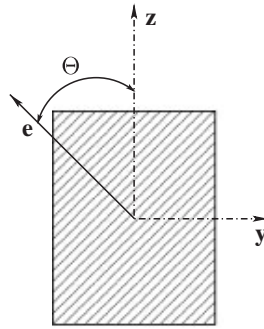


Figure 1. A specimen of a transversely isotropic material.

The specimen is loaded by an axial pressure  $Q$  and a lateral pressure  $P$  (confinement). In terms of  $P$  and  $Q$ , the stress tensor  $\underline{\underline{\sigma}}$  can be expressed in the axes of the specimen  $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$  as

$$\underline{\underline{\sigma}} = -P\underline{\underline{1}} - (Q - P)\mathbf{z} \otimes \mathbf{z} \quad (25)$$

In geomechanics the experimental data are obtained in most cases from triaxial compression tests. Sometimes data from triaxial extension tests are also included. Assuming the ordering of the principal stresses to be  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3$ , these different tests correspond to the following configurations:

*Triaxial compressions:*

$$\sigma_1 = \sigma_2 = -P \geq \sigma_3 = -Q \quad (26)$$

*Triaxial extensions:*

$$\sigma_1 = -Q \geq \sigma_2 = \sigma_3 = -P \quad (27)$$

In the case of triaxial tests, the second invariant  $\bar{q}$  of  $\underline{\underline{\sigma}}$ , in terms of  $(P, Q, \Theta)$  becomes

$$\begin{aligned} \bar{q} &= |a_3|(A(\Theta)q^2 \pm 2B(\Theta)pq + Cp^2)^{(1/2)} \\ A(\Theta) &= 1 + (\alpha_1/4)\sin^2(2\Theta) + (\alpha_3/9)(1 - 3\cos^2(\Theta))^2 \\ B(\Theta) &= (1/6)(2\alpha_3 + \alpha_4)(1 - 3\cos^2(\Theta)), \quad C = \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 \end{aligned} \quad (28)$$

Here, in the  $\pm$  sign, the upper sign holds for triaxial extension and the lower sign for triaxial compression. Thus, for a given orientation  $\Theta$ ,  $\bar{q}$  is a quadratic function of  $p$  and  $q$ . At this stage, it is worthwhile to point out that, in the following, we shall consider only failure surface which is open on the compressive hydrostatic axis, i.e. a pure hydrostatic compression loading cannot cause failure. Thus, to account for the unlimited hydrostatic compressive capacity, we shall consider the condition

$$B^2 - AC = 0 \quad \forall \Theta \quad (29)$$

Consequently,  $\bar{q}$  will be a parabola. Taking into account the expressions of  $B$ ,  $A$  and  $C$ , we can easily show that (29) holds if the material parameters satisfy the restriction

$$\gamma = a_4 + 2a_5 = -3a_2 \quad (30)$$

If (30) holds,  $\bar{q}$  becomes

$$\bar{q} = |a_3| \sqrt{A(\Theta)} q \quad (31)$$

$$A(\Theta) = 1 + (\alpha_1/4) \sin^2(2\Theta) + (\alpha_2/9)(1 - 3 \cos^2(\Theta))^2$$

therefore, for a given orientation  $\Theta$ ,  $\bar{q}$  is only a function of  $q$ .

In Equation (31),  $A(\Theta)$  must be a positive function. In view of its expression, this can be easily assured if one assumes the additional restrictions:

$$\alpha_1 = 3a_5(a_5 + 2) \geq 0 \quad \text{and} \quad \alpha_2 = 9a_2(a_2 - 1) \geq 0 \quad (32)$$

On the other hand, when (30) holds, the first and the third invariants, in the case of the triaxial stress state, become

$$\bar{p} = a_3(3a_1 + a_2 + 1)p \quad (33)$$

$$\cos(3\bar{\theta}) = \pm \text{sgn}(a_3) \phi(\Theta) A(\Theta)^{(-3/2)}$$

$$\phi(\Theta) = \phi_1(\phi_1^2 - \phi_2), \quad \phi_1(\Theta) = 1 + a_2(1 - 3 \cos^2(\Theta)) \quad (34)$$

$$\phi_2(\Theta) = (3/2)[3a_2(1 - 3 \cos^2(\Theta)) - \alpha_1 \cos^2(\Theta)] \sin^2(\Theta)$$

Consider now a pure hydrostatic state of stress,  $\underline{\underline{\sigma}} = -P \underline{\underline{1}}$ . For this case,  $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$  becomes

$$\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = -a_3 P [\underline{\underline{\mathcal{L}}} : \underline{\underline{1}}] = -a_3 P [(3a_1 + a_2 + 1) \underline{\underline{1}} + (3a_2 + a_4 + 2a_5) \underline{\underline{e}}] \quad (35)$$

which can be reduced to

$$\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = -a_3 P (3a_1 + a_2 + 1) \underline{\underline{1}} = a_3 (3a_1 + a_2 + 1) \underline{\underline{\sigma}} \quad (36)$$

when (30) holds. Thus, under an hydrostatic stress state, the stress tensor associated with the fictitious solid is proportional to the real stress. To simplify further the analysis, we will assume that, under hydrostatic stress state, we have  $\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \underline{\underline{\sigma}}$ . This condition can be assured by considering

$$a_3 = 1 \quad \text{and} \quad 3a_1 = -a_2 \quad (37)$$

Finally, if conditions (30) and (37) are satisfied, the linear transformation, which relates the fictitious stress  $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$  to the real stress  $\underline{\underline{\sigma}}$ , can be written as

$$\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \underline{\underline{\mathcal{L}}} : \underline{\underline{\sigma}} \quad (38)$$

with

$$\underline{\underline{\mathcal{L}}} = \underline{\underline{1}} + a_2(\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{e}} + \underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{1}} - (1/3)\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}} - 3\underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{e}}) + a_5(\underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{e}} - 2\underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{e}}) \quad (39)$$

The transformation is then characterized only by two material constants  $a_2$  and  $a_5$ . In this case, the first and the second invariant of  $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$  are reduced to

$$\bar{p} = p \quad (40)$$

$$\bar{q} = [q^2 + \alpha_1 T^2 + \alpha_2 (p - N)^2]^{(1/2)} \quad (41)$$

and that

$$\alpha_1 = 3a_5(a_5 + 2) \geq 0, \quad \alpha_2 = 9a_2(a_2 - 1) \geq 0, \quad (a_2, a_5) \in \mathbb{R}^2 \quad (42)$$

Thus,  $a_2$  and  $a_5$  are used essentially to generalize the Von Mises equivalent stress  $q$  to transversely isotropic media:  $q$  is replaced by  $\bar{q}$ . In addition, for functions which are expressed only by using  $\bar{p}$  and  $\bar{q}$ , one can use  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$  instead of  $a_2$  and  $a_5$ . However,  $a_2$  and  $a_5$  become indispensable when we need to calculate the third invariant of  $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$ . In addition, (42) indicates that  $\alpha_1$  and  $\alpha_2$  are quadratic equations, therefore their determination will not guarantee the identification of  $a_2$  and  $a_5$ . That is the reason why we need restrictions on  $a_2$  and  $a_5$ . We shall consider physical intuitive considerations to establish these restrictions:

*Restriction on  $a_2$ :* Let a transversely isotropic rock specimen with a privileged axis  $\mathbf{e} = \mathbf{z}$  ( $\Theta = 0^\circ$ ) be subjected to a triaxial test. In this particular case, we assume that, under compression or extension loads, the real and the fictitious material are submitted to the same load's nature, e.g. if the real material is under compression load, the fictitious material must also be under compression load. It can be easily shown that this assumption leads to the condition  $a_2 \leq \frac{1}{2}$ . Since  $\alpha_2$  must be positive, it follows that  $a_2$  must satisfy the condition

$$a_2 \leq 0 \quad (43)$$

*Restriction on  $a_5$ :* Similarly, during a simple shear test, in the plane  $(\mathbf{y}, \mathbf{z})$ , on a specimen with a privileged axis  $\mathbf{e} = \mathbf{y}$  ( $\Theta = 90^\circ$ ), we assume that both materials are submitted to the same load's nature. This leads to the following condition:

$$a_5 \geq -1 \quad (44)$$

#### 4. PROPOSED TRANSVERSELY ISOTROPIC FAILURE CRITERIA

The general form of a failure surface can be expressed by a scalar-valued function  $F(\underline{\underline{\sigma}}) = 0$ , which describes the failure envelope in six-dimensional stress space. As already explained, for transversely isotropic material,  $F$  can be expressed as

$$F(\underline{\underline{\sigma}}) = \bar{F}(\underline{\underline{\bar{\sigma}}}) \quad (45)$$

where  $\bar{F}$  is isotropic relative to  $\mathcal{O}$  and  $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$  is the fictitious stress tensor associated with the fictitious isotropic material. The advantage of using  $\bar{F}(\underline{\underline{\bar{\sigma}}})$  instead of  $F(\underline{\underline{\sigma}})$  is that one can make use of failure surfaces developed for isotropic materials. To respect the material symmetry,  $\bar{F}$  must only depend on the principal invariants of  $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$ , e.g. in the form the three principal stresses,  $\bar{F}(\underline{\underline{\bar{\sigma}}}) = \bar{F}(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \bar{\sigma}_3)$ . Alternatively,  $\bar{F}$  can be expressed in terms of the three invariants  $\bar{p}$ ,  $\bar{q}$  and  $\bar{\theta}$

$$\bar{F}(\underline{\underline{\bar{\sigma}}}) = \bar{F}(\bar{p}, \bar{q}, \bar{\theta}) = 0 \quad (46)$$

As we already know, in geomechanics, the behaviour of many materials are characterized by their hydrostatic pressure dependence. In the isotropic case, failures of this class of materials are, in the most cases, described by the well-known Drucker–Prager and Mohr–Coulomb surfaces. In the following, we shall redefine these criteria for the transversely isotropic material.

#### 4.1. Redefined Drucker–Prager criterion

In the principal fictitious stress space, the Drucker–Prager surface is a cone with a circular deviatoric section centred on the hydrostatic axis

$$\bar{F}(\underline{\bar{\sigma}}) = \bar{F}(\bar{p}, \bar{q}) = \bar{q} - \bar{\alpha}_1 \bar{p} - \bar{\alpha}_2 = 0, \quad (\bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2) \in \mathbb{R}_+^2 \quad (47)$$

where  $\bar{\alpha}_1$  and  $\bar{\alpha}_2$  are two material constants.

In order to write the failure surface for the real material, we have simply to replace in the above equation  $\bar{p}$  and  $\bar{q}$  by their expressions given, respectively, by Equations (40) and (41), and thus

$$\bar{F}(\underline{\bar{\sigma}}) = F(\underline{\sigma}) = F(p, q, N, T) = [q^2 + \alpha_1 T^2 + \alpha_2 (p - N)^2]^{(1/2)} - \bar{\alpha}_1 p - \bar{\alpha}_2 = 0 \quad (48)$$

As a result, we obtain a failure surface with four material parameters  $(\alpha_1, \alpha_2, \bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2) \in \mathbb{R}_+^4$ .

#### 4.2. Redefined Mohr–Coulomb criterion

In the principal fictitious stress space, the Mohr–Coulomb surface is an hexagonal pyramid with an irregular hexagonal deviatoric section centred on the hydrostatic axis. In this case, the failure surface becomes dependent on the Lode angle. It can be expressed as

$$\bar{F}(\underline{\bar{\sigma}}) = \bar{q} - \ell(\bar{\theta})(\bar{\alpha}_1 \bar{p} + \bar{\alpha}_2) = 0, \quad (\bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2) \in \mathbb{R}_+^2 \quad (49)$$

with

$$\ell(\bar{\theta}) = \frac{3/2}{(\bar{\alpha}_1 + 1) \cos(\bar{\theta}) + \sin(\bar{\theta} + \pi/6)} \quad (50)$$

It is of interest to recall here that the Mohr–Coulomb model does not depend on the intermediate principal stress. To overcome this limitation, in this study we shall introduce a third parameter  $\bar{\alpha}_3$  and replace the Mohr–Coulomb Lode dependence (50) by the simpler expression proposed by Gudehus and Argyris [17]

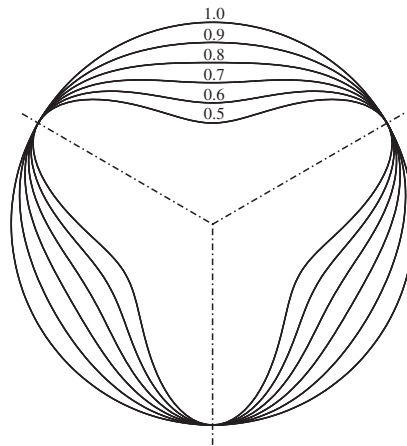
$$\ell(\bar{\theta}) = \frac{2\bar{\alpha}_3}{1 + \bar{\alpha}_3 + (1 - \bar{\alpha}_3) \cos(3\bar{\theta})}, \quad \bar{\alpha}_3 \in ]0, 1] \quad (51)$$

Along the tensile ( $\bar{\theta} = 0$ ) and the compression ( $\bar{\theta} = \pi/3$ ) meridians, this function takes the values:  $\ell(0) = \bar{\alpha}_3$ ,  $\ell(\pi/3) = 1$ . Figure 2 shows  $\ell(\bar{\theta})$  for various values of  $\bar{\alpha}_3$  between 0.5 and 1. The deviatoric cross-sections are smooth but not convex for  $\bar{\alpha}_3$  smaller than 0.777.

Therefore, in this case, we obtain a failure surface with five material parameters  $(\alpha_1, \alpha_2, \bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2, \bar{\alpha}_3) \in \mathbb{R}_+^5$ .

## 5. PROPOSED TRANSVERSELY ISOTROPIC VISCOPLASTIC MODEL

Among anisotropic rocks, the sedimentary rocks, termed shales, represent a particular interest, due to their low porosities and permeabilities, in nuclear waste storage. Creep of these rocks is therefore one of the most important phenomena in long-term safety of geological disposal system of radioactive wastes. Based on the previous developments, the present section addresses the problem of the time-dependent behaviour of transversely isotropic rocks within the framework of the viscoplasticity theory.

Figure 2. Deviatoric section for different values of  $\bar{\alpha}_3$ .

We assume the additive decomposition of the total strain tensor  $\underline{\underline{\varepsilon}}$  into elastic and viscoplastic parts, respectively, denoted by  $\underline{\underline{\varepsilon}}^e$  and  $\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}$

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}^e + \underline{\underline{\varepsilon}}^{vp} \quad (52)$$

For linearized elasticity, the stress tensor  $\underline{\underline{\sigma}}$  can be written as

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{H}}(\underline{\underline{e}}) : \underline{\underline{\varepsilon}}^e \quad (53)$$

where  $\underline{\underline{H}}(\underline{\underline{e}})$  is the elasticity tensor of the transversely isotropic solid which, of course, depends on the material structure defined by the tensor  $\underline{\underline{e}}$ .

In classical plasticity/viscoplasticity, we need to complete the above equations with the introduction of the evolution law of  $\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}$ . To establish this law, we replace, as done before, the anisotropic material by the fictitious isotropic material. The real stress tensor  $\underline{\underline{\sigma}}$  is then assumed to be related to the fictitious tensor  $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$  by the linear transformation  $\underline{\underline{\mathcal{L}}}$  given by (39).

Now, in order to find the relation between the real and the fictitious viscoplastic strain tensors, we shall use an hypothesis of dissipated power equivalence which states that the dissipated viscoplastic power for the real material is the same as that of the fictitious material

$$\underline{\underline{\sigma}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp} = \underline{\underline{\bar{\sigma}}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp} \quad (54)$$

Here, a dot denotes the rate with respect to time. Combining Equation (38) and the major symmetry property of  $\underline{\underline{\mathcal{L}}}$ , (54) can be rewritten as

$$\underline{\underline{\sigma}} : (\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp} - \underline{\underline{\mathcal{L}}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp}) = 0 \quad (55)$$

which is valid for any stress tensor  $\underline{\underline{\sigma}} \in \mathcal{S}$ . Hence, we deduce the evolution law of  $\underline{\underline{\varepsilon}}^{vp}$

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp} = \underline{\underline{\mathcal{L}}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{vp} \quad (56)$$

where  $\underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{VP}}$  denotes the fictitious viscoplastic strain tensor. Therefore, it results that the evolution law of  $\underline{\underline{\varepsilon}}^{\text{VP}}$  is defined whenever the corresponding law associated with the fictitious isotropic material is chosen.

Experimental observations on creep tests on Tournemire shale samples, indicate that, under deviatoric or isotropic stresses, the amplitude of the differed volumetric deformations are negligible compared to the deviatoric deformations. Based on those observations, in the present paper our attention will focus on Lemaître's evolution law. This law is associated with the Von Mises yield surface through the normality condition. The Von Mises yield surface can be expressed, in terms of the equivalent stress  $\bar{q}$ , as

$$\bar{F}(\underline{\underline{\sigma}}) = \bar{F}(\bar{q}) = \bar{q} - \bar{k} \quad (57)$$

where  $\bar{k}$  is a material constant. Since the normality condition is assumed, the rate of the viscoplastic strain tensor can then be written as

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{\text{VP}} = \dot{\lambda} \frac{\partial \bar{F}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} = \dot{\lambda} \frac{\partial \bar{q}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \quad (58)$$

where  $\dot{\lambda} = \dot{\lambda}(\bar{F})$  is a positive scalar function (plastic multiplier). Several possibilities exist in the definition of  $\dot{\lambda}$ . As regards Lemaître's law,  $\dot{\lambda}$  is given by

$$\dot{\lambda}(\bar{F}) = 10^{-6} \dot{\xi}^\alpha \quad (59)$$

where  $\xi$  is a scalar isotropic hardening internal variable whose evolution is defined by the rate equation

$$\dot{\xi} = (\bar{q}/K)^{\beta/\alpha} \quad (60)$$

in which the parameter  $\bar{k}$  is set equal to zero and  $(\alpha, \beta, K) \in \mathbb{R}_+^3$  are material constants.

The evolution law associated with the real material is then obtained from Equations (56) and (58). Thus,

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{\text{VP}} = \frac{\dot{\lambda}}{\bar{q}} (3/2) \underline{\underline{\mathcal{L}}} : \underline{\underline{\bar{s}}} \quad (61)$$

On the other hand, it can be easily shown that

$$(3/2) \underline{\underline{\mathcal{L}}} : \underline{\underline{\bar{s}}} = \bar{q} \frac{\partial \bar{q}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \quad (62)$$

It follows that Equation (61) can be reduced to

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{\text{VP}} = \dot{\lambda} \frac{\partial \bar{q}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \quad (63)$$

with

$$\bar{q} \frac{\partial \bar{q}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} = (3/2) \underline{\underline{s}} + (\alpha_1/2) (\underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{e}} + \underline{\underline{e}} \underline{\underline{\sigma}} + 2N \underline{\underline{e}}) + \alpha_2 (p - N) (\underline{\underline{e}} - (1/3) \underline{\underline{1}}) \quad (64)$$

It is easy to see that Equation (63) is practically the same as (58) except for the fact that the partial derivative is with respect to  $\underline{\underline{\sigma}}$  and not to  $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$ . Therefore, one can conclude that the generalization of the Lemaître's model for the transversely isotropic case consists only of the replacement of the Von Mises equivalent stress  $q$ , in the evolution laws, with the generalized equivalent stress  $\bar{q}$ . Furthermore, it is interesting to note that the generalized evolution law (63) possesses the same essential features as the evolution law (58) of the isotropic case, i.e. according to (64), there is no plastic volumetric deformation.

Finally, for the established evolution law, the Clausius–Duhem inequality, which corresponds to the positiveness of the dissipated energy, is fulfilled since Equation (54) is satisfied and that  $\underline{\underline{\bar{\sigma}}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^{\text{VP}} = \lambda \bar{q} \geq 0$ .

## 6. IDENTIFICATION OF THE MATERIAL PARAMETERS

As mentioned above, in geomechanics the experimental data are obtained in most cases from triaxial tests, that is the reason why we will use these tests to identify the material parameters. The tested material is a shale taken from the Tournemire site in the Massif Central, France. A comprehensive laboratory investigations [16, 18] has shown that this sedimentary rock exhibits transverse isotropy. The Tournemire shale correspond to well-compacted argillites and marls due to lithostatic pressure and diagenetic processes. The primary minerals for this shale are kaolinite, quartz, illite and calcite. It's porosity is between 6 and 9% [19].

The curve-fitting procedure is based on the minimization of the quadratic difference between the measured data and the theoretical predictions. In the following, we shall start by identifying the failure constants which are involved in the four-parameter, as well as in the five-parameter failure criteria, then we determine the material constants of the viscoplastic model.

### 6.1. Failure parameters

Under triaxial loading conditions, both failure surfaces can be expressed as

$$F(\underline{\underline{\sigma}}) = F(p, q, \Theta) = q - \lambda(\Theta)(\bar{\alpha}_1 p + \bar{\alpha}_2) = 0 \quad (65)$$

In the case of the four-parameter model, we have

$$\lambda(\Theta) = \lambda_c(\Theta) = \lambda_t(\Theta) = 1/\sqrt{A(\Theta)} \quad (66)$$

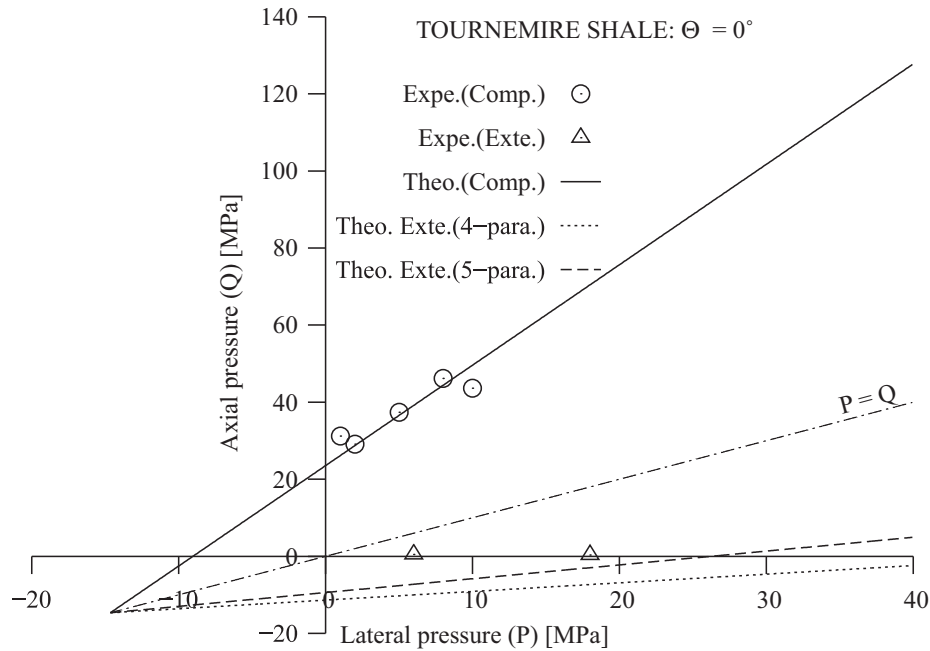
whereas for the five-parameter model, we have

$$\begin{aligned} \lambda_c(\Theta) &= \frac{2\bar{\alpha}_3 A(\Theta)}{(1 + \bar{\alpha}_3)A(\Theta)^{(3/2)} - (1 - \bar{\alpha}_3)\phi(\Theta)} \\ \lambda_t(\Theta) &= \frac{2\bar{\alpha}_3 A(\Theta)}{(1 + \bar{\alpha}_3)A(\Theta)^{(3/2)} + (1 - \bar{\alpha}_3)\phi(\Theta)} \\ \phi(\Theta) &= \phi_1(\phi_1^2 - \phi_2), \quad \phi_1 = 1 + a_2(1 - 3 \cos^2(\Theta)) \\ \phi_2 &= (3/2)[3a_2(1 - 3 \cos^2(\Theta)) - \alpha_1 \cos^2(\Theta)] \sin^2(\Theta) \end{aligned} \quad (67)$$



Table I. Parameters values for both criteria.

Four-parameter model				Five-parameter model				
$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\bar{\alpha}_1$	$\bar{\alpha}_2$ (MPa)	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\bar{\alpha}_1$	$\bar{\alpha}_2$ (MPa)	$\bar{\alpha}_3$
2.896	0.608	1.179	17.276	2.802	0.619	1.182	17.315	0.780

Figure 3. Comparison of the proposed failure criteria with triaxial data,  $\Theta = 0^\circ$ .

with

$$p = (1/3)(2P + Q), \quad q = |Q - P| \quad (68)$$

$$A(\Theta) = 1 + (\alpha_1/4) \sin^2(2\Theta) + (\alpha_2/9)(1 - 3 \cos^2(\Theta))^2$$

where  $\lambda = \lambda_c$  holds for triaxial compression and  $\lambda = \lambda_t$  for triaxial extension. Noting that, when  $\alpha_2 = 0$ , both models do not distinguish between the particular orientations  $\Theta = 0$  and  $90^\circ$ .

As for experimental data, laboratory investigations were performed mainly on triaxial compression tests with moderate confining pressure and for the orientations  $\Theta = 0, 45, 60$  and  $90^\circ$ , only some extension tests for the particular orientations  $\Theta = 0$  and  $90^\circ$  were carried out.

The values of the material constants involved in the proposed criteria were calculated so as to obtain the best fit to the experimental data. The curve-fitting procedure, was performed in two steps. The first step, consisted, for a given orientation, in fitting data in the  $p$ - $q$  plane to obtain  $\lambda$  as a function of  $\Theta$ . In the second step, we fit the obtained function to its analytical expression. The obtained values are given in Table I.

Figures 3–6 show the comparison of the failure criteria with the triaxial data in the axial–lateral pressure planes. The solid lines correspond to the theoretical curves obtained from application of

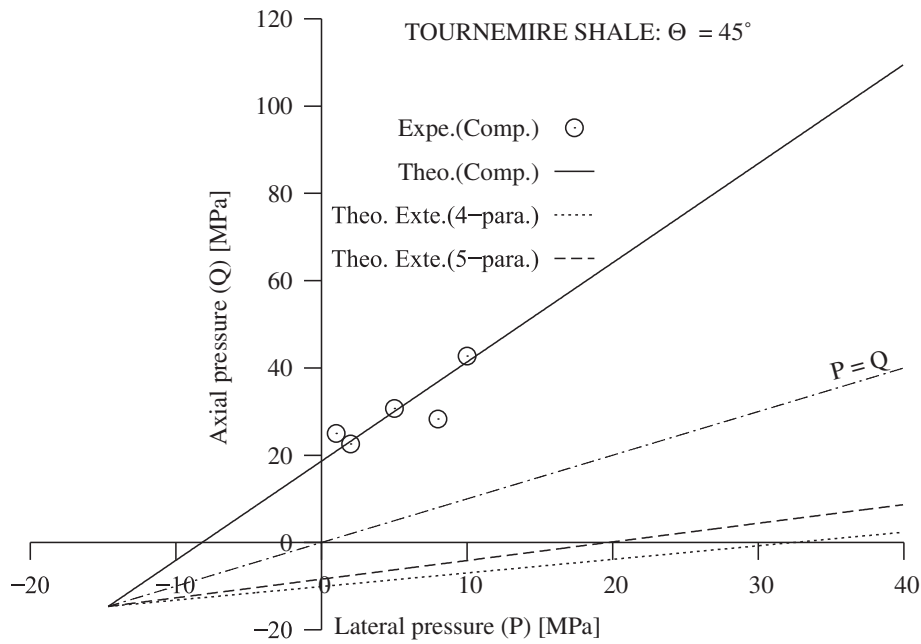


Figure 4. Comparison of the proposed failure criteria with triaxial data,  $\Theta = 45^\circ$ .

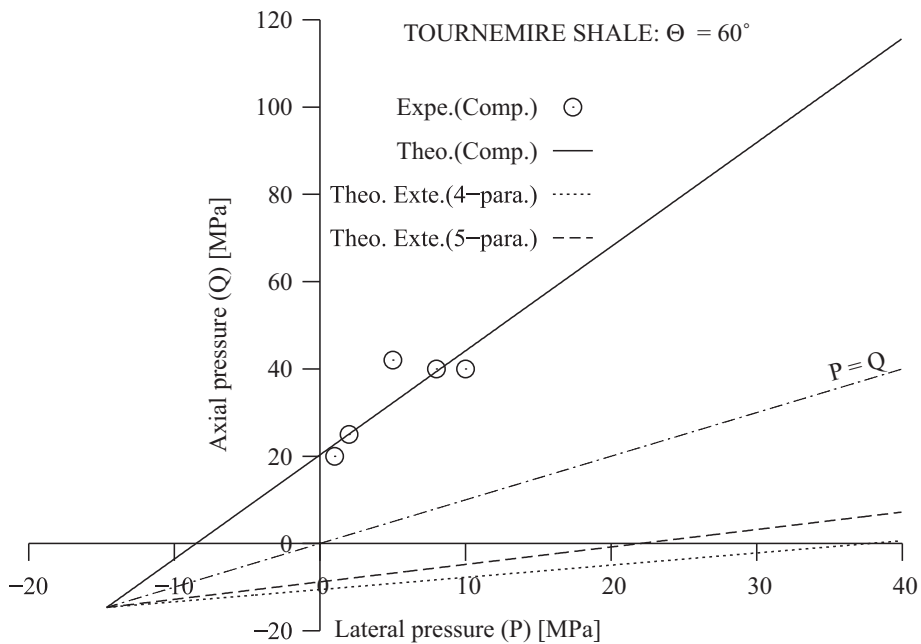


Figure 5. Comparison of the proposed failure criteria with triaxial data,  $\Theta = 60^\circ$ .

the proposed models when the triaxial compression configuration is considered. Note that for this configuration, both models give the same results, as should be the case. Concerning the triaxial extension configuration, predicted results are represented by dashed lines for the five-parameter

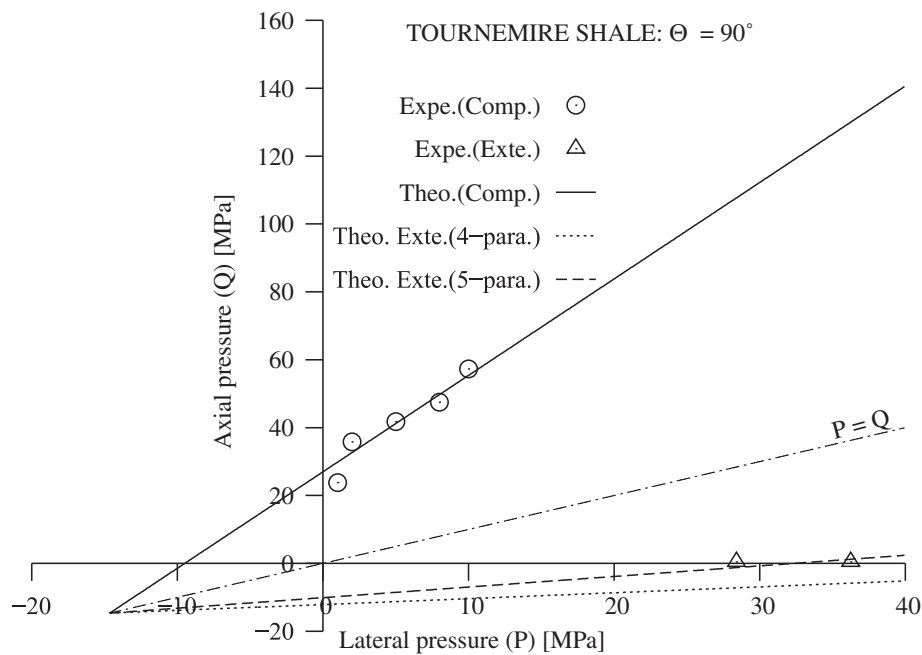


Figure 6. Comparison of the proposed failure criteria with triaxial data,  $\Theta = 90^\circ$ .

model and by dotted lines for the four-parameter model. In these figures, experimental points are indicated by symbols.

As can be seen, the agreement is very satisfactory along the compression meridian. Along the extension meridian, it is evident that the five-parameter model gives the closer curves to the experimental points. However, although the overall performances of the proposed models, it seems reasonable that further triaxial extension tests should be undertaken especially to better evaluate the five-parameter model's potential.

Figure 7 shows the variation of the failure compressive strength ( $Q$ ) with the orientation ( $\Theta$ ) for three different confining pressure ( $P$ ). The experimental results are represented by symbols. Dashed lines correspond to the results given by the four-parameter model. In this case, the results of the five-parameter are similar to that of Figure 7. All the curves demonstrate the similar nature of the responses of Tournemire shale under confining pressures, the maximum strength is obtained for  $\Theta = 90^\circ$ , while the minimum strength is found around  $\Theta = 45^\circ$ . As shown in the figure, the influence of the confining pressure on the strength characteristics is rather well described.

## 6.2. Viscoplastic parameters

In this section we present the identification of the material constants appearing in the viscoplastic constitutive model. For this purpose, triaxial compression creep tests at different axial pressure  $Q$  have been used. The lateral pressure has been kept constant,  $P = 5$  MPa.

The identification procedure consists of determining the set of constants ( $\alpha_1, \alpha_2, \alpha, \beta, K$ ) by fitting the axial strain to the measured data. Under triaxial loading conditions, the strain

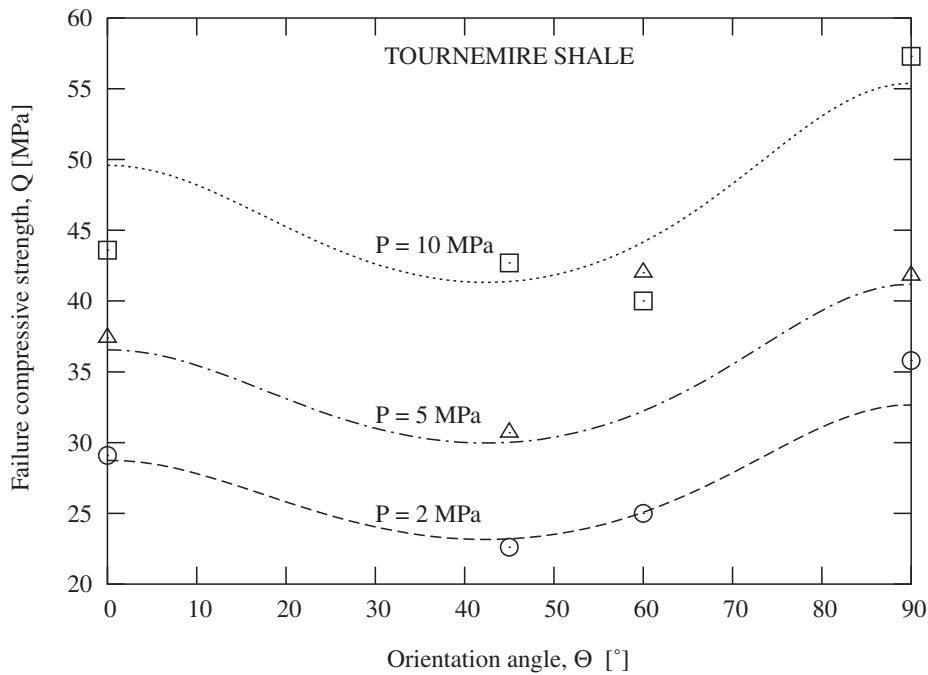


Figure 7. Failure compressive strength variation as a function of anisotropy orientation.

component  $\varepsilon_{zz}$  can be expressed in terms of the time  $t$ , the orientation  $\Theta$  and the equivalent stress  $q = Q - P$  as

$$\begin{aligned}\varepsilon_{zz}(t, \Theta, q) &= -10^{-6} \varepsilon_a(t, \Theta, q) \\ \varepsilon_a(t, \Theta, q) &= 10^6 \frac{q(t)}{E(\Theta)} + \Lambda(\Theta) \left( \int_0^t (q(\tau))^{\beta/\alpha} d\tau \right)^\alpha \\ \Lambda(\Theta) &= K^{-\beta} A(\Theta)^{(1+\beta)/2} \\ A(\Theta) &= 1 + (\alpha_1/4) \sin^2(2\Theta) + (\alpha_2/9)(1 - 3 \cos^2(\Theta))^2\end{aligned}\quad (69)$$

where  $\varepsilon_a$  is the axial strain in micron per metre. The first part in its expression corresponds to the elastic response which depends on the orientation *via* the Young's modulus  $E$ .

The best fit to the experimental data was obtained with the following material constants:

$$\alpha_1 = 4.669, \quad \alpha_2 = 0.000, \quad \alpha = 0.110, \quad \beta = 1.300, \quad K = 0.203 \text{ MPa}$$

It should be noted that, for each orientation, we have added to the fitting set parameters  $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha, \beta, K)$  the Young's modulus. But, when determined in this way, the Young's modulus is significantly different from the elasticity modulus deduced from the stress–strain curves. This may be explained by the difference between the used experimental procedures and apparatus.

As opposed to failure tests where we have observed a difference between the particular orientations  $\Theta = 0$  and  $90^\circ$  ( $\alpha_2 \neq 0$ ), in this case, experimental data corresponding to these orientations (Figure 8) coincide practically with each other. That is the reason why we have obtained  $\alpha_2 = 0$ .

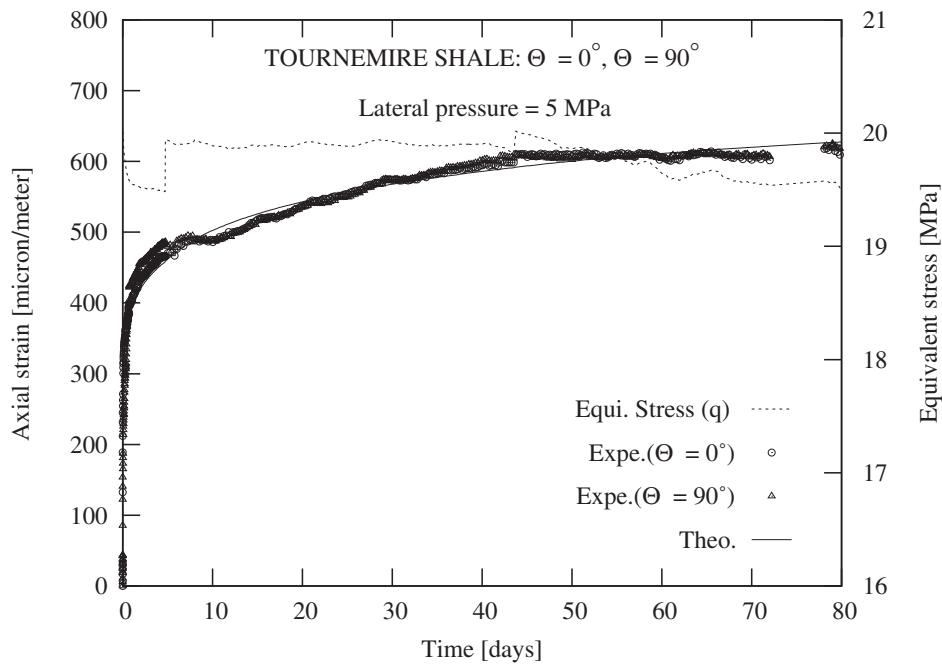


Figure 8. Comparison of the viscoplastic model with triaxial creep data,  $\Theta = 0, 90^\circ$ .

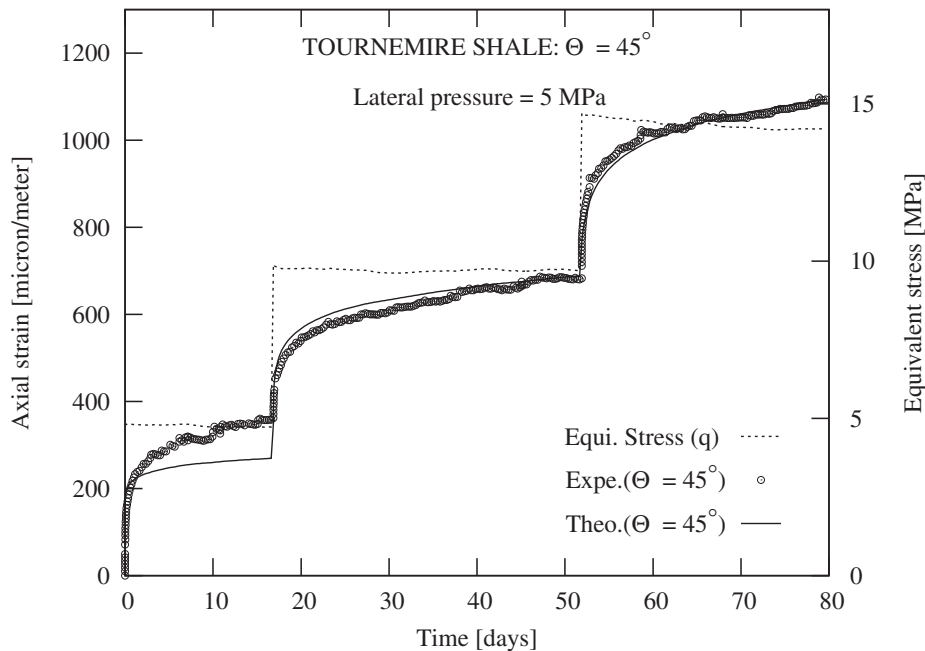


Figure 9. Comparison of the viscoplastic model with triaxial creep data,  $\Theta = 45^\circ$ .

Figure 8 shows the comparison of the predicted result with the measured data obtained under a constant axial pressure ( $Q = 25$  MPa) and for the orientations  $\Theta = 0$  and  $90^\circ$ . The solid line corresponds to the response of the model while experimental points are indicated by symbols.

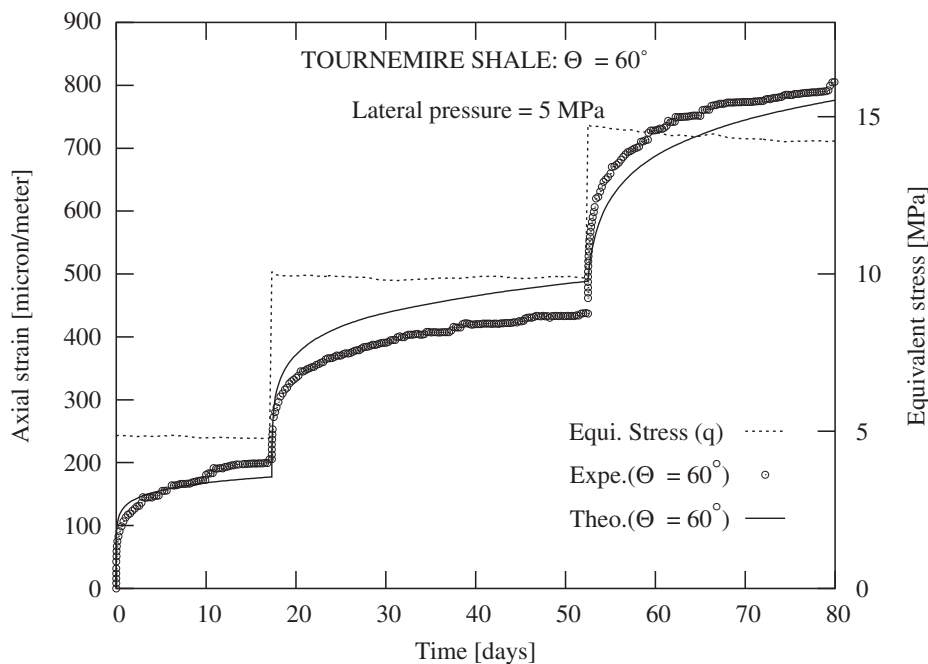


Figure 10. Comparison of the viscoplastic model with triaxial creep data,  $\Theta = 90^\circ$ .

Obtained results with multiple axial pressure ( $Q = 10, 15, 20$  MPa) are shown in Figures 9 and 10. These figures correspond to the orientations  $\Theta = 45$  and  $60^\circ$ .

As can be seen, the proposed model furnishes a rather good fit to the experimental data.

## 7. CONCLUSIONS

In this paper, the concept of the isotropic equivalent formulation has been developed for transversely isotropic materials. The findings of these developments have allowed us to perform two failure criteria and a viscoplastic constitutive model. The procedure for the identification of the material parameters from triaxial tests has been outlined. The application of this procedure to a transversely isotropic solid (Tournemire shale) has shown that theoretical predictions seem to be in good agreement with the experimental data.

Although the overall performance of this study, it should be noted that further experimental tests must be undertaken under different stress states, not only triaxial, to better evaluate the capacity of the proposed models to describe the behaviour of transversely isotropic solids.

## REFERENCES

1. Boehler JP, Sawczuk A. Equilibre limite des sols anisotropes. *Journal de Mécanique* 1970; **3**(1):5–33.
2. Boehler JP, Sawczuk A. On yielding of oriented solids. *Acta Mechanica* 1977; **27**:185–204.
3. Cazacu O, Cristescu ND, Shao JF, Henry JP. A new anisotropic failure criterion for transversely isotropic solids. *Mechanics of Cohesive-Frictional materials* 1998; **3**:89–103.
4. Nova R. The failure of transversely isotropic rocks in triaxial compression. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 1980; **7**(6):325–332.

5. Taliercio A, Sacchi Landriani G. A failure condition for layered rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 1988; **25**(5):299–305.
6. Matsuoka H, Nakai T. Stress-deformation and strength characteristics under three different principal stresses. *Proceedings of the JSCE* 1974; **232**:59–70.
7. Matsuoka H, Nakai T. A new failure condition for soils in the three dimensional stresses. In *Deformation and Failure of Granular Materials*, Delft, Vermeer PA, Luger HJ (eds). Balkema: Rotterdam, 1982.
8. Boehler JP. Yielding and failure of transversely isotropic solids. In *Application of Tensor Functions in Solid Mechanics*, Boehler JP (ed.), International Centre For Mechanical Sciences Courses and Lectures, vol. 292. Springer: Berlin, 1987; 67–97.
9. Spencer AJM. In *Theory of Invariants in Continuum Physics*, Eringen C (ed.). Academic Press: New York, 1971; 239–353.
10. Zheng QS. Theory of representations for tensor functions—a unified invariant approach to constitutive equations. *Applied Mechanics Review* 1994; **47**:545–587.
11. Lui IS. On the representation of anisotropic invariants. *International Journal of Engineering Science* 1982; **20**(10):1099–1109.
12. Truesdell C, Noll W. *The Non-linear Field Theories of Mechanics* (3rd edn). Springer: Berlin, 2004.
13. Hill R. *The Mathematical Theory of Plasticity*. Clarendon Press: Oxford, 1950.
14. Car E, Oller S, Onate E. A large strain plasticity model for anisotropic materials—composite material application. *International Journal of Plasticity* 2001; **17**:1437–1463.
15. Tijani SM, Vouille V, Hugout B. Le sel gemme en tant que liquide visqueux. *Proceedings of the 5th ISRM Symposium on Rock Mechanics*, Melbourne, Australia, 1983; D241–D246.
16. Rouabhi A, Tijani M, Rejeb A. Etudes expérimentale et théorique du comportement des argilites en vue de la compréhension des zones endommagées autour des ouvrages souterrains du site de Tournemire. *R051216AROU*, Centre de Géotechnique d'Exploitation du Sous-sol, Ecole des Mines de Paris, France, 2005.
17. Zienkiewicz OC, Pande GN. Some useful forms of isotropic yield surfaces for soil and rock mechanics. In *Finite Elements in Geomechanics*, Gudehus G (ed.). Wiley: New York, 1977; 179–190.
18. Humbert B, Vouille G. Argilite de Tournemire. *R99/4/ROC/MR*, Centre de Géotechnique d'Exploitation du Sous-sol, Ecole des Mines de Paris, France, 1999.
19. Nunez JC, Beaucaire C, Bruno G, De Windt L, Genty A, Ramambasoa N, Rejeb A, Savoye S, Volant P. Projet Tournemire. *DPRE/SERGD 01-19*, Département de Protection de l'Environnement, Institut de Protection et de Sécurité Nucléaire, France, 2001.



Contents lists available at ScienceDirect

# Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering

journal homepage: [www.rockgeotech.org](http://www.rockgeotech.org)

Full Length Article

## Phenomenological behavior of rock salt: On the influence of laboratory conditions on the dilatancy onset

A. Rouabhi <sup>a,\*</sup>, P. Labaune <sup>a</sup>, M. Tijani <sup>a</sup>, N. Gatelier <sup>b</sup>, G. Hévin <sup>c</sup><sup>a</sup> MINES ParisTech, PSL Research University, Centre de Géosciences, 35 rue St Honoré, Fontainebleau, 77300, France<sup>b</sup> Geostock Entrepose, 2 rue des Martinets, Rueil-Malmaison, 92500, France<sup>c</sup> Storengy, 12 rue Raoul Nordling, Bois-Colombes, 92274, France

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 12 August 2018

Received in revised form

16 October 2018

Accepted 14 December 2018

Available online 5 April 2019

#### Keywords:

Rock salt

Triaxial tests

Dilatancy onset

End restraint

Viscoplasticity

### ABSTRACT

Recently, stress-based dilatancy criteria have become essential tools to design underground facilities in salt formations such as gas storage caverns. However, these criteria can depend critically on the volumetric strain measurements used to deduce the dilatancy onset. Results from conventional triaxial compression tests can show different volumetric behavior depending on the loading conditions, as well as on the measurement techniques. In order to obtain a quantitative understanding of this problem, an experimental program was carried out and the testing procedure was investigated numerically under homogeneous and heterogeneous stress states. The experimental results showed that the deviatoric stress corresponding to the dilatancy onset was significantly dependent on the measurement techniques. With a heterogeneous stress state, the simulation results revealed that the strain measurements at different scales (referred to as local, hybrid or global) can provide different volumetric results with moderate to significant deviations from the idealized behavior, and hence different onsets of dilatancy. They also proved that, under low confinement, tensile stresses can take place within the compressed specimen, leading to a great deviation of the dilatancy onset from the idealized behavior. From both experimental and numerical investigations, the difference in sensitivity to the measurement techniques between the deviatoric and the volumetric behaviors is explained by the relatively small values of the volumetric strain. The non-ideal laboratory conditions have more impact on this strain than on the deviatoric one. These findings can have implications for the interpretation of the dilatancy behavior of rock salt, and hence on the geomechanical design aspects in salt formations.

© 2019 Institute of Rock and Soil Mechanics, Chinese Academy of Sciences. Production and hosting by Elsevier B.V. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

### 1. Introduction

To design underground facilities in salt formations, an engineering methodology consisting of two successive procedures has emerged during the last few years (e.g. [Staudtmeister and Rokahr, 1997](#); [Heusermann et al., 2003](#); [DeVries et al., 2005](#); [Bérest et al., 2008](#); [Sobolik and Ehgartner, 2011](#); [Moghadam et al., 2013, 2015](#); [Ghasemloonia and Butt, 2015](#); [Khaledi et al., 2016](#); [Wang et al., 2016](#); [Yang et al., 2016](#); [Wang et al., 2018a, b](#)): computation of the stress and strain fields using the strain-hardening behavior of rock salt, and then post-processing of the computed results according to some design criteria. Among these criteria are those based on the

dilatancy phenomenon corresponding to an irreversible material volume increase under compressive loading ([Spiers et al., 1989](#); [Hunsche, 1993](#); [Van Sambeek et al., 1993](#); [Hou, 2003](#); [DeVries et al., 2005](#); [Popp et al., 2012, 2017](#)). At the laboratory scale, this phenomenon is observed during conventional triaxial compression tests when the specimen volume starts decreasing and then increases, without any apparent macroscopic damage. In the stress space, the stress states corresponding to the dilatancy onset define, as in the case of yield and failure criteria, a boundary between the contracting and dilating behaviors of rock salt. Examples of such stress-based dilatancy criteria are given in [Fig. 1](#), where they are represented in the deviatoric stress–mean stress diagram for both compression and extension triaxial tests. Each curve of this figure is called the compressibility/dilatancy boundary or the dilatancy onset boundary (e.g. [Cristescu and Hunsche, 1998](#); [Hunsche and Hampel, 1999](#)). However, for a given rock salt, dilatancy onset can depend critically on the experimental data on which they are based.

\* Corresponding author.

E-mail address: [ahmed.rouabhi@mines-paristech.fr](mailto:ahmed.rouabhi@mines-paristech.fr) (A. Rouabhi).

Peer review under responsibility of Institute of Rock and Soil Mechanics, Chinese Academy of Sciences.

<https://doi.org/10.1016/j.jrmge.2018.12.011>1674-7755 © 2019 Institute of Rock and Soil Mechanics, Chinese Academy of Sciences. Production and hosting by Elsevier B.V. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).



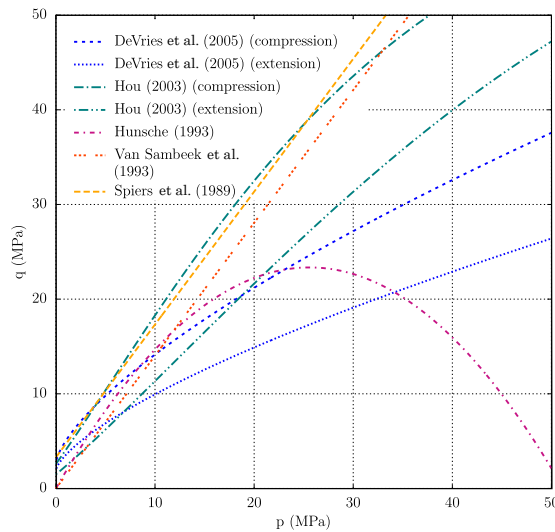


Fig. 1. Examples of stress-based dilatancy criteria obtained for different salt rocks plotted in the deviatoric stress–mean stress diagram, and expressed as functions of the three invariants ( $p, q, \theta$ ) of the stress tensor.

Indeed, in addition to the inevitable bias of specimen variability, many factors may significantly impact the data such as the specimen geometry, the material heterogeneity or the preconditioning of the specimen (DeVries and Mellegard, 2010; Medina-Cetina and Rechenmacher, 2010), and especially the loading conditions and the measurement techniques.

Concerning the loading conditions, only the effect of the confining pressure (see Fig. 1) and later, the effect of the intermediate principal stress (Hou, 2003; DeVries et al., 2005) have been investigated experimentally, but rare studies have been carried out on the influence of the loading rate, while it is admitted that rock salt exhibits very pronounced time-dependent behavior.

Regarding the measurement techniques, the combination of measurements obtained by different techniques may provide different results, and there is a risk to collect data which do not reflect the true behavior of the material and therefore determine erroneous constitutive properties. This major issue, as will be shown throughout this paper, is particularly important when dealing with the volumetric behavior; the deviatoric behavior is less sensitive to the techniques used. These techniques are ranging from very local techniques, using the smallest strain gauges (Brace et al., 1966), to hybrid techniques, using extensometers of various lengths (DeVries et al., 2005; Ingraham et al., 2014), to global techniques relative to the whole specimen, using the axial displacement between the loading platens and the amount of fluid injected or withdrawn from the triaxial cell to maintain a constant confining pressure (Crouch, 1970; Cipullo et al., 1985). Regardless of their global, local or hybrid nature, the obtained measurements are called “axial strain”, “radial strain”, “volumetric strain”, etc., and fitted with constitutive models without further analysis. Using any of these measurements alike implies that stress and strain distributions within the tested specimen are uniform, and thus the laboratory measurements on the boundary of the specimen, whether they are local or not, can directly be compared to the constitutive model predictions.

However, in practice, friction between the loading platens and the specimen ends causes heterogeneities in the stress and strain fields, and an initially perfect right cylinder deforms inevitably into a barrel (triaxial compression) or an hourglass (triaxial extension)

$$q = \left[ a \left( \frac{p}{\sigma_0} \right)^n + b \right] / \left[ \cos(\pi/3 - \theta) + c \sin(\pi/3 - \theta) \right]$$

$$a = 2.316 \text{ MPa}, n = 0.693 \quad \text{DeVries et al. (2005)}$$

$$b = 2.728 \text{ MPa}, c = 1.066, \sigma_0 = 1 \text{ MPa}$$


---


$$q = \eta_D(\sigma_3) \beta^{TC}(\sigma_3) k_\beta(\sigma_3, \theta), \sigma_3 = -p + (2/3)q \cos(\theta)$$

$$\eta_D = 1 - a_4 \exp(a_5 \sigma_3), \beta^{TC} = a_6 - a_7 \exp(a_8 \sigma_3)$$

$$k_\beta = \left[ \cos(\pi/3 - \theta) + a_9 \sin(\pi/3 - \theta) \right]^{-\exp(a_{10} \sigma_3)}$$

$$a_4 = 0.8, a_5 = 0.055 \text{ MPa}^{-1}, a_6 = 67 \text{ MPa} \quad \text{Hou (2003)}$$

$$a_7 = 67 \text{ MPa}, a_8 = 41 \text{ MPa}, a_9 = 0.25 \text{ MPa}^{-1}$$

$$a_{10} = 1, a_{10} = 0.25 \text{ MPa}^{-1}$$


---


$$q = ap^2 + bp$$

$$a = -0.0356 \text{ MPa}^{-1}, b = 1.82 \quad \text{Hunsche (1993)}$$


---


$$q = ap + b$$

$$a = 1.4, b = 0 \text{ MPa} \quad \text{Van Sambeek et al. (1993)}$$

$$a = 1.4, b = 3.3 \text{ MPa} \quad \text{Spiers et al. (1989)}$$


---


$$p = -\text{tr}(\underline{\underline{\sigma}})/3, q = \sqrt{3/2} \|\underline{\underline{\sigma}}'\|, \theta = \cos^{-1} \left[ \sqrt{6} \text{tr}(\underline{\underline{J}}^3) \right] / 3, \underline{\underline{J}} = \underline{\underline{\sigma}}' / \|\underline{\underline{\sigma}}'\|$$

shape. As a consequence, different strain measurements may provide different stress–strain curves, and therefore all we can deduce from these curves may be affected by errors which are very difficult to quantify. Different communities in solid mechanics and geotechnical engineering have been studying this issue. Analytical solutions can be found for elastic materials (Brady, 1971; Peng, 1971; Al-Chalabi and Huang, 1974; Chau and Wei, 2000; Wei and Chau, 2009). For more complex behaviors, several numerical studies have been carried out to investigate the effect of different factors on the measured stress–strain curves (Tijani, 1987; Sheng et al., 1997; Ibsen and Lade, 1999; Shilko, 2002; Liyanapathirana et al., 2005; Chemenda, 2015). There are however no studies on volumetric strain and how measurement techniques can affect the measured dilatancy onset.

The main purpose of this paper is to obtain quantitative understanding of the effects of the loading conditions and measurement techniques on the dilatancy onset. Ideally, to solve this question, it would have been necessary to conduct a detailed experimental program based on a highly instrumented device and including a great variety of testing conditions. However, such a program is very ambitious because of the limited number of identical specimens and the required advanced facilities. For this reason, we propose in this work, besides a classical experimental investigation, an extended numerical study. The experimental investigation was conducted to observe the effect of the end restraint and to identify an optimal set of material parameters that correctly reproduces the phenomenological observed behavior. The numerical study aims to go further ahead of the experimental analysis, while reducing uncertainties associated with the natural variability of specimens and with the measurement errors.

The paper is organized as follows. Section 2 presents briefly the background behind the volume change during triaxial tests and introduces the definitions of the different types of measurements and the main terms used in the paper. These definitions are used in both experimental and numerical investigations. Section 3 describes the constitutive model that was used in the numerical simulations. Section 4 presents the experimental data and provides the material parameters to be used as inputs for the simulations. The numerical investigation follows in Section 5. This study is

purely mechanical, and the thermal and hydraulic aspects are not considered.

**2. Volume change during triaxial tests: Global, local and hybrid measurements**

During conventional triaxial tests, the volume change of the specimen can be deduced by combining different types of information, for instance, (i) the global axial displacement between the loading platens, (ii) the amount of fluid displaced into or out of the triaxial cell to monitor the confining pressure, (iii) the global circumferential deformation using a chain extensometer, and (iv) the local measurements using electric resistance strain gauges attached at the mid-height of the lateral surface of the specimen. When the uniformity of the stress and strain fields is ensured, the combination of these different information leads necessarily to equivalent volume change measurement. However, as a consequence of friction that inevitably exists between the loading platens and the specimen ends, the specimen deforms non-uniformly during the test and a distinction between the different combinations becomes essential. This distinction is particularly important in the case of salt rocks, as they generally exhibit small volumetric behavior delicate to measure.

Consider a homogeneous and isotropic cylindrical specimen of radius  $R_0$  and height  $H_0$  subjected, during a conventional triaxial test, to an axial force  $F$  and a lateral confining pressure  $P$  (see Fig. 2). In a cylindrical coordinate system with unit base vectors  $(\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_z)$ , let the z-axis coincide with both the specimen axis and the loading force axis.

The time rate of change of the specimen volume  $\mathcal{V}(t)$  can be expressed as

$$\dot{\mathcal{V}} = - \int_{\Omega} \dot{\zeta} d\mathcal{V} = \int_{\partial\Omega} \vec{v} \cdot \vec{n} d\mathcal{A} \tag{1}$$

with  $\dot{\zeta} = -\text{tr}(\underline{\underline{\nabla}} \vec{v})^S$  the isotropic part of the strain rate tensor  $(\underline{\underline{\nabla}} \vec{v})^S$  representing the volume change rate of the material point, where  $\vec{v}$  is the velocity field vector associated with the transformation between the undeformed and deformed configurations of the specimen, and  $\vec{n}$  is the exterior unit normal vector to the specimen boundary  $\partial\Omega$ . The negative sign is introduced so that contractive strains are positive. According to Eq. (1), the volume change of the specimen can then be calculated by knowing only the movement of its boundary. This can experimentally be achieved by combining the measurements of the global axial displacement and the amount of the displaced confining fluid. Let  $\zeta_g$  denote this global volume change, defined as

$$\zeta_g = -(\mathcal{V} - \mathcal{V}_0) / \mathcal{V}_0 \tag{2}$$

where the subscript g is referring to global.

When using electric resistance strain gauges with small lengths, the local volume change determined by such techniques can be defined as

$$\zeta_l = -(2\varepsilon_\theta + \varepsilon_z) \tag{3}$$

where the subscript l is referring to local; and  $\varepsilon_\theta$  and  $\varepsilon_z$  are the tangential and axial strains, respectively.

When the volume change is deduced from the combination of the global axial displacement and a circumferential measure taken around the central part of the specimen, for instance using a chain extensometer or an extended circumferential gauge, this will give rise to an hybrid measurement which, to be directly interpreted, needs the assumption of a particular shape for the deformed specimen. In the case of a cylindrical shape, we can write this hybrid volume change as follows:

$$\zeta_h = -(\mathcal{V} - \tilde{V}_0) / \mathcal{V}_0 = 1 - (1 - \varepsilon_H)(1 + \varepsilon_{\tilde{R}})^2 \tag{4}$$

with

$$\varepsilon_H = -(H - H_0) / H_0, \varepsilon_{\tilde{R}} = (\tilde{R} - R_0) / R_0 \tag{5}$$

where the subscript h is referring to hybrid;  $\tilde{R}$  is the radius of the central part of the specimen;  $\tilde{V}$  is the volume of the right cylinder with radius  $\tilde{R}$  and height  $H$ ; and  $\varepsilon_H$  and  $\varepsilon_{\tilde{R}}$  are the axial and radial engineering strains (change of length per unit undeformed length), respectively. Remark that, in the particular case when  $\varepsilon_H \geq 0$  and  $\varepsilon_{\tilde{R}} \geq 0$  (the deformed specimen takes a barrel shape, see Fig. 2b), we have necessarily  $\mathcal{V} \leq \tilde{V}$ , and hence  $\zeta_g \geq \zeta_h$ . Furthermore, if we assume that  $\varepsilon_H \geq \varepsilon_{\tilde{R}}$  (which is generally the case), we can deduce that  $\zeta_g \geq \zeta_h \geq -2\varepsilon_{\tilde{R}} + \varepsilon_H$ .

As introduced before, the distinction between the different measurements (global, local and hybrid) is essential only when the specimen deforms non-uniformly during the test. However, when the uniformity is ensured, these strains are equivalent. Indeed, in this case, the strain rate tensor becomes  $(\underline{\underline{\nabla}} \vec{v})^S = \dot{L}_\theta (\vec{e}_r \otimes \vec{e}_r + \vec{e}_\theta \otimes \vec{e}_\theta) + \dot{L}_z \vec{e}_z \otimes \vec{e}_z$ , with  $L_\theta = \ln(R/R_0)$  and  $L_z = \ln(H/H_0)$ , where  $R$  and  $H$  are such that  $\mathcal{V} / \mathcal{V}_0 = (R/R_0)^2 (H/H_0)$ . Thus, we can deduce that  $\zeta = -(2L_\theta + L_z)$ , and then  $\mathcal{V} = \mathcal{V}_0 \exp(-\zeta)$ . As in our case,  $\zeta$  is small, unlike the axial and radial strains, we can write  $\zeta = -(\mathcal{V} - \mathcal{V}_0) / \mathcal{V}_0$ . Consequently, since  $\tilde{R} = R$ , it follows that  $\zeta = \zeta_h = \zeta_g$ . The fact that  $\zeta = \zeta_l$  comes from the homogeneity of the strain field.

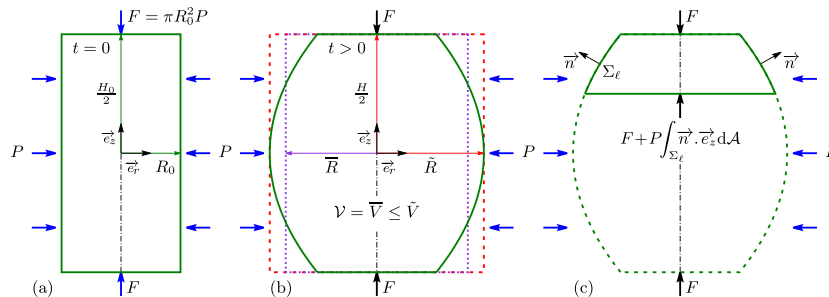


Fig. 2. A sketch of a specimen under triaxial conditions: (a) undeformed configuration, (b) a typical deformed configuration during a triaxial compression, and (c) an illustration of the axial contribution of  $P$ .

Let us now consider the measured stresses, which are unlike strains, are only global. Two kinds of loads are present: the pressure  $P$  applied by the confining fluid and the total axial load  $F$  acting on the platens. As functions of the Cauchy stress tensor  $\underline{\underline{\sigma}}$ , they can be defined as follows:

$$\left. \begin{aligned} F &= - \int_{\Sigma} \underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{e}_z \cdot \vec{e}_z d\mathcal{A} \\ P &= - \underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n} \cdot \vec{n} \text{ (for } \vec{x} \in \partial\Omega - \Sigma \text{)} \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

where  $\Sigma$  is the part of deformed boundary  $\partial\Omega$  where  $F$  is applied. Thus, due to the lateral deformation of the specimen and the influence of end restraint, the effect of the pressure  $P$  over the boundary  $\partial\Omega - \Sigma$  is not only radial but also axial at any point of the boundary. Consequently, in a given cross-section of the specimen, the global axial force is known throughout the loading process only if the axial contribution of  $P$  is negligible (see Fig. 2c). Moreover, in order to define a global true axial stress consistent with the Cauchy stress concept, that global axial force must be divided by the current cross-sectional area of the specimen. This section can differ significantly from the original area and may be different from one measurement technique to another since it can be deduced either from the lateral strain when dealing with local or hybrid measurements, or from the volumetrically equivalent right circular cylinder when dealing with global measurements.

For simplicity, since in this study our interest is not to characterize the rheological behavior of a particular rock salt, we will assume that the global axial stress, denoted by  $Q$ , is simply given by  $Q = F/(\pi R_0^2)$ . This assumption greatly simplifies our analysis without affecting the results qualitatively, especially because the methodology adopted in this work is basically comparative. With stresses assumed uniformly distributed in the specimen, the Cauchy stress tensor  $\underline{\underline{\sigma}}$  can therefore be expressed, in terms of  $P > 0$  and  $Q > 0$ , as follows:

$$\underline{\underline{\sigma}} = -P\underline{\underline{1}} - (Q - P)\vec{e}_z \otimes \vec{e}_z \quad (7)$$

In the following we will call the stress difference  $|Q - P|$  as the global deviatoric stress, and  $(2P + Q)/3$  as the global mean stress. Obviously, these global quantities coincide with their corresponding local stresses  $q = \sqrt{3/2}\|\underline{\underline{\sigma}}'\|$  and  $p = -\text{tr}(\underline{\underline{\sigma}})/3$  only under the uniformity assumption.

Finally, even if our primary interest is the volumetric response, it is also useful to examine the effect of different types of measurements on the distortion behavior. Let  $\gamma$ , the work conjugate variable of the deviatoric stress, be the distortion strain. The corresponding local, hybrid and global measurements can be respectively expressed as

$$\left. \begin{aligned} \gamma_l &= (2/3)|\varepsilon_\theta - \varepsilon_z| \\ \gamma_h &= (2/3)|\ln(1 + \varepsilon_{\bar{R}}) - \ln(1 - \varepsilon_H)| \\ \gamma_g &= (2/3)|\ln(1 + \varepsilon_{\bar{R}}) - \ln(1 - \varepsilon_H)| \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

with

$$\varepsilon_{\bar{R}} = (\bar{R} - R_0)/R_0 = \sqrt{(1 - \zeta_g)/(1 - \varepsilon_H)} - 1 \quad (9)$$

where  $\bar{R}$  is the radius of the volumetrically equivalent right circular cylinder ( $\mathcal{V}' = \bar{V}$ , see Fig. 2b).

### 3. Constitutive model

We assume that the material behavior is isotropic during the entire deformation history. This assumption is supported by the

fact that the micro-cracking activity associated with the inelastic volume change remains spread out within the volume of the sample, because the occurrence of the macroscopic dilatancy is observed well before any significant macro-crack. We also assume that the strain rate tensor  $(\underline{\underline{\nabla}} \cdot \vec{v})^S$  can be decomposed into an elastic part and a viscoplastic part denoted by  $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp}$ . The laws defining  $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp}$  are abundant in the literature, since during the last decades, a variety of constitutive models have been devoted to different aspects of rock salt behavior, including more and more physical phenomena, such as transient and stationary creep (e.g. Cristescu, 1993; Munson, 1997; Jin and Cristescu, 1998; Heusermann et al., 2003; Tijani, 2008), tertiary creep (e.g. Chan et al., 1994) or kinematic hardening (e.g. Aubertin et al., 1999).

In this work, we choose to use the recent phenomenological model developed by Labaune et al. (2018) because, besides the fact that it includes dilatancy at the constitutive level, it allows greater flexibility in the depiction of phenomena. It is based on Lemaître creep model (Tijani, 2008), a commonly used evolution law to describe the viscoplastic behavior of rock salt, and extended to include the effects of the mean stress and the Lode angle. In addition, in order to take into account the tension phenomenon observed during both low-confining-pressure triaxial compression and triaxial extension tests, a tension mechanism of Rankine-type was added to this model by assuming an additive decomposition of the total strain rate tensor  $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp}$  into tensile  $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp}^t$  and compressive  $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp}^c$  parts. In what follows we briefly describe the improved version of this model.

The compressive and tensile parts of the viscoplastic strain rate tensor  $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp}$  are decomposed in the basis  $(\underline{\underline{I}}, \underline{\underline{J}}, \underline{\underline{K}})$  defined as

$$\underline{\underline{I}} = \underline{\underline{1}}/\sqrt{3}, \underline{\underline{J}} = \underline{\underline{\sigma}}'/\|\underline{\underline{\sigma}}'\|, \underline{\underline{K}} = (\sqrt{2}\underline{\underline{I}} + \ell\underline{\underline{J}} - \sqrt{6}\underline{\underline{J}}^2)/\sqrt{1 - \ell^2} \quad (10)$$

where  $\underline{\underline{\sigma}}'$  is the deviatoric part of the stress tensor; and  $\ell = \sqrt{6} \text{tr}(\underline{\underline{J}}^3)$  is the third invariant of  $\underline{\underline{\sigma}}$  which, under triaxial stress conditions, ranges from  $\ell = 1$  in triaxial extension to  $\ell = -1$  in triaxial compression. When all principal stresses are distinct, the basis  $(\underline{\underline{I}}, \underline{\underline{J}}, \underline{\underline{K}})$  forms an orthonormal basis for the symmetric second-order tensors that are coaxial with  $\underline{\underline{\sigma}}$ .

Under compressive loading, the evolution law of  $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp}^c$  can be written as

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp}^c = -\sqrt{1/3}\dot{\zeta}_{vp}^c \underline{\underline{I}} + \sqrt{3/2}\dot{\gamma}_{vp}^c \underline{\underline{N}}^c \quad (11)$$

where  $\dot{\zeta}_{vp}^c = -\text{tr}(\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp}^c)$  and  $\dot{\gamma}_{vp}^c = \sqrt{2/3}\|\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp}^c\|$  are the rates of the volumetric strain and the viscoplastic distortion, respectively. The unit tensor  $\underline{\underline{N}}^c$ , used to define the deviatoric flow direction, is defined as follows:

$$\underline{\underline{N}}^c = [\underline{\underline{J}} - (\ell'/\ell)\underline{\underline{K}}]/\sqrt{1 + (\ell'/\ell)^2} \quad (12)$$

where  $\ell$  is a function introduced to account for differences in material behavior between triaxial compression and triaxial extension, with  $\ell'(\theta) = d\ell(\theta)/d\theta$ . Its expression as a function of the Lode angle  $\theta = \cos^{-1}\ell/3$  is as follows (Bigoni and Piccolroaz, 2004):

$$\ell(\theta) = \cos[\arccos(-\chi)/3]/\cos\{\arccos[\chi \cos(3\theta)]/3\} \quad (13)$$

where  $\chi$  is a constant material parameter.

Under tensile loading, the associated strain rate tensor  $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp}^t$  is assumed to be described by a mechanism of Rankine-type:

$$\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{vp}^t = \dot{\lambda} \frac{\partial G}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \quad (14)$$

with

$$G = \left( \langle \sigma_1 \rangle^d + \langle \sigma_2 \rangle^d + \langle \sigma_3 \rangle^d \right)^{1/d} \quad (15)$$

where  $\dot{\lambda}$  is a positive multiplier;  $\langle \cdot \rangle$  are the Macaulay brackets, i.e.  $\langle x \rangle = (x + |x|)/2$ ;  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3$  are the principal stresses of  $\underline{\underline{\sigma}}$ ; and  $d \geq 1$  is a constant parameter that determines the shape of the potential surface between the two limit cases of  $d = 1$  and  $d \rightarrow +\infty$ . The function  $G$ , used by Chaboche et al. (1994) and Carol et al. (2001) to model the damage of brittle materials, is differentiable for all stress states which reduce the numerical difficulties associated with the gradient calculation. When  $d$  tends to infinity, it approaches a Rankine-type model ( $G = \sigma_1$ ).

When the gradient of  $G$  with respect to  $\underline{\underline{\sigma}}$  is written in the basis  $(\underline{\underline{I}}, \underline{\underline{J}}, \underline{\underline{K}})$ , for consistency with the compressive part of the model, Eq. (14) can be rewritten as

$$\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{vp}^t = -\sqrt{1/3} \dot{\zeta}_{vp}^t \underline{\underline{I}} + \sqrt{3/2} \dot{\gamma}_{vp}^t \underline{\underline{N}}^t \quad (16)$$

with

$$\dot{\zeta}_{vp}^t = -\dot{\lambda} X, \dot{\gamma}_{vp}^t = \dot{\lambda} \sqrt{Y^2 + Z^2} \quad (17)$$

where the deviatoric tensor  $\underline{\underline{N}}^t$  and the quantities  $X$ ,  $Y$  and  $Z$  are such that

$$\left. \begin{aligned} \underline{\underline{N}}^t &= \left[ (Y \cos \theta + Z \sin \theta) \underline{\underline{J}} + (Z \cos \theta - Y \sin \theta) \underline{\underline{K}} \right] / \sqrt{Y^2 + Z^2} \\ X &= G'_1 + G'_2 + G'_3 \\ Y &= (2G'_1 - G'_2 - G'_3) / 3 \\ Z &= (G'_2 - G'_3) / \sqrt{3} \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

and  $G'_i = \langle \sigma_i / G \rangle^{d-1}$  is the principal value of  $\partial G / \partial \underline{\underline{\sigma}}$ .

Finally, the additive decomposition of the total strain rate tensor  $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{vp}$  into tensile  $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{vp}^c$  and compressive  $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{vp}^t$  parts, leads to

$$\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{vp} = -\sqrt{1/3} \dot{\zeta}_{vp}^c \underline{\underline{I}} + \sqrt{3/2} \left( \dot{\gamma}_{vp}^c \underline{\underline{N}}^c + \dot{\gamma}_{vp}^t \underline{\underline{N}}^t \right) \quad (19)$$

with  $\dot{\zeta}_{vp} = \dot{\zeta}_{vp}^c + \dot{\zeta}_{vp}^t$ . As can be seen from this equation, the tensile contribution acts on both components of  $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{vp}$ , volumetric and deviatoric.

To fully define  $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{vp}$ , the variables  $\dot{\gamma}_{vp}^c$ ,  $\dot{\zeta}_{vp}^c$  and  $\dot{\lambda}$  still need to be defined, which will be done as follows.

For the compressive part, the evolution law of  $\dot{\zeta}_{vp}^c$  is expressed as

$$\dot{\zeta}_{vp}^c = \psi(\underline{\underline{\sigma}}, \gamma_{vp}^c) \dot{\gamma}_{vp}^c \quad (20)$$

with

$$\psi(\underline{\underline{\sigma}}, \gamma_{vp}^c) = v \frac{\langle p/N \rangle^n - \gamma_{vp}^c}{\langle p/M \rangle^m + \gamma_{vp}^c} \quad (21)$$

and that corresponding to  $\dot{\gamma}_{vp}^c$  is given through a generalization of Lemaitre model, enriched with an influence of the mean pressure  $p$  and the Lode angle  $\theta$ :

$$\frac{d(\gamma_{vp}^c)^{1/a}}{dt} = \left\langle \left[ q/\varrho(\theta) - (\gamma_{vp}^c)^b Bp - C \right] / K \right\rangle^{k/a} \quad (22)$$

In Eq. (21), the sign of  $\langle p/N \rangle^n - \gamma_{vp}^c$  indicates whether the behavior is contracting or dilating.

Regarding the tensile part, we consider an evolution law of Perzyna-type:

$$\dot{\lambda} = A \langle (G - R_t) / S \rangle^s \quad (23)$$

In Eqs. (21)–(23),  $v$ ,  $n$ ,  $m$ ,  $a$ ,  $b$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $k$ ,  $A$ ,  $R_t$ ,  $s$ ,  $M$ ,  $N$ ,  $K$  and  $S$  are the material parameters. The moduli  $M$ ,  $N$ ,  $K$  and  $S$  may depend on the thermodynamic state to represent the effects of temperature, softening or other phenomena. However, in this study, they are assumed to remain constant.

#### 4. Experimental data and material parameters

We present some typical results obtained from an experimental campaign conducted on a rock salt cylindrical specimens with a diameter of 65 mm and a height of 130 mm. The specimens were obtained from core samples taken at a depth of nearly 1330 m in a salt dome situated in the Landes region of the southwest of France. The geological description indicated that those specimens are halite salt with a content of insoluble materials lying between 4% and 7%. The results for nine of the performed tests are presented in this section: two short-term uniaxial tests, six short-term triaxial tests with three different levels of confining pressure (5 MPa, 10 MPa and 15 MPa), and one creep test at constant confining pressure (5 MPa) with three stages of the deviatoric stress (5 MPa, 10 MPa and 15 MPa). All of them were conducted at room temperature (22 °C). Each test includes an isotropic phase during which the specimen is loaded hydrostatically to the target pressure, followed by a deviatoric phase during which the confining pressure is held constant and the global axial stress is increased. Only the deviatoric phase is analyzed in this work. Any irreversible damage caused during the isotropic phase is thus neglected; this assumption is generally accepted by most of the literature on rock materials (Ulusay, 2015).

Short-term tests were loaded axially by a servo-hydraulic material test system (MTS) under a constant strain rate of  $5 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ . Confined tests were performed in a triaxial cell capable of supporting up to 20 MPa of confining pressure and regulated by a pressure/volume controller. During the tests, each specimen was submitted to three loading–unloading cycles in order to ensure, on one hand, the right behavior of gauges and, on the other hand, the accurate determination thereafter of the elastic parameters. The local axial and circumferential strains were measured by strain gauges attached at the mid-height of each specimen. The global axial displacement was measured by means of a linear variable differential transducer (LVDT) sensor. The global volume change of the confined tests was measured from the volume change of the confining fluid. For these tests, hybrid measurements using a circumferential chain extensometer were difficult to obtain without degrading the sensitivity of the global volume measurements since, with this technique, larger confining cells are needed and therefore the volume of the confining fluid is more important. Neither hybrid nor global measurements were exploited for the unconfined tests.

The multistage creep test was carried out during a period of 45 d in a triaxial cell and submitted to an axial and a lateral pressures applied by a pressurized oil system. Neither local strain nor global volume change was measured. The global axial displacement was measured with an LVDT sensor as for the short-term tests.



Experimental results and model response of all tests are shown in Figs. 3–7. Each figure includes experimental strains measured with one or two different methods. Fig. 3 shows the uniaxial short-term tests; Figs. 4–6 show the short-term tests with the confining pressures of 5 MPa, 10 MPa and 15 MPa, respectively; and Fig. 7 shows the long-term creep test. For the short-term tests, the stress–strain responses are presented in two graphs showing the global deviatoric stress versus the volumetric strain on the left, and the global deviatoric stress versus the distortion strain on the right. For the long-term test, the global axial strain as well as the global deviatoric stress is plotted as a function of time.

Figs. 3–7 also include the model response obtained through a global fitting procedure based on the global measurements of all the collected data (global–global fitting), and on the assumption of uniformity of the stress and strain fields. This fitting procedure was performed as follows. The elastic parameters (Young's modulus  $E$ , and Poisson's ratio  $\nu$ ) were fitted using the loading–unloading cycles of the short-term triaxial tests. Then the other parameters were fitted in two steps: the parameters related to distortion by fitting  $\gamma_{vp}^c$  (evolution law Eq. (22)), and the parameters related to dilatancy by fitting  $\zeta_{vp}^c$  (evolution law Eq. (20)). It is important to note that since the expression of  $\zeta_{vp}^c$  depends on  $\gamma_{vp}^c$ , it can be fitted in two different ways: using the previously-fitted values for  $\gamma_{vp}^c$ , or the experimental values. In this study, we decided to use the experimental values to ensure the independence of the two steps. All the fittings were performed using an error minimization procedure based on the least square method. The fitted parameters are listed in Table 1. Since the stress state was compressive during all the tests, the parameters related to the Lode angle dependency (Eq. (13)) as well as those related to the tension mechanism (Eq. (23)) were not fitted. They were considered in the following numerical simulations as arbitrary constants that will be fixed through parametric investigations.

Several conclusions can be drawn from those figures. First, we can see that the volumetric behavior is critically dependent on the used measurement techniques, unlike the deviatoric behavior where the difference between local and global measurements is rather limited and may remain within the experimental error limits. It is well known that strain gauges measures could be misleading due to highly localized deformations but, in our case, no strain localization phenomena were observed and dilatancy occurred without any significant apparent damage. Moreover, if we judge their behavior based on the loading–unloading cycles during the whole duration of each test, they seem to behave rather correctly since the rigidity is substantially the same for the different cycles. Thus, the difference between local and global measurements cannot be associated only with gauge dysfunctions.

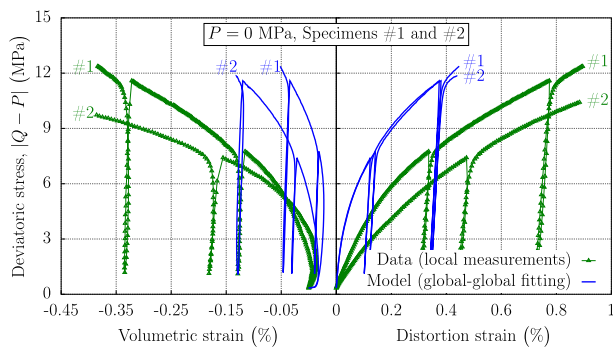


Fig. 3. Measured stress–strain curves for uniaxial compression tests, compared with the global–global fitting.

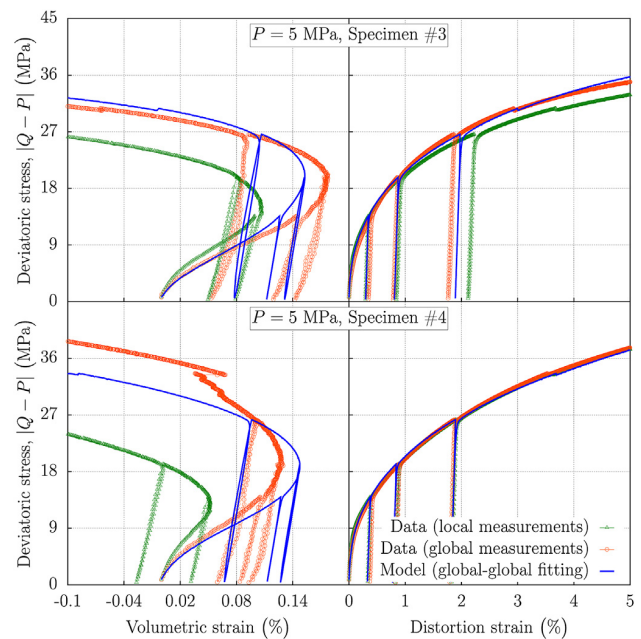


Fig. 4. Measured stress–strain curves for triaxial compression tests under confining pressure  $P = 5$  MPa, compared with the global–global fitting.

Second, for a given confining pressure, the variation from one specimen to another seems to have a more significant effect on the volumetric response than on the deviatoric response, especially when considering the local measurements. Any information deduced from the volumetric response is thus impacted by both the used measurement techniques and the specimen variability. The numerical study presented thereafter allows to set aside the natural

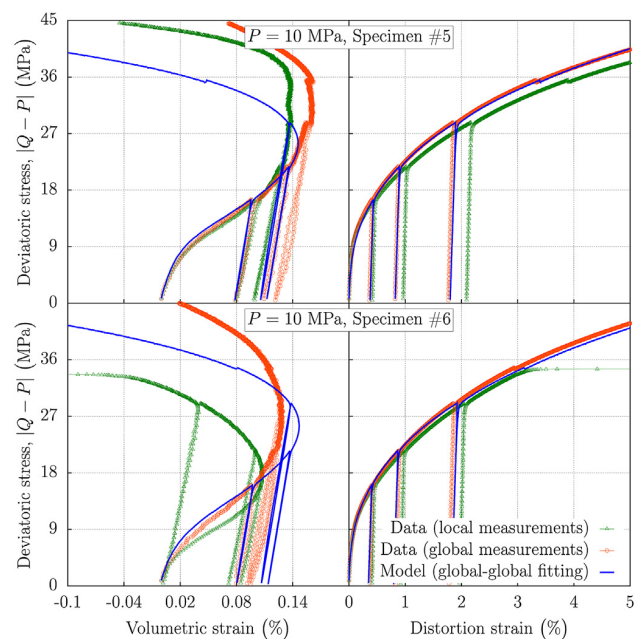


Fig. 5. Measured stress–strain curves for triaxial compression tests under confining pressure  $P = 10$  MPa, compared with the global–global fitting.

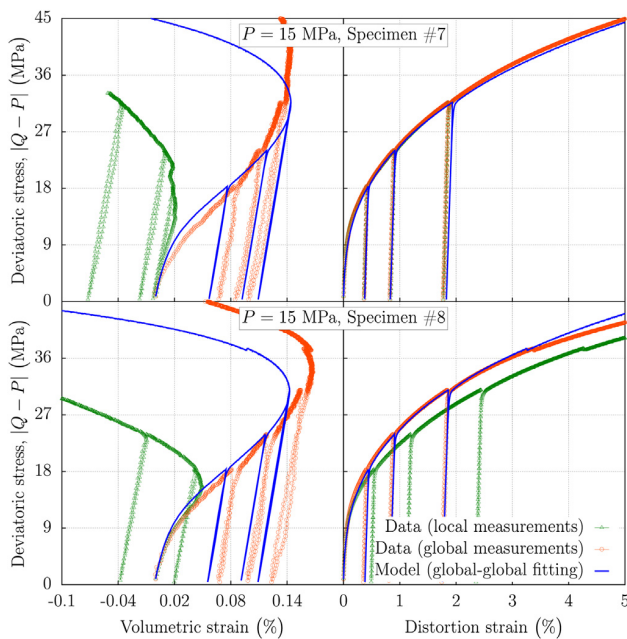


Fig. 6. Measured stress–strain curves for triaxial compression tests under confining pressure  $P = 15$  MPa, compared with the global-global fitting.

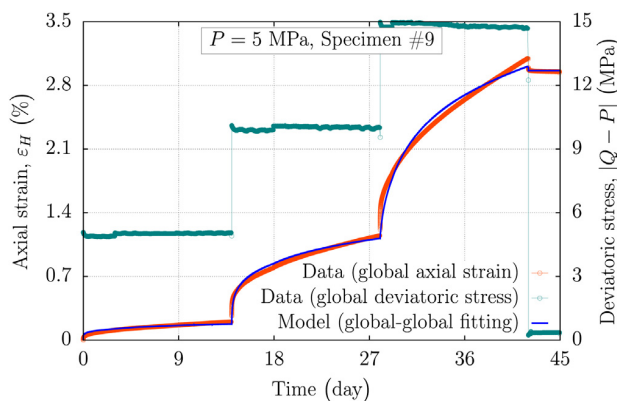


Fig. 7. Measured creep axial strain versus time under three deviatoric stresses (5 MPa, 10 MPa and 15 MPa), compared with the global-global fitting.

variability and study only the question of uncertainties associated with the type of the measurement techniques.

Third, based on the obtained measurements for the confined tests, it seems that the onset of the dilatancy phenomenon, which can be deduced from the sign change of the inelastic volumetric strain rate, occurs for relatively small volumetric strains; the maximum value is around 0.17%, obtained by the global measurements for the highest confining pressure of 15 MPa. Therefore, the difference in sensitivity to the measurement techniques between the deviatoric and the volumetric behaviors can be explained by the fact that the strain volumetric component is relatively small, and consequently it is more affected by the non-ideal laboratory conditions than the deviatoric component. Notice that the small values of the volumetric strains are not only specific to the present study but also characterize rock salt in general. This explains why in practical applications the strain volumetric component was often

**Table 1**  
Rock salt material constants.

Parameter	Unit	Value	
Elastic	$E$	MPa	27,610
	$\nu$		0.32
Eq. (21)	$\nu$		0.256
	$n$		0.972
	$N$	MPa $(\mu\text{m}^{-1} \text{m})^{1/n}$	0.0012
	$m$		2.378
Eq. (22)	$M$	MPa $(\mu\text{m}^{-1} \text{m})^{1/m}$	0.334
	$a$		0.29
	$b$		0.24
	$B$	$(\mu\text{m}^{-1} \text{m})^b$	0.044
	$C$	MPa	0
	$k$		2.2
	$K$	MPa $(\mu\text{m}^{-1} \text{m d}^a)^{1/k}$	0.128
Eq. (23)	$\chi$		0
	$R_t$	MPa	0
	$S$	MPa	0.1
	$s$		0.25
	$d$		10
	$A$	$\mu\text{m m}^{-1} \text{d}^{-1}$	0

ignored in favor of the deviatoric component, especially in the case of salt cavern creep problems.

Fourth, we can notice that the model is capable of simultaneously fitting all the experimental data with the same parameter set. Obviously, a better fit could be obtained by considering individual tests but it would give rise to different parameter sets. Remark that model results for the unconfined tests are in much more disagreement with the local measurements than those for confined tests, not only in terms of the volumetric behavior, but also in terms of the deviatoric behavior. It is generally accepted that results of unconfined and low confined tests are less reliable than those of high confined tests, but since no quantitative arguments can be advanced to explain their unreliability and inaccuracy, it is then difficult to quantify the disagreement between the model and the measurements. Under low confinement pressure, the friction between the platens and the specimen ends seems to cause tensile stresses, as we shall show in the numerical investigations (Section 5), which may explain this difference between the model, which assumes uniform and only compressive stress state, and the measurements.

In determination of the material parameters of Table 1, it has been assumed that the strain and stress states are homogeneous in the specimen but, as might be deduced from the difference between local and global measurements, it is highly probable that these distributions were heterogeneous during the actual tests. Hence, by no means those parameters values could be considered as intrinsic material properties which can be used directly in the constitutive laws. The best way to better interpret the experimental results is to use a numerical fitting process that considers the tested specimen as an instrumented structure subjected to boundary conditions; those determined parameters values might then be used as starting values for this process. However, as in this work the main focus is not the accurate characterization of a particular rock salt as already mentioned above, we will use in the following sections the material parameters of Table 1 since they can correctly reproduce the phenomenological observed behavior, whether it is volumetric or deviatoric.

## 5. Numerical investigation

The objective of the numerical simulations is to obtain a quantitative understanding on how the measurement techniques, the loading rate, the confining pressure and the intermediate principal

stress can influence the dilatancy onset and the stress spatial distribution within the specimen at the time when this onset is observed. A summary of the main results is given in Section 5.5.

All numerical simulations were carried out within the large deformation framework using the finite element code VIPLEF developed by MINES ParisTech (Tijani, 1996). In this code, large strain computations are taken into account by using the updated Lagrangian approach (Fung and Tong, 2001) which consists of decomposing the body motion into small steps and by updating the body geometry as well as the stress state. The principal reason to consider such a framework is to take into account the finite geometry changes during the loading process in order to accurately calculate the specimen volume. Although the volume change is rather small (less than 0.2% in the present study), the error associated with the small strain assumption indeed greatly impacts the volume change calculation.

In those simulations, our attention was restricted to the two extreme conditions of specimen-platen contact: smooth contact where there is no friction between the specimen and the loading platens (ideal case representing the idealized testing conditions), and rough contact where there is a complete radial restraint at the specimen ends. Since the simulated specimen and loads were symmetric with respect to the  $z$ -axis, only a quarter of the specimen was simulated. A uniform mesh with 2000 nine-node quadrilateral elements was used in the case with rough contact. Only one nine-node quadrilateral element was used in the case of smooth contact because the stresses and strains are uniform throughout the specimen.

The constitutive model of Section 3 was implemented in VIPLEF and the model parameters were taken from Table 1. The parameters  $\chi$  and  $\lambda$  that control the Lode angle dependency and the tensile behavior, respectively, may vary between the following numerical simulations: the value of each of them is either zero (reference value) or given in the captions of the figures showing the corresponding numerical results. Parameters  $R_t$ ,  $S$  and  $s$ , useful only when  $\lambda$  is non-zero, are kept constant and their values are equal to the reference values given in Table 1.

As in the experimental case, the initial conditions are taken to correspond to the end of the isotropic phase. Concerning the boundary conditions, two types of boundary conditions are investigated. The first one corresponds to triaxial compression tests (constant axial strain rate  $\dot{\epsilon}_H$  and constant confining pressure  $P$ ). The second one, chosen to study the effects of the intermediate principal stress, corresponds to triaxial extension tests (constant axial stress rate  $\dot{Q}$  and constant confining pressure rate  $\dot{P}$ ). To simplify the notations, in the following we refer to these conditions as strain- and stress-controlled, respectively.

The principal numerical results are of two types: those representing the stress–strain curves and those representing, at fixed times, the spatial distribution of some variables of interest.

The former results, which are interpreted numerically in a manner similar to the interpretation of laboratory measurements, are systematically given for the three types of measurements considered in this paper: local, hybrid and global, and for both types of specimen-platen contacts: smooth and rough. In each case, given that we focus on the influence of the laboratory conditions on the dilatancy onset, the deviatoric stress corresponding to this onset is indicated (horizontal dashed lines) in the global deviatoric stress–volumetric strain diagram. This deviatoric stress, referred in what follows as the dilatancy deviatoric stress, is calculated according to the formula  $d\zeta_{vp}/d|Q - P| = 0$ , which determines the dilatancy onset at the maximum of the volumetric viscoplastic strain with respect to the global deviatoric stress. In the case of the smooth contact (homogeneous stress state), all the curves coincide completely

with each other and the condition corresponding to the dilatancy onset is equivalent to  $\zeta_{vp} = 0$ . In this case, those curves are indicated using a bar over the variable, such as  $\bar{\zeta}$  or  $\bar{\gamma}$ , and the dilatancy deviatoric stress is denoted by  $\bar{q}^*$ .

Regarding the spatial distributions, the results concern the contour maps either of the major principal stress  $\sigma_1$  or of the function  $\hat{\varphi}$  defined by  $\hat{\varphi} = (1 - \varphi/\bar{\varphi}) \times 100$ , where  $\varphi$  and  $\bar{\varphi}$  are the functions associated with the deformed specimen with and without end restraint, respectively. The function  $\hat{\varphi}$ , representing in this study one of the three invariants  $\hat{p}$ ,  $\hat{q}$  and  $\hat{\lambda}$ , defines a relative deviation from the ideal situation. The time at which those spatial distributions are plotted is the time  $t^*$  corresponding to  $\dot{\zeta}_{vp} = 0$  in the ideal case, unless otherwise indicated. All contours are plotted on the deformed specimen where the displacement is scaled uniformly by a factor  $A$  (values specified in the caption of the figures) in order to amplify the deformation. Moreover, to better separate negative from positive contours, all results are plotted on the upper half of the specimen with negative values on the left and positive values on the right. For comparison purposes, the geometry of the deformed specimen without end restraint as well as the initial geometry is also added to these plots.

### 5.1. Measurement technique effects

In these investigations, the axial strain rate  $\dot{\epsilon}_H$  is fixed to  $10^{-5} \text{ s}^{-1}$  and the confining pressure  $P$  is fixed to 10 MPa.

Fig. 8 shows the stress–strain curves obtained using the parameters of Table 1. As expected for the deviatoric behavior, the different numerical measurements remain relatively close to one another and respect the fact that the local and global measurements are the closest and the farthest to the ideal case, respectively. The hybrid measurements are situated between these two extremes. Overall, the differences between the local and global measurements are in the same order of magnitude as those arising from experimental data. In contrast, for the volumetric behavior, the numerical measurements are quite different from each other, especially the hybrid ones, the ideal case is situated between the local and global measurements, and the differences between these measurements are clearly less important than those arising from experimental data.

The observed differences in the volumetric stress–strain curves have a direct impact on the global dilatancy deviatoric stress (represented by the horizontal dashed lines in Fig. 8). Compared to the ideal case ( $\approx 27 \text{ MPa}$ ), the dilatancy deviatoric stress is overestimated by the global measurements ( $\approx 29 \text{ MPa}$ ), while it is

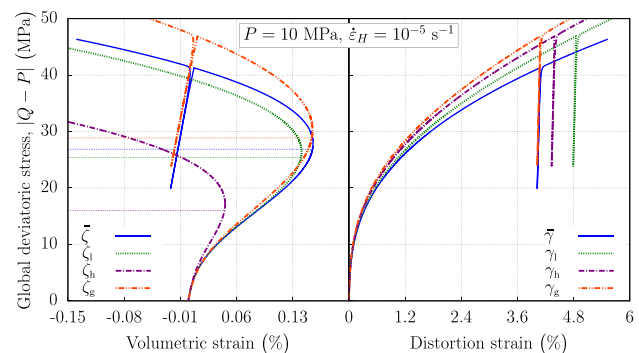


Fig. 8. Numerical stress–strain curves for a triaxial compression test.

underestimated by local measurements ( $\approx 25$  MPa); the worst scenario is given by the hybrid measurements ( $\approx 16$  MPa).

5.2. Loading rate effects

In these investigations, the confining pressure  $P$  is fixed to 10 MPa and the numerical tests are carried out for different axial strain rates  $\dot{\epsilon}_H$ .

Fig. 9 shows the deviatoric stress  $\bar{q}^*$  (normalized by its value  $\bar{q}^{**}$ , obtained for  $\dot{\epsilon}_H = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ ) as a function of the axial engineering strain rate  $\dot{\epsilon}_H$  for a range between  $10^{-7} \text{ s}^{-1}$  and  $10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . From this figure, it is clear that the dilatancy deviatoric stress increases significantly with the loading rate, by nearly 40% in the range between  $5 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$  and  $5 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$  generally found in laboratory testing programs.

Regarding the case with end restraint, Fig. 10 shows, at the time  $t^*$ , the contour maps of  $\bar{q}$  for three different strain rates  $\dot{\epsilon}_H$ . As can be observed from this figure, for the case with rough contact, the deformation of the specimen in a barrel-shape induces a large deviation from the ideal case. Close to the interface between the specimen ends and platens, the deviatoric stress  $q$  is excessively overestimated, whereas it is underestimated elsewhere, with a maximum value around 15% at a distance of about  $H/4$  from the end surface. Under the considered strain

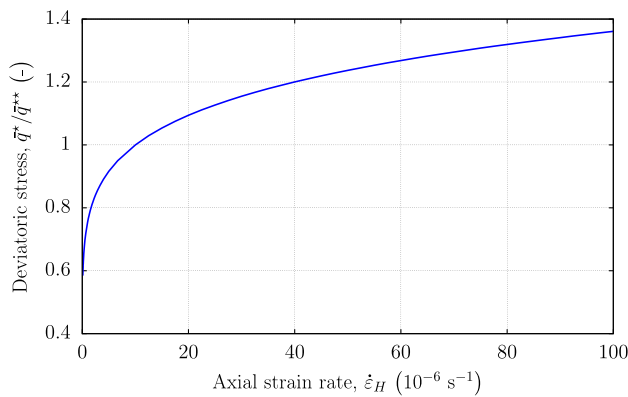


Fig. 9. Effect of the loading rate on the dilatancy deviatoric stress in the ideal case.

rates, the material's viscosity seems however to have only a slight influence on the spatial distribution of  $\bar{q}$  as can also be deduced from Fig. 10.

5.3. Confining pressure effects

In these investigations, the axial strain rate  $\dot{\epsilon}_H$  is fixed to  $10^{-5} \text{ s}^{-1}$  and the numerical tests are carried out for different confining pressures  $P$ .

Fig. 11 shows, for the ideal case, the deviatoric stress  $\bar{q}^*$  (normalized by its value  $\bar{q}^{**}$ , obtained for  $P = 10$  MPa) as a function of the confining pressure  $P$ . As expected from the formulation of the constitutive model and in accordance qualitatively with the data of Fig. 1, the dilatancy deviatoric stress  $\bar{q}^*$  increases with the confining pressure, and hence with the mean pressure.

Regarding the case with end restraint, we shall distinguish in what follows between low confining pressure and high confining pressure. In fact, the end restraint may cause the major principal stress to deviate from the compressive regime, depending on the value of the confining pressure.

5.3.1. Low confining pressure

Fig. 12 shows, at the time  $t^*$ , the contour maps of  $\sigma_1$  for the unconfined case ( $P = 0$  MPa) and for two low confining pressures  $P$  (0.2 MPa and 0.5 MPa), knowing that the authors are aware that very low confining pressures are experimentally difficult to handle but were only studied in order to understand the effects of the presence of tensile zones on the dilatancy deviatoric stress. As can be seen, with rough contact, the heterogeneity of the stress field induces tensile zones ( $\sigma_1 > 0$ ) inside the specimen whose extent decreases as the confining pressure increases.

When the tension mechanism is ignored ( $A = 0$ ), the stress-strain curves are qualitatively similar to those of Fig. 8. However, they can greatly differ when that mechanism is activated. Fig. 13 shows a typical result obtained for an unconfined test using the parameters of Table 1, except parameter  $A$  which is given in the caption of Fig. 13. As we can see, this might suggest, especially when omitting the global method since it cannot be experimentally used in this case, that the condition of homogeneity is satisfied (local and hybrid measurements coincide), while in fact the real stress field in the specimen is far from uniform and the true dilatancy deviatoric stress is significantly underestimated ( $\approx 5$  MPa instead of 13 MPa). Note that the activation of the tension mechanism has no significant effect on

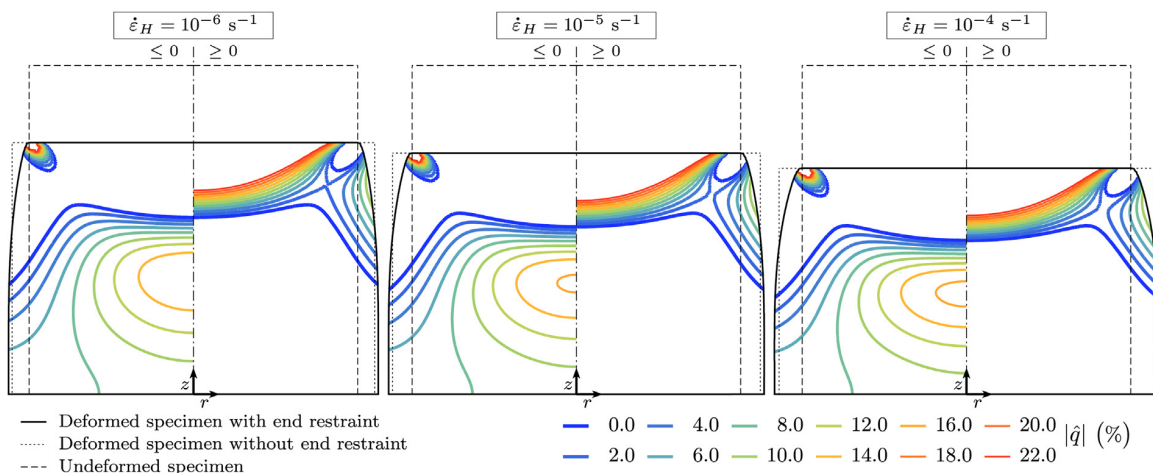


Fig. 10. Contour maps of the relative variation  $\bar{q}$  for three loading rates, with displacement scaling factor  $A = 20$ .



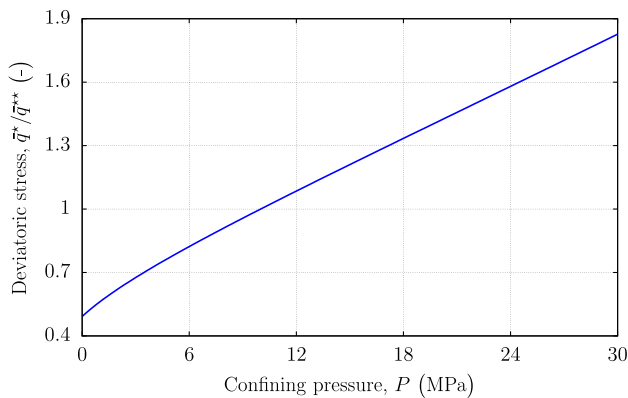


Fig. 11. Effect of the confining pressure on the dilatancy deviatoric stress in the ideal case.

the deviatoric behavior. It is also worth noting that the parameter  $R_t$  in the tension mechanism (Eq. (23)) is assumed to be equal to zero which is consistent with the compression mechanism (the parameter  $C$  in Eq. (23), representing the cohesion, was found to be effectively zero) and with the fact that rock salt is very often considered without any intrinsic cohesion (e.g. Tijani, 2008).

### 5.3.2. High confining pressure

In previous investigations, it was deduced that, once the confining pressure exceeds a few MPa, about 1 MPa in the case treated in this paper, the major principal stress within the specimen remains always negative, thereby enabling only the compression mechanism.

Figs. 14–16 show the contour maps of the relative variations  $\hat{p}$ ,  $\hat{q}$  and  $\hat{\ell}$  corresponding respectively to the three invariants  $p$ ,  $q$  and  $\ell$ , for three confining pressures (5 MPa, 10 MPa and 15 MPa). As can be observed from these figures, the confining pressure value does not really influence the stress field distribution within the specimen. In contrast, for a given confining pressure value, the end restraint seems to significantly influence this distribution, especially the first and the second invariants  $p$  and  $q$ ; the third invariant  $\ell$  for its part remains, except in a small zone close to the specimen-platen interface, relatively close to the ideal case which corresponds in this case to  $\bar{\ell} = -1$ .

### 5.4. Intermediate principal stress effects

To assess the effect of the intermediate principal stress, we investigate in this section stress-controlled numerical tests based on constant global mean pressure  $(2P + Q)/3$  rather than on constant confining pressure  $P$ . This choice is motivated by the fact that such tests are recently used in the literature to study in particular the dilatational behavior of rock salt (e.g. DeVries et al., 2005; Mellegard et al., 2005) since, in this case, the determination of the dilatancy deviatoric stress, under the assumption of homogeneous stress field, is straightforward. Practically, to keep the global mean pressure constant during the deviatoric phase, the rates  $\dot{Q}$  and  $\dot{P}$  of respectively the axial and the lateral pressures are applied such that  $2\dot{P} + \dot{Q} = 0$ . Tests are terminated when one of the pressures reaches zero.

In these investigations, the axial pressure rate  $|\dot{Q}|$  and the global mean pressure  $(2P + Q)/3$  are fixed to 10 MPa/d and 15 MPa, respectively. The global mean pressure value is selected such that neither of the loading pressures reaches zero before the dilatancy onset.

As in the previous sections, we begin our analysis by first investigating the model's response in the ideal case. Fig. 17 shows the deviatoric stress  $\bar{q}^*$  (normalized by its value  $\bar{q}^{**}$ , obtained for  $\chi = 0$ ) as a function of the parameter  $\chi$  which controls the effect of the intermediate principal stress by acting on the difference in material behavior between triaxial compression and triaxial extension. Depending on the value of the parameter  $\chi$ , ranging from 0 to 1 ( $\varrho(\theta) \in [0.5, 1]$ ), the dilatancy deviatoric stress  $\bar{q}^*$  decreases as  $\chi$  increases, with a nonlinear behavior when  $\chi$  approaches 1.

Regarding the case with end restraint, let us first consider the difference between the compression ( $\bar{\ell} = -1$ ) and extension ( $\bar{\ell} = 1$ ) tests without the effect of  $\chi$  (i.e.  $\chi = 0$  in both cases). Fig. 18 shows the stress–strain curves for both cases. Four observations can be drawn from these results. First, the stress-controlled compression test has qualitatively the same behavior as that observed in the previous strain-controlled tests. Second, the local and especially the global numerical measurements of the extension test are closer to the ideal case than those of the compression test. Third, the hybrid numerical measurements are very different from one another: the true dilatancy deviatoric stress ( $\approx 17$  MPa) is underestimated in the compression test ( $\approx 11$  MPa), while it is overestimated in the extension test ( $\approx 20$  MPa). Fourth, for both cases, the deviatoric behavior shows

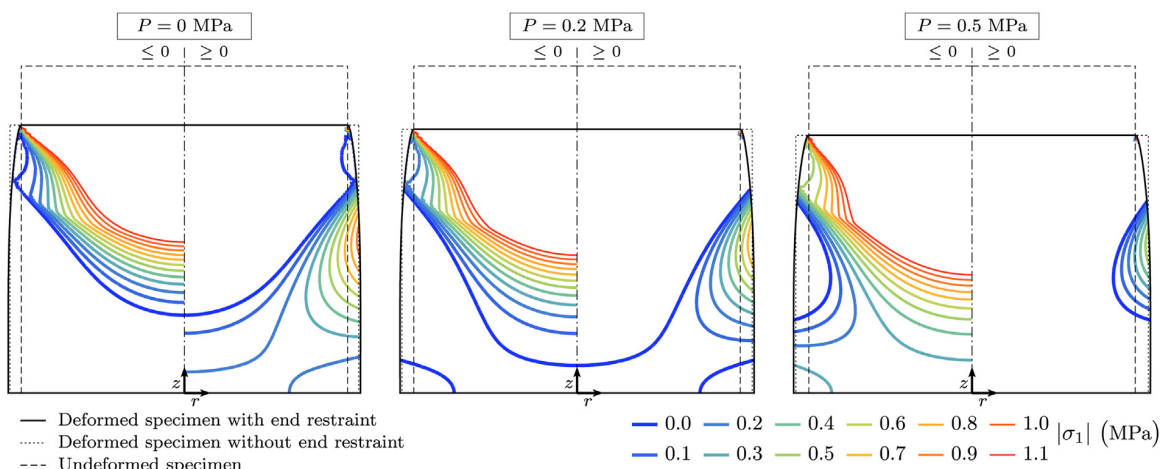


Fig. 12. Contour maps of the major principal stress  $\sigma_1$  (tension positive) for three low confining pressures, with displacement scaling factor  $A = 50$ .

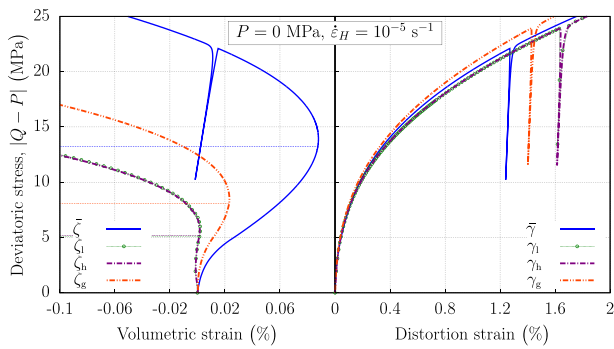


Fig. 13. Numerical stress–strain curves for an uniaxial compression test, with tensile multiplier  $\lambda = 10^6$ .

less difference with the ideal case than that observed with the strain-controlled tests, particularly in terms of local measurements. This observation is consistent with the fact that the stress field within the specimen is, in this case, rather homogeneous in the central part of the specimen, as can be seen in Figs. 19–21

showing, for three values of  $\chi$ , the contour maps of the relative variations  $\hat{p}$ ,  $\hat{q}$  and  $\hat{\ell}$ .

As can also be observed from those figures, besides the fact that in this case the specimen becomes hourglass-shaped as a consequence of end restraint, the stress distribution is clearly influenced by the value of  $\chi$  as  $\chi$  increases, i.e. Lode angle dependency increases, the heterogeneity of the invariants  $p$  and  $\ell$  increases; the deviatoric stress  $q$  for its part seems to vary slightly with  $\chi$ , in particular in the middle part of the specimen.

Unlike strain-controlled tests under high confining pressure, the major principal stress  $\sigma_1$  within the specimen can become positive during the constant mean pressure tests even under high mean pressure as can be seen from Fig. 22 showing, for three times around  $t^*$ , the contour maps of  $\sigma_1$ . The end restraint leads to the emergence of two tension zones ( $\sigma_1 > 0$ ) that join during the test: one smaller which starts earlier in the test at the end corners of the specimen, and one larger which starts after the dilatancy onset at a distance of about  $H/8$  from the end surface. Those zones could have an impact on the stress–strain curves, as in the case of the strain-controlled tests under low confining pressure. Fig. 23 shows an example of behavior obtained when activating the tension mechanism (with the same parameter  $\lambda$  as that in Fig. 13). When compared to the case with  $\lambda = 0$  (see

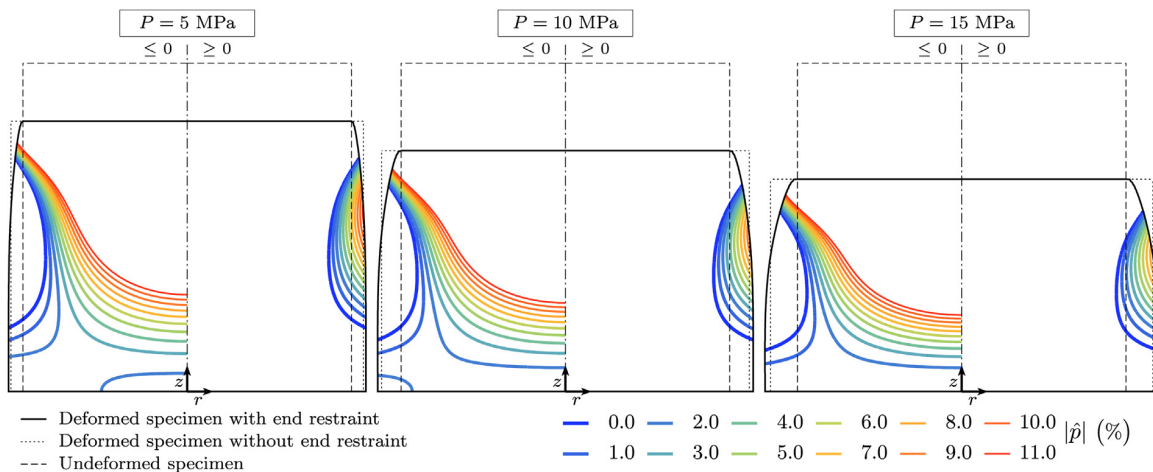


Fig. 14. Contour maps of the relative variation  $\hat{p}$  for three confining pressures, with displacement scaling factor  $\lambda = 20$ .

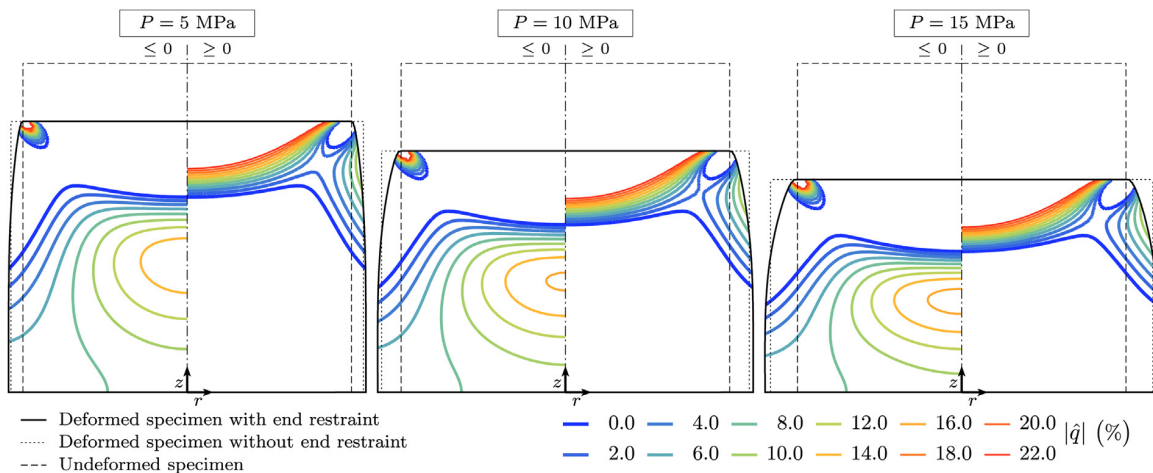


Fig. 15. Contour maps of the relative variation  $\hat{q}$  for three confining pressures, with displacement scaling factor  $\lambda = 20$ .

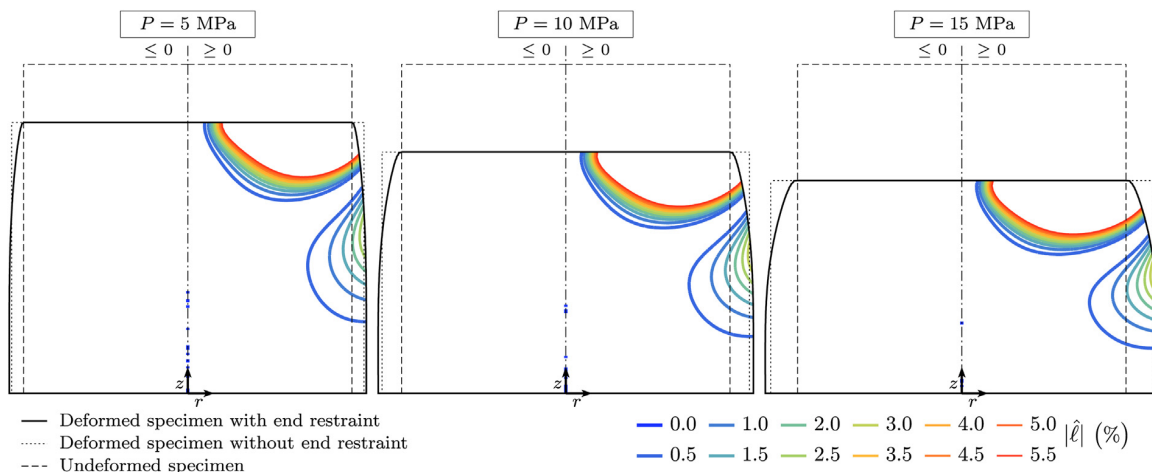


Fig. 16. Contour maps of the relative variation  $\hat{\ell}$  for three confining pressures, with displacement scaling factor  $A = 20$ .

Fig. 18,  $\bar{\nu} = 1$ ), differences can be observed mainly in the curve shapes after the dilatancy onset and in the hybrid numerical measurements; the local and the global numerical ones give nearly the same dilatancy deviatoric stress ( $\approx 16$  MPa). No significant differences are observed with regard to the deviatoric behavior.

5.5. Summary of the main results

Taking the ideal case as a reference, several conclusions can be drawn:

- (1) The difference between local and global measurements is less important than it experimentally appears. This may be interpreted, if we exclude the gauge dysfunctions, as the effects of other factors (specimen geometry, material heterogeneity, etc.) which were not investigated in this work.
- (2) During compression tests, global measurements overestimate the dilatancy deviatoric stress, whereas local measurements underestimate it (error around 5%). In turn, hybrid measurements show a much greater deviation and underestimate it (error up to 50%).
- (3) Strain- and stress-controlled compression tests show qualitatively the same behavior. The stress-controlled tests

however show greater similarities between the ideal case and the local and global measurements for the case with end restraints (error under 5%). In turn, hybrid measurements still show large deviations (error around 35%).

- (4) Under similar testing conditions, hybrid measurements from stress-controlled compression and extension tests underestimate and overestimate the dilatancy deviatoric stress, respectively.
- (5) At the time corresponding to the dilatancy onset ( $t^*$ ), stress fields show less heterogeneities during stress-controlled tests than during strain-controlled ones. More precisely, during stress-controlled tests, a significant portion of the center of the specimen remains homogeneous. This explains the fact that for stress-controlled tests, local and global

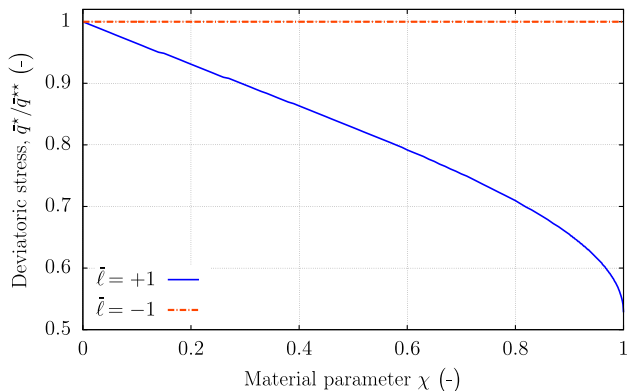


Fig. 17. Effect of the parameter  $\chi$  on the dilatancy deviatoric stress in the ideal case.

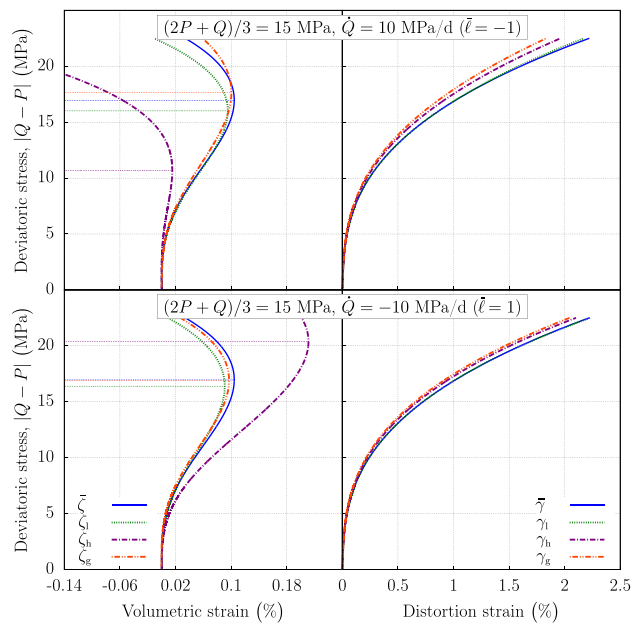


Fig. 18. Numerical stress–strain curves for a triaxial compression (top) and a triaxial extension (bottom) tests.

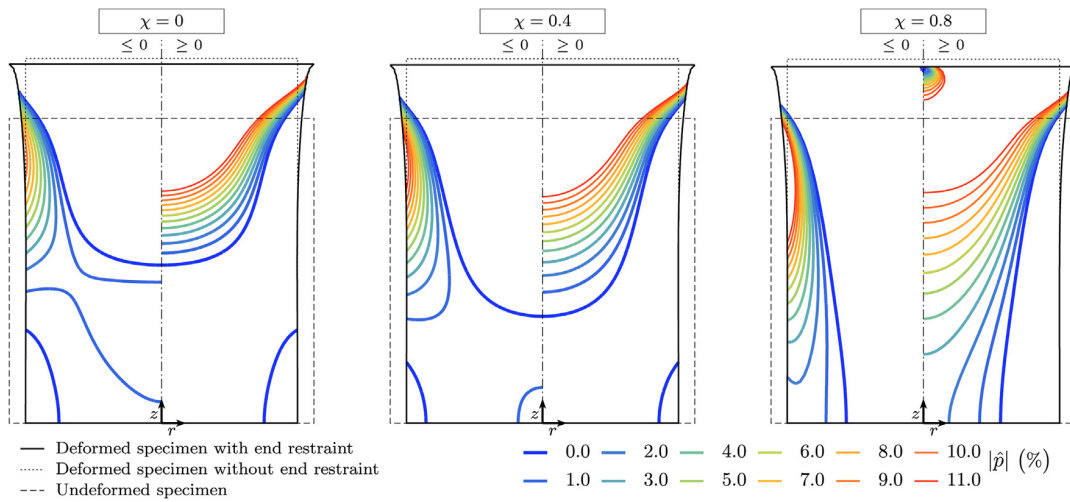


Fig. 19. Contour maps of the relative variation  $\hat{p}$  for three values of  $\chi$ , with displacement scaling factor  $A = 20$ .

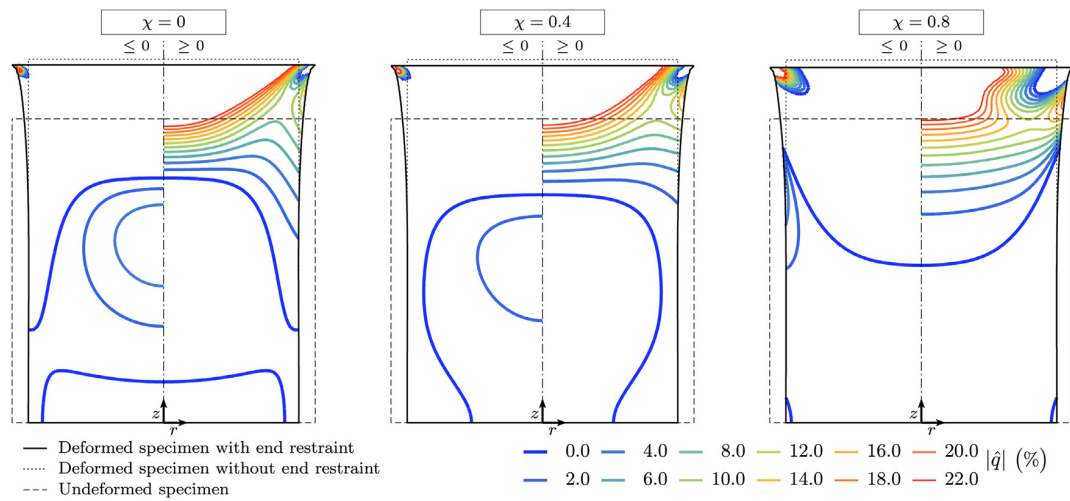


Fig. 20. Contour maps of the relative variation  $\hat{q}$  for three values of  $\chi$ , with displacement scaling factor  $A = 20$ .

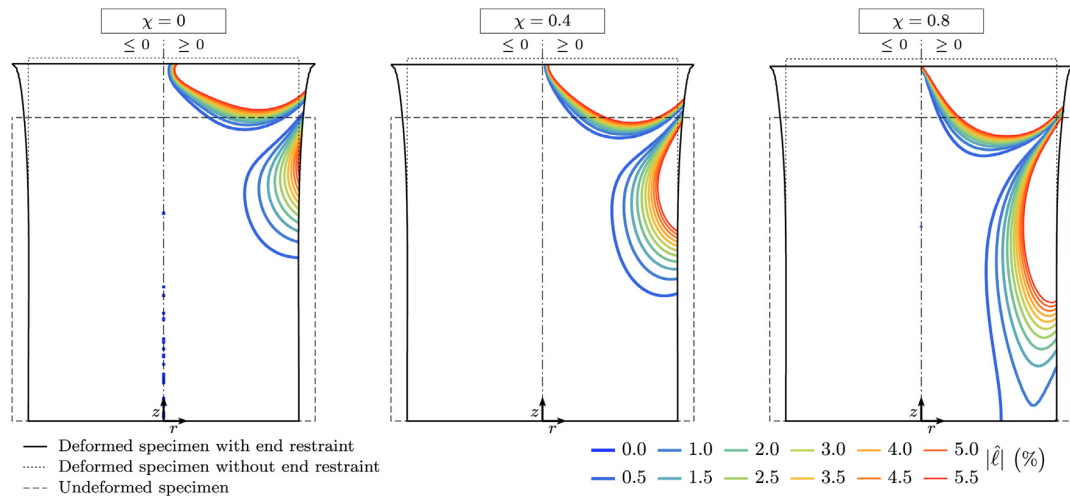


Fig. 21. Contour maps of the relative variation  $\hat{l}$  for three values of  $\chi$ , with displacement scaling factor  $A = 20$ .

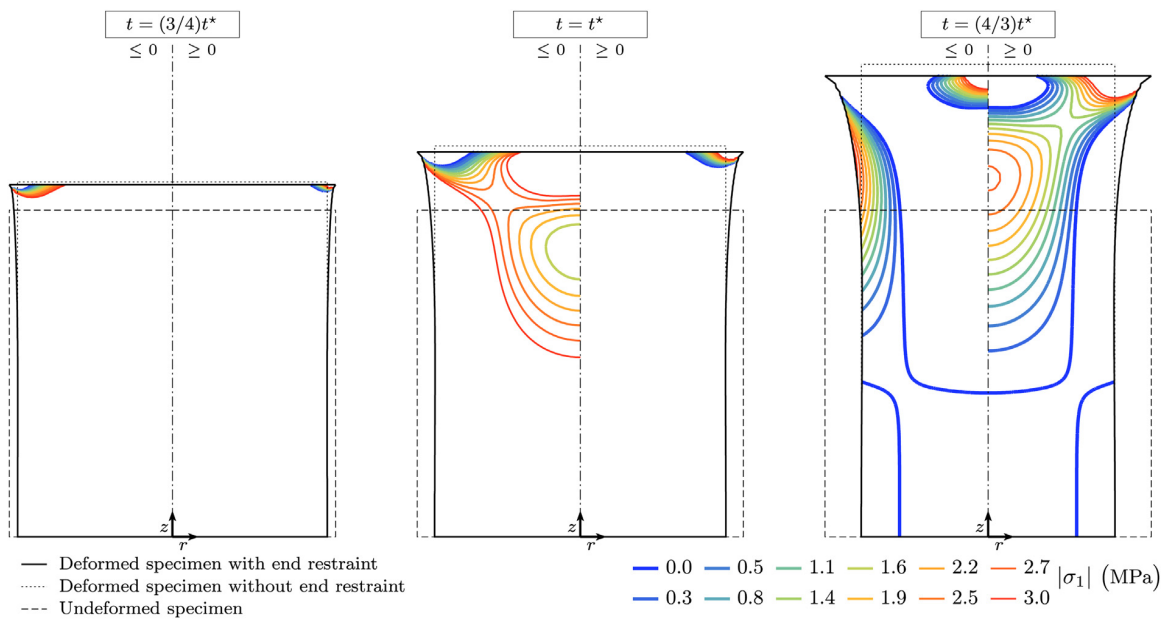


Fig. 22. Contour maps of the major principal stress  $\sigma_1$  (tension positive) for three times around  $t^*$ , with displacement scaling factor  $A = 20$ .

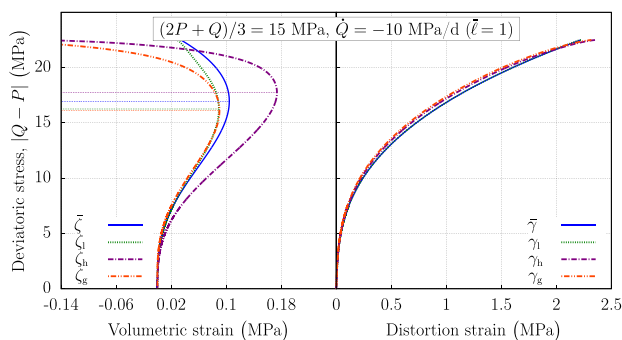


Fig. 23. Numerical stress–strain curves for a triaxial extension test, with tensile multiplier  $A = 10^6$ .

measurements are close to the ideal case. For high confining pressures (greater than 1 MPa in this study), stress field distributions are only slightly affected by the confining pressure and the loading rate levels, whereas they are significantly affected for low confining pressures.

- (6) Tensile zones can appear during strain-controlled tests under low confining pressures as well as during stress-controlled tests under even high mean pressures. In the former case, these zones cause the dilatancy deviatoric stress to greatly decrease, whereas in the latter case they have no significant effects on the dilatancy onset.
- (7) For homogeneous tests, the loading rate, confining pressure, and intermediate principal stress all have a significant impact on the volumetric strain. The dilatancy deviatoric stress increases with the loading rate and the confining pressure. It is lower under extension state of stress than under compression. Variations of parameter  $\chi$ , which induces more or less difference between extension and

compression, amplifies this effect: the greater the  $\chi$ , the lower the dilatancy deviatoric stress.

- (8) Few deviations are noted regarding the stress–strain curves associated with the deviatoric behavior; differences remain within the experimental error limits.

## 6. Conclusions

In this paper, the influence of the laboratory conditions on the dilatancy onset deduced from conventional triaxial tests was investigated experimentally and numerically. The experimental investigation consisted in a series of triaxial tests during which strains were measured both locally and globally. As for the numerical investigation, those triaxial tests were simulated under different laboratory conditions and with different end restraint effects.

The significant difference between the two experimental measurement techniques exhibited the issue with processing test data under the assumption of homogeneous stress and strain fields and using them to define an onset of dilatancy. It showed evidence of end effects that need to be taken into account. These observations were substantiated by the numerical investigation, which showed a difference between the predicted dilatancy deviatoric stress that can reach 50%.

The dilatancy deviatoric stress is more sensitive to end effects for strain-than for stress-controlled tests. In the former case, this sensitivity is caused by the significant heterogeneity of the stress field, as well as by the appearance of tensile zones for low confining pressures. Moreover, regardless of end effects, the dilatancy deviatoric stress depends on the loading rate: in the range of loadings commonly used for laboratory tests, it can greatly increase with the loading rate.

From all these considerations, it seems clear that the stress criteria based on the dilatancy onset should be used with great care and full knowledge of their limitations when introduced in structural design approaches as independent material thresholds. Even if the problem of measurement techniques is solved, the effect of the loading rates cannot be ignored, unless the actual ranges of the



loading rates are very limited. The use of stand-alone rate-independent criteria in a wide range of loading rates seems therefore unsuitable and inconsistent with the rheological behavior of rock salt. A way to overcome this problem would be the use of a constitutive model, such as the one used in this paper that includes dilatancy at the constitutive level, and the definition of a design criterion such that  $\zeta_{vp} = 0$ . The advantage of such approach is that the inconsistency between the constitutive law and the design criterion is removed, particularly when the range of the loading rates is important as will be potentially the case for salt caverns within the energy transition context where high cycling rates are expected.

### Conflicts of interest

The authors wish to confirm that there are no known conflicts of interest associated with this publication and there has been no significant financial support for this work that could have influenced its outcome.

### Acknowledgments

The authors would like to thank their colleagues Laura Blanco-Martín and Faouzi Hadj-Hassen, from MINES ParisTech, and Thierry You and Mehdi Karimi-Jafari, from Geostock, for their contributions.

### Notations

Second-order tensors are denoted by two lines under the symbol, e.g.  $\underline{\underline{a}}$ . The second-order unit tensor is denoted by  $\underline{\underline{1}}$ . For a tensor  $\underline{\underline{a}}$ ,  $(\underline{\underline{a}})^s$  is its symmetric part,  $\text{tr}(\underline{\underline{a}})$  is its trace,  $\|\underline{\underline{a}}\| = \sqrt{\underline{\underline{a}} : \underline{\underline{a}}}$  is its norm and  $\underline{\underline{a}}' = \underline{\underline{a}} - \text{tr}(\underline{\underline{a}})\underline{\underline{1}}/3$  is its deviatoric part.

$t$	Time (s)
$\underline{\underline{\sigma}}$	Cauchy stress tensor (Pa)
$p = -\text{tr}(\underline{\underline{\sigma}})/3$	Hydrostatic component of $\underline{\underline{\sigma}}$ (Pa)
$q = \sqrt{3/2}\ \underline{\underline{\sigma}}'\ $	Deviatoric component of $\underline{\underline{\sigma}}$ (Pa)
$\ell = \sqrt{6}\text{tr}(\underline{\underline{J}}^3) \in [-1, 1]$	Third invariant of $\underline{\underline{\sigma}}$
$\theta = \cos^{-1}\ell/3 \in [0, \pi/3]$	Lode angle (rad)
$\underline{\underline{I}}, \underline{\underline{J}}, \underline{\underline{K}}$	Orthonormal basis of the stress space
$\underline{\underline{N}}^c, \underline{\underline{N}}^t$	Deviatoric unit tensors
$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3$	Principal stresses (Pa)
$\varrho(\theta)$	Function defining the deviatoric cross-section
$\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^c, \underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^t, \underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^t$	Total, compressive and tensile viscoplastic strain tensors
$\zeta, \gamma$	Total volumetric and distortion strains
$\zeta_{vp}, \gamma_{vp}$	Viscoplastic volumetric and distortion strains
$\zeta_{vp}^c, \zeta_{vp}^t, \gamma_{vp}^c, \gamma_{vp}^t$	Compressive and tensile viscoplastic volumetric strains
$\lambda$	Tensile viscoplastic strain
$R_0$	Initial specimen radius (m)
$H_0$	Initial specimen height (m)
$\mathcal{V}'_0$	Initial specimen volume (m <sup>3</sup> )
$H$	Actual specimen height (m)
$\mathcal{V}'$	Actual specimen volume (m <sup>3</sup> )
$\bar{R}$	Actual radius of the central part of the specimen (m)
$\bar{V}$	Volume of the cylinder ( $\bar{R}, H$ ) (m <sup>3</sup> )
$\varepsilon_H = -(H - H_0)/H_0$	Axial engineering strain
$\varepsilon_{\bar{R}} = (\bar{R} - R_0)/R_0$	Radial engineering strain
$\zeta_l, \zeta_h, \zeta_g$	Local, hybrid and global volumetric strains
$\gamma_l, \gamma_h, \gamma_g$	Local, hybrid and global distortion strains
$P, Q$	Confining pressure and global axial stress during triaxial tests (Pa)

### Subscripts and superscripts

l, h, g	Local, hybrid, global
c, t	Compression, tension

### Special symbols

$\bar{\varphi}$	Function $\varphi$ in the idealized behavior
$\hat{\varphi}$	Relative deviation of $\varphi$ from the idealized behavior (%)
$t^*$	Time corresponding to the dilatancy onset (s)
$\varphi^*$	Function $\varphi$ at the time $t^*$

### References

- Al-Chalabi M, Huang C. Stress distribution within circular cylinders in compression. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts* 1974;11(2):45–56.
- Aubertin M, Yahya OML, Julien M. Modeling mixed hardening of alkali halides with a modified version of an internal state variables model. *International Journal of Plasticity* 1999;15(10):1067–88.
- Bérest P, Brouard B, Feuga B, Karimi-Jafari M. The 1873 collapse of the Saint-Maximilien panel at the Varangéville salt mine. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 2008;45(7):1025–43.
- Bigoni D, Piccolroaz A. Yield criteria for quasibrittle and frictional materials. *International Journal of Solids and Structures* 2004;41(11):2855–78.
- Brace W, Paulding B, Scholz C. Dilatancy in the fracture of crystalline rocks. *Journal of Geophysical Research* 1966;71(16):3939–53.
- Brady B. An exact solution to the radially end-constrained circular cylinder under triaxial loading. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts* 1971;8(2):165–78.
- Carol I, Rizzi E, Willam K. On the formulation of anisotropic elastic degradation. ii. generalized pseudo-rankine model for tensile damage. *International Journal of Solids and Structures* 2001;38(4):519–46.
- Chaboche J, Lesne P, Maire J. Phenomenological damage mechanics of brittle materials with description of the unilateral damage effects. In: Bazant Z, Bittnar Z, Jirasek M, Mazars J, editors. *Fracture and damage in quasibrittle structures, experiment, modelling and computer analysis*. E&FN Spon; 1994.
- Chan KS, Brodsky NS, Fossum AF, Bodner SR, Munson DE. Damage-induced nonassociated inelastic flow in rock salt. *International Journal of Plasticity* 1994;10(6):623–42.
- Chau K, Wei X. Finite solid circular cylinders subjected to arbitrary surface load. Part I - analytic solution. *International Journal of Solids and Structures* 2000;37(40):5707–32.
- Chemenda AI. Three-dimensional numerical modeling of hydrostatic tests of porous rocks in a triaxial cell. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 2015;76:33–43.
- Cipullo A, White W, Lee IK. Computer controlled volumetric strain measurements in metadolerite. *Bulletin of the International Association of Engineering Geology* 1985;32:55–65.
- Cristescu N, Hunsche U. Time effects in rock mechanics. New York: Wiley; 1998.
- Cristescu ND. A general constitutive equation for transient and stationary creep of rock salt. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts* 1993;30(2):125–40.
- Crouch SL. Experimental determination of volumetric strain in failed rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts* 1970;7(4):231–41.
- DeVries K, Callahan G, Mellegard K. Numerical simulations of natural gas storage caverns in bedded salt. In: The 40th US symposium on rock mechanics (USRMS). American Rock Mechanics Association; 2005.
- DeVries KL, Mellegard KD. Effect of specimen preconditioning on salt dilation onset. In: SMRI fall 2010 technical conference. Leipzig, Germany; October 2010.
- Fung Y, Tong P. Classical and computational solid mechanics. *Advanced Series in Engineering Science* 2001;1.
- Ghasemlooia A, Butt S. Feasibility study of underground salt caverns in Western Newfoundland: experimental and finite element investigation of creep-induced damage. *Journal of Mining and Environment* 2015;6(2):205–24.
- Heusermann S, Rolf O, Schmidt U. Nonlinear finite-element analysis of solution mined storage caverns in rock salt using the lubby2 constitutive model. *Computers & Structures* 2003;81(8–11):629–38.
- Hou Z. Mechanical and hydraulic behavior of rock salt in the excavation disturbed zone around underground facilities. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 2003;40(5):725–38.
- Hunsche U, Hampel A. Rock salt—the mechanical properties of the host rock material for a radioactive waste repository. *Engineering geology* 1999;52(3–4):271–91.
- Hunsche UE. Failure behaviour of rock salt around underground cavities. In: *Proceedings of the 7th Symposium on Salt*, vol. 1; 1993. p. 59–65.
- Ibsen LB, Lade PV. Effects of nonuniform stresses and strains on measured characteristic states. *Tech. rep., Geotechnical Engineering Group*; 1999.
- Ingraham MD, Broome ST, Bauer SJ, Barrow PC, Flint GM. Geomechanical testing of bayou Choctaw 102b core for spr analysis. *Tech. Rep. SAND2014-1459*. Albuquerque, New Mexico: Sandia National Laboratories; 2014.

- Jin J, Cristescu N. An elastic/viscoplastic model for transient creep of rock salt. *International Journal of Plasticity* 1998;14(1–3):85–107.
- Khaledi K, Mahmoudi E, Datcheva M, Schanz T. Stability and serviceability of underground energy storage caverns in rock salt subjected to mechanical cyclic loading. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 2016;86:115–31.
- Labauve P, Rouabhi A, Tijani M, Blanco-Martin L, You T. Dilatancy criteria for salt cavern design: a comparison between stress- and strain-based approaches. *Rock Mechanics and Rock Engineering* 2018;51(2):599–611.
- Liyanapathirana DS, Carter J, Airey D. Numerical modeling of nonhomogeneous behavior of structured soils during triaxial tests. *International Journal of Geomechanics* 2005;5(1):10–23.
- Medina-Cetina Z, Rechenmacher A. Influence of boundary conditions, specimen geometry and material heterogeneity on model calibration from triaxial tests. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 2010;34(6):627–43.
- Mellegard K, DeVries K, Callahan G. Lode angle effects on the deformational properties of natural rock salt. In: *The 40th US symposium on rock mechanics (USRMS)*. American Rock Mechanics Association; 2005.
- Moghadam SN, Mirzabozorg H, Noorzad A. Modeling time-dependent behavior of gas caverns in rock salt considering creep, dilatancy and failure. *Tunnelling and Underground Space Technology* 2013;33:171–85.
- Moghadam SN, Nazokkar K, Chalaturnyk RJ, Mirzabozorg H. Parametric assessment of salt cavern performance using a creep model describing dilatancy and failure. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 2015;79:250–67.
- Munson DE. Constitutive model of creep in rock salt applied to underground room closure. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 1997;34(2):233–47.
- Peng S. Stresses within elastic circular cylinders loaded uniaxially and triaxially. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts* 1971;8(5):399–432.
- Popp T, Minkley W, Salzer K, Schulze O. Gas transport properties of rock salt—synoptic view. In: *Mechanical behavior of salt VII*. Leiden: CRC Press/Balkema; 2012. p. 143–53.
- Popp T, Wiedemann M, Kansy A, Pusch G. Gas transport in dry rock salt—implications from laboratory investigations and field studies. In: *The mechanical behavior of salt—understanding of THMC processes in salt*. CRC Press; 2017. p. 31–40.
- Sheng D, Westerberg B, Mattsson H, Axelsson K. Effects of end restraint and strain rate in triaxial tests. *Computers and Geotechnics* 1997;21(3):163–82.
- Shilko S. The role of friction in mechanical tests of materials. *Journal of Friction and Wear* 2002;23(3):98–102.
- Sobolik SR, Ehgartner BL. Analysis of the stability of large-diameter caverns for the strategic petroleum reserve. In: *SMRI spring 2011 technical conference*. Texas, USA: Galveston; April 2011.
- Spiers C, Peach C, Brzesowsky R. Long-term rheological and transport properties of dry and wet salt rocks: final report. Office for Official Publications of the European Communities; 1989.
- Staudtmeister K, Rokahr R. Rock mechanical design of storage caverns for natural gas in rock salt mass. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 1997;34(3–4):300.e1–13.
- Tijani M. Zones de traction au cours d'essais de compression. In: *6th ISRM congress*. International Society for Rock Mechanics; 1987.
- Tijani M. Contribution à l'étude thermomécanique des cavités réalisées par lessivage dans des formations géologiques salines. Habilitation à Diriger des Recherches, spécialité Sciences de l'Univers. Université Pierre et Marie Curie; 2008.
- Tijani S. Short description of viplef code. In: *Developments in geotechnical engineering*, vol. 79. Elsevier; 1996. p. 507–11.
- Ulusay R. *The ISRM suggested methods for rock characterization, testing and monitoring: 2007–2014*. Springer; 2015.
- Van Sambeek LL, Ratigan JL, Hansen FD. Dilatancy of rock salt in laboratory tests. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts* 1993;30(7):735–8.
- Wang T, Ma H, Shi X, Yang C, Zhang N, Li J, Ding S, Daemen J. Salt cavern gas storage in an ultra-deep formation in hubei, China. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 2018a;102:57–70.
- Wang T, Yang C, Chen J, Daemen J. Geomechanical investigation of roof failure of China's first gas storage salt cavern. *Engineering Geology* 2018b;243:59–69.
- Wang T, Yang C, Ma H, Li Y, Shi X, Li J, Daemen J. Safety evaluation of salt cavern gas storage close to an old cavern. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 2016;83:95–106.
- Wei XX, Chau KT. Finite and transversely isotropic elastic cylinders under compression with end constraint induced by friction. *International Journal of Solids and Structures* 2009;46(9):1953–65.
- Yang C, Wang T, Ma H, Li Y, Shi X, Daemen J. Feasibility analysis of using horizontal caverns for underground gas storage: a case study of Yunying salt district. *Journal of Natural Gas Science and Engineering* 2016;36:252–66.

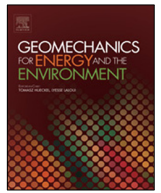


**Ahmed Rouabhi** is currently an assistant professor in the Geosciences Department at MINES ParisTech, France. He obtained his PhD in Rock Mechanics from the same university. His research interests cover experimental, theoretical and numerical studies on the coupled processes in multi-phase multi-component media.



Contents lists available at ScienceDirect

# Geomechanics for Energy and the Environment

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/gete](http://www.elsevier.com/locate/gete)

## A multiphase multicomponent modeling approach of underground salt cavern storage

A. Rouabhi <sup>a,\*</sup>, G. Hévin <sup>b</sup>, A. Soubeyran <sup>a</sup>, P. Labaune <sup>a</sup>, F. Louvet <sup>b</sup><sup>a</sup> MINES ParisTech, PSL Research University, Centre de Géosciences, 35 rue St Honoré 77300 Fontainebleau, France<sup>b</sup> Storengy, 12 rue Raoul Nordling 92274 Bois-Colombes, France

### HIGHLIGHTS

- A thermodynamically consistent framework for large-scale underground storage caverns is proposed.
- The whole underground storage system is divided into three subsystems (cavern, well, formation).
- The cavern and the well are modeled within the multiphase multicomponent general framework.
- The formation is modeled within the thermo-mechanical large deformation framework.
- The need for a fully coupled approach is highlighted through an illustrative cyclic loading example.

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 12 May 2017

Received in revised form 29 August 2017

Accepted 30 August 2017

Available online 6 September 2017

#### Keywords:

Underground storage

Salt caverns

Multiphase multicomponent system

Balance equations

Viscoplasticity

Cyclic loading

### ABSTRACT

In the current energy transition context, large-scale underground facilities, such as salt caverns, able to deliver high flow rates, represent the most promising viable massive energy storage system that can respond efficiently to the flexibility needs of the renewable energy.

In order to predict the performances of these facilities, while ensuring a high safety level over long time periods, the reservoir behavior must be studied by higher accuracy approaches. Based on a multiphase multicomponent approach, a cavern thermodynamic model, that can be used in field applications, is derived for this purpose. Particular attention is given to salt caverns where the stored fluid can be in contact with the brine. All the balance equations that govern the well that connects the cavern to the ground surface and the surrounding formation are presented. An illustrative example, showing the necessity of taking into account the thermo-mechanical aspects when considering the cavern thermodynamic behavior under cyclic loading conditions, is also discussed.

© 2017 Elsevier Ltd. All rights reserved.

### 1. Introduction

Over the last few years, the energy transition context has led to the emergence of several massive energy storage concepts aiming particularly at solving the uncontrollable intermittency problem that characterizes renewable energy based on wind, solar, or both resources. Among these concepts we may cite the CAES (Compressed Air Energy Storage) and the PtG (Power to Gas) concepts, both based on the excess electrical energy either from the renewable energy sources or through the efficient use of nuclear and fossil fuel. The CAES principle<sup>1–4</sup> consists in using compressed ambient air as a working fluid to be stored in underground storage reservoirs and expanded, when needed, in turbines to produce electricity. For better performances, the heat of compression can

be stored in a thermal regenerator and recovered during expansion thus leading to an increase of the energy efficiency<sup>5,6</sup>. The PtG concept<sup>7–9</sup> is a process where the excess power is converted into storable chemical energy carriers. Within this concept, one promising option is the production of hydrogen (H<sub>2</sub>) and synthetic methane (CH<sub>4</sub>) through an electrolysis-methanation process. The hybridization of the PtG concept with an oxy-fuel combustion process can lead to a closed loop technology since the generated oxygen (O<sub>2</sub>) from the electrolysis phase, or a mixture of O<sub>2</sub> and recycled flue gas, can be stored and re-used to form the oxidizer for the combustion of methane in the energy retrieval phase. The resulting carbon dioxide (CO<sub>2</sub>) from the oxy-fuel process can thereby be stored and subsequently used to feed the methanation process during the energy storage phase<sup>10</sup>, the on-going French project ANR Fluid STORY<sup>11</sup>.

All these processes require temporary large-scale reversible storage facilities for large amounts of fluids (air, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>...). Currently, underground storage reservoirs seem to be the most

\* Corresponding author.

E-mail address: [ahmed.rouabhi@mines-paristech.fr](mailto:ahmed.rouabhi@mines-paristech.fr) (A. Rouabhi).



promising low cost technologies. Two main categories of underground storage are in use today: porous media reservoirs where the working fluid is stored in the pore space, and rock caverns where the fluid is contained in excavated hard rock or solution-mined caverns. Obviously, although each category of storage has its own characteristics, some fundamental requirements, such as tightness, are common for both categories. In porous media, the sealing capacity against fluid leakage is provided by the geological reservoir structure whereas, in rock caverns, it is ensured by either the low host rock permeability in unlined caverns or by a suitable lining system for lined rock caverns. When the reservoir tightness is ensured, rock caverns behave like pressurized vessels, thereby allowing high deliverability flow rates as opposed to porous media where injection-withdrawal rates are limited by the reservoir permeability. Consequently, they can better suit the flexibility needs of the renewable energy. The present study only deals with this storage mode and especially with solution-mined caverns.

The hydrocarbon underground storage in solution-mined caverns is a mature technique with a successful history of several decades. However today, engineers are facing new challenges that substantially differ from those experienced decades ago, and which involve major implications for their modeling. Faster operating modes and storage of different kinds of pure or mixture fluids are some delicate topics which are the object of several researches today. In fact, in order to answer the request for greater market flexibility, the stored fluid flow rates are needed to be faster than in hydrocarbon storage where operation patterns can be identified with the seasonal winter and summer cycles. During fluid injections and withdrawals with higher mass flow rates, the cavern thermodynamic state, in terms of pressure and temperature, may vary so rapidly that it can impact the stability of the surrounding rock and the reservoir integrity. A fully coupled process between the cavern thermodynamics and the surrounding rock thermo-hydro-mechanics behavior is therefore necessary in order to provide reliable predictions of the overall storage system. This requires combining knowledge from many engineering disciplines, including mechanical, chemical and structural engineering.

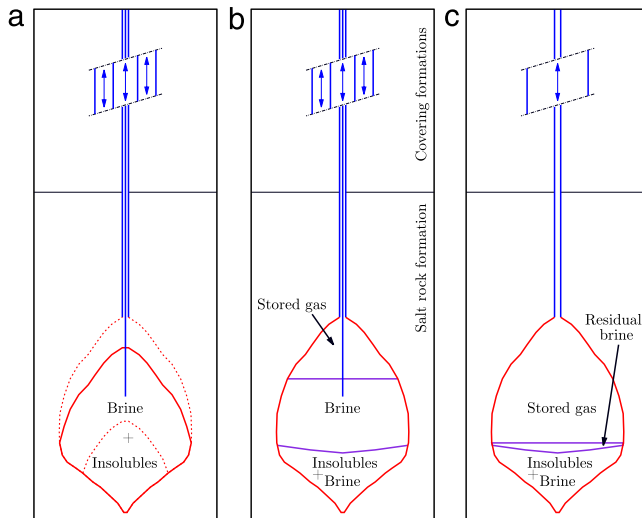
In mechanical engineering, there is an abundant literature devoted to the rheological behavior of rock salt. Many constitutive laws have been developed, extended and refined by including more and more physical phenomena, such as creep (see, e.g.,<sup>12–15</sup>) or dilatancy and healing (see, e.g.,<sup>16,17</sup>). In chemical engineering, a tremendous effort has been made to provide accurate and complete models for gases and mixtures; see for instance the work of Kunz and Wagner<sup>18</sup> who developed wide-range equations of state for pure gases and their mixtures, or the work of Herrmann et al.<sup>19</sup> who developed, for compressed air energy storage purposes, the thermodynamic and transport properties of humid air. On the other hand, in structural engineering applied to the field of salt cavern storage, we can notice the existence of two research communities: one working on the mechanical problem in the surrounding formation by ignoring the thermodynamic behavior of the cavern (see, e.g.,<sup>20–23</sup> to cite only few recent papers) and other one on the cavern by ignoring the thermo-mechanical behavior of the surrounding formation (see, e.g.,<sup>24–28</sup>). Recently, some efforts have been focused on the coupling between the two subsystems (see, e.g.,<sup>29–32</sup>). However, they are still insufficient for different reasons, among them: (i) the equations of state of the fluids contained in the cavern are generally assumed to be ideal which is not usually justified since high pressures in combination with low temperatures may occur within the cavern, (ii) the coexistence at the same time of different fluids, which can exchange mass and heat between each other (such as in the case of CO<sub>2</sub> storage where the CO<sub>2</sub>, due to its high solubility, can exchange both heat and mass with the residual brine), has never been addressed, as far as the authors know, and (iii) only the operational phase is generally considered, the residual thermo-mechanical effects induced during

the leaching and the debrining phases are usually neglected, which is rather a strong assumption particularly when the duration of each of those phases cannot be neglected compared to the duration of the operational phase.

Consequently, there is a need for a modeling framework that includes all the major relevant issues throughout the entire cavern life, while rigorously integrating the knowledge of the different communities. The present work addresses this need by developing a unified modeling approach that covers the entire underground storage system. It combines theoretical fundamentals and practical applications with the ambition to reach a thermodynamically consistent framework that can be used in field applications. It is divided into two parts. The first one presents the modeling formalisms. The second one is an illustrative example that emphasizes the need for a fully coupled approach between the cavern thermodynamics and the surrounding rock thermo-mechanics behavior, by comparing two distinct categories of gases in terms of Joule-Thomson effect. Only modeling aspects will be discussed in this paper, knowing that these aspects are part of an on-going intensive research program between MINES ParisTech and Storengy. Numerical and validation aspects are outside the scope of this study and they will be addressed in future works.

The paper is organized as follows. Section 2 describes briefly the cavern physical system that we wish to model. It also gives the general considerations used in our investigations and provides the ingredients for the cavern multiphase multicomponent problem where both mass and heat transfer between brine, the stored fluid and the surrounding environment must be taken into account. Section 3 serves as basis for the developments throughout this work. It highlights the basic macroscopic concepts related to the single phase multicomponent mixture theory which may be the first barrier that has to be crossed in order to ensure that the fundamental principles are used in an appropriate manner. Section 4 details the cavern governing equations, taking into account the most appropriate assumptions. Section 5 describes the cavern interactions with the surrounding environment. It includes a brief summary of the governing equations, on the one hand, of the well that connects the cavern to the ground surface and, on the other hand, of the surrounding formation. The former equations use essentially the main results already developed in Section 3, while the latter introduce the large deformation formalism which is of importance in studying the thermo-mechanical aspects in the rock salt formation. Finally, the illustrative example is given in Section 6 based on simulations with a new numerical code (DEMETHER), developed jointly by MINES ParisTech and Storengy, and which is built according to the methodology presented in this paper.

**Notation:** All mathematical notations are defined in the text where they first appear. The correct meaning of symbols which have more than one meaning will be obvious from the context. We consider vectors and tensors in three-dimensional Euclidean space unless otherwise indicated. Vectors are denoted by bold symbol, e.g.,  $\mathbf{a}$ . Second-order tensors are denoted by two lines under the symbol, e.g.,  $\underline{\underline{a}}$ . The second-order unit tensor is denoted by  $\underline{\underline{1}}$ . Fourth-order tensors are denoted by a tilde beneath the symbol, e.g.,  $\tilde{a}$ . For a tensor  $\underline{\underline{a}}$ ,  $(\underline{\underline{a}})^T$  is its transpose,  $(\underline{\underline{a}})^S$  is its symmetric part,  $(\underline{\underline{a}})^A$  is its antisymmetric part and  $\text{tr}(\underline{\underline{a}})$  is its trace. The scalar product between two vectors is denoted by a dot, e.g.,  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ . The simple contraction between a tensor and a vector or between two tensors is written without a product dot, e.g.,  $\underline{\underline{ab}}$ ,  $\underline{\underline{a}} \underline{\underline{b}}$ . The colon symbol denotes the double contraction between two tensors of rank two or/and higher, e.g.,  $\underline{\underline{a}} : \underline{\underline{b}}$ . The divergence operator is denoted by  $\nabla \cdot$ ,  $\nabla a$  is the gradient of  $a$ , and the gradient of a vector field  $\mathbf{a}$  is  $\nabla \mathbf{a}$ . For a function of several variables  $\varphi(\dots, x, \dots)$ , the notation  $\frac{\partial \varphi}{\partial x}$  designates the partial derivative of  $\varphi$  with respect to  $x$ , all other variables held constant.



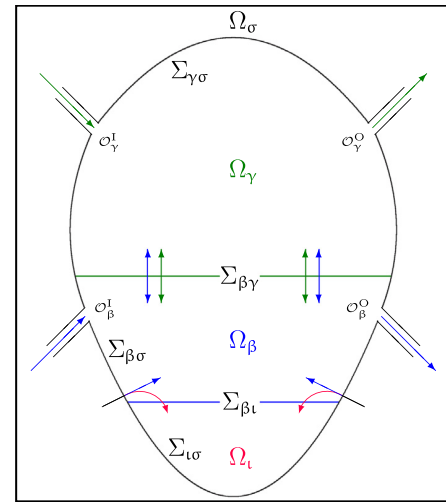
**Fig. 1.** Schematic illustration of a salt cavern storage facility during leaching (a), debrining (b) and storage operations (c).

## 2. Physical model

Solution mining is commonly used to produce large caverns in rock salt formation. In this process, a single well, drilled from the ground surface to the targeted depth, is generally used to inject fresh water and withdraw brine through a concentric tubing system (see, e.g., 33–35). During this leaching phase, insoluble inclusions embedded inside the rock salt may accumulate at the bottom of the cavern. Once the leaching is completed, the filling phase can start and different operating approaches can be used depending on the type of the stored fluid. For liquids which are not miscible with brine, such as liquid hydrocarbons, the process uses brine, that must be maintained on the surface, by either pumping or injecting it into the cavern, to move the stored fluid in or out the cavern. In this case, the volume of the brine in the cavern is as important as the volume of the stored fluid. For gas, storage operations are managed without brine compensation since the cavern behaves like a pressurized vessel where the compression is potentially needed only during injection; the cavern internal pressure is all what is required during withdrawal. In this case, as schematically illustrated in Fig. 1, the brine in the cavern is reduced to minimal quantities after a debrining phase where it is moved by a gas injection operation.

In all cases, during its life span, the cavern will therefore mainly contain, simultaneously or sequentially, three different non-miscible phases: the stored fluid, the brine and the insoluble materials. Note that, the insoluble materials are assumed here to form a fluid continuum phase rather than a bed of particles in which brine can pass through. Such working assumption will simplify the mathematical formulation without loss of the global aspects of the problem. The stored fluid and the brine phases are assumed to be reactive multicomponent fluid mixtures. For modeling purposes, such a problem can be conceptually described by Fig. 2 where each phase occupies a distinct domain bounded by two different types of moving interfaces: fluid–fluid and rock–fluid interfaces.

In what follows, because we are studying a multiphase multi-component problem, we will make use of subscripts to designate quantities of interest. The Greek letters ( $\alpha, \beta, \dots$ ) subscripts are used to name the phases:  $\alpha$  for a generic phase,  $\beta$  for the brine,  $\gamma$  for the stored fluid and  $\iota$  for the insoluble materials. The subscript  $\sigma$  is used for the rock salt surrounding the cavern. The Latin lower



**Fig. 2.** Schematic illustration of the salt cavern storage model (arrows indicate the mass exchange mechanisms).

case letters subscripts ( $i, j, k, \dots$ ) are used to name the components. The subscript  $i\alpha$  is used to designate the component  $i$  in the phase  $\alpha$ .

With respect to these notations, each phase  $\alpha$  occupies a domain  $\Omega_\alpha$  such that  $\Omega(t) = \cup_{\alpha} \Omega_\alpha(t)$ , where  $\Omega(t)$  is the cavern domain at time  $t$  with a regular boundary  $\partial\Omega(t)$ . By denoting the speed of displacement of  $\partial\Omega(t)$  by  $\omega \cdot \mathbf{n}$ , where  $\omega$  is the velocity of the boundary and  $\mathbf{n}$  is the unit normal vector outwardly directed, the time rate of change of the cavern volume  $\mathcal{V}(t)$  can be expressed as

$$d\mathcal{V}/dt = \int_{\partial\Omega} \omega \cdot \mathbf{n} dA. \quad (1)$$

As can be seen in Fig. 2, the boundary  $\partial\Omega_\alpha(t)$  of each domain  $\Omega_\alpha(t)$  can be defined as  $\partial\Omega_\alpha(t) = \mathcal{O}_\alpha \cup (\cup_{\lambda \neq \alpha} \Sigma_{\alpha\lambda}(t))$ , where  $\Sigma_{\alpha\lambda}(t)$  denote the interfacial regions between the different entities and  $\mathcal{O}_\alpha$  are small fixed openings ( $\omega \cdot \mathbf{n} = 0$ ) that allow fluid matter exchange with the exterior. Since the thermodynamic state of the matter entering the cavern may differ from that leaving, the openings  $\mathcal{O}_\alpha$  can fall into two categories:  $\mathcal{O}_\alpha^i$  and  $\mathcal{O}_\alpha^o$ , where the superscripts I and O refer, respectively, to the ingoing and outgoing matter. Thus,  $\mathcal{O}_\alpha = \mathcal{O}_\alpha^i \cup \mathcal{O}_\alpha^o$ . The boundary  $\partial\Omega_\alpha(t)$ , with an outward unit normal vector  $\mathbf{n}_\alpha$ , moves with a velocity  $\omega_\alpha$  according to

$$\begin{aligned} \omega_\beta \cdot \mathbf{n}_\beta &= -\omega_\gamma \cdot \mathbf{n}_\gamma = \mathbf{v}_{\beta\gamma} \cdot \mathbf{n}_\beta \text{ on } \Sigma_{\beta\gamma}(t) \\ \omega_\beta \cdot \mathbf{n}_\beta &= -\omega_\iota \cdot \mathbf{n}_\iota = \mathbf{v}_{\beta\iota} \cdot \mathbf{n}_\beta \text{ on } \Sigma_{\beta\iota}(t) \\ \omega_\alpha &= \omega \text{ on } \mathcal{O}_\alpha \cup \Sigma_{\alpha\sigma}(t) \end{aligned} \quad (2)$$

where  $\mathbf{v}_{\beta\lambda}$  is the velocity of the interface  $\Sigma_{\beta\lambda}(t)$ .

The mass exchange between the different entities occurs mainly, on the one hand, between the  $\gamma$  and  $\beta$  phases, and, on the other hand, between the  $\beta$  phase and the surrounding rock salt  $\sigma$ . In the latter case, the mass transfer concerns the salt dissolution not just during the leaching process but throughout the entire cavern life since the brine salt saturation concentration can vary with the brine thermodynamic state leading either to additional dissolution or to salt re-crystallization. In this work, this latter phenomenon will not be handled.

The mass transfer between  $\beta$  and  $\sigma$  will be considered according to the following condition:

$$\rho_\beta(\mathbf{v}_\beta - \omega_\beta) \cdot \mathbf{n}_\beta = \rho_{s\beta}(\mathbf{v}_{s\beta} - \omega_\beta) \cdot \mathbf{n}_\beta \quad (3)$$

where the subscript  $s$  is referring to the salt component and  $\rho_\beta$  and  $\mathbf{v}_\beta$  are the mass density and the velocity of the  $\beta$ -phase,

respectively. The relation (3) reflects the assumption that the rock mass surrounding the cavern may only exchange salt with the cavern while remaining impermeable to the other component of the  $\beta$ -phase ( $\rho_{k\beta}(\mathbf{v}_{k\beta} - \boldsymbol{\omega}_\beta) \cdot \mathbf{n}_\beta = 0$  for  $k \neq s$ ).

Before deriving, in Section 4, the cavern governing equations, it seems desirable, for the sake of consistency and orderly development, to highlight first the basic governing equations related to the single phase multicomponent mixture since it will serve as basis for the description of the cavern multiphase multicomponent problem. In fact, for a multicomponent fluid mixture, notions such as heat and stress could become confused, especially since the literature in this area is somewhat ambiguous despite its abundance (see, e.g.,<sup>36–41</sup>).

### 3. The single phase multicomponent mixture

For convenience of notation, we shall omit in this section explicit specification of the phase since we deal only with a single phase. Consider a fluid mixture with  $q$  identifiable components, each of which has its own density  $\rho_k$  and velocity  $\mathbf{v}_k$  but all components having the same absolute temperature  $T$ . The index  $k$ , running from 1 to  $q$ , is used to distinguish the components. Assuming that each component is uniformly distributed throughout the fluid mixture, the total mass density  $\rho$  is then defined as  $\rho = \sum \rho_k$ , where  $\sum$  stands for summation from  $k = 1$  to  $k = q$  unless otherwise indicated. The concentration or mass fraction  $c_k$  of the component  $k$  is given by  $c_k = \rho_k/\rho$  so that  $\sum c_k = 1$ , and thus only  $q - 1$  concentrations are independent. Let  $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_{q-1})$  be the composition vector where the component  $q$  is chosen as a reference component. The mixture thermodynamic state can thus be defined by either  $(v, T, \mathbf{c})$  or  $(p, T, \mathbf{c})$ , where  $v = 1/\rho$  and  $p$  are the specific volume and the thermodynamic pressure, respectively.

#### 3.1. Equations of state

In a multiphase flow model, when there is no mass exchange between phases, the equation of state of each phase can be completely described only with the help of two state functions: the mass density  $\rho$ , or the specific volume  $v$ , and the heat capacity at constant pressure  $C_p$ . However, when there is mass exchange, we also need the specific enthalpy  $h$  and the chemical potential  $\mu_k$  as we shall see further on. For a given phase, these functions are not independent and must necessarily verify coherence conditions such as, for example, the one that links  $v(p, T, \mathbf{c})$  and  $C_p(p, T, \mathbf{c})$ :  $T \partial_T^2 v + \partial_p C_p = 0$ .

In order to build thermodynamically compatible relations, the best way of proceeding is to consider, for a given phase, its thermodynamic potential from which can be derived, by appropriate partial derivatives, all the remaining state functions. With a thermodynamic state characterized by the independent variables  $(p, T, \mathbf{c})$ , the thermodynamic potential is the Gibbs specific free energy  $g$  and the remaining state functions may derive from it according, for example, to the following relations:

$$\begin{aligned} v &= \partial_p g, \quad C_p = -T \partial_T^2 g \\ h &= g - T \partial_T g, \quad s = -\partial_T g, \quad u = g - T \partial_T g - p \partial_p g \\ \mu_q &= g - \sum_{j=1}^{q-1} c_j \partial_{c_j} g, \quad \mu_{k \neq q} = \mu_q + \partial_{c_k} g \end{aligned} \quad (4)$$

where  $s$ ,  $u$  and  $\mu_k$  are the specific entropy, the specific internal energy and the chemical potential of the component  $k$ , respectively. Moreover, for a fixed composition  $\mathbf{c}$  and a given reference state  $(p_0, T_0)$ , the knowledge of the specific volume  $v(p, T, \mathbf{c})$  and the

heat capacity  $C_p(p_0, T, \mathbf{c}) = C_{p_0}(T, \mathbf{c})$  for the pressure  $p_0$  allows the determination of  $g(p, T, \mathbf{c})$  as follows:

$$g(p, T, \mathbf{c}) = h_0(\mathbf{c}) - s_0(\mathbf{c})T + \int_{p_0}^p v(x, T, \mathbf{c}) dx + \int_{T_0}^T (1 - T/x) C_{p_0}(x, \mathbf{c}) dx. \quad (5)$$

Eq. (5), obtained by integrating the first two equations of (4), includes, beside the well-defined integral terms, an arbitrary linear function of  $T$  where  $h_0(\mathbf{c}) = h(p_0, T_0, \mathbf{c})$  and  $s_0(\mathbf{c}) = s(p_0, T_0, \mathbf{c})$  are indeterminate functions which can be linearly expressed in terms of the composition as

$$h_0(\mathbf{c}) = \sum c_k h_k^0 + \tilde{h}_0(\mathbf{c}), \quad s_0(\mathbf{c}) = \sum c_k s_k^0 + \tilde{s}_0(\mathbf{c}) \quad (6)$$

in which  $h_k^0$  and  $s_k^0$  are indeterminate constants,  $\tilde{h}_0(\mathbf{c})$  and  $\tilde{s}_0(\mathbf{c})$  are known functions of  $\mathbf{c}$ .

For non-reacting and non-diffusing fluid mixtures with fixed composition  $\mathbf{c}$ ,  $h_0(\mathbf{c})$  and  $s_0(\mathbf{c})$  are simple integration parameters that have no role in the general flow problem since in thermodynamic balance laws we need enthalpy and entropy only as differences between two states. However, as we shall show in Section 3.3, these functions play an important role for fluid mixtures undergoing chemical reactions, diffusion and phase transition phenomena. The energy balance equations may even contain physically meaningless terms if the indeterminacy, caused by the arbitrary constants, is not removed.

#### 3.2. Balance equations

In the multicomponent mixture theory, the behavior of the mixture can be described by the mass density  $\rho$ , the barycentric velocity  $\mathbf{v} = \sum c_k \mathbf{v}_k$ , the temperature  $T$ , and the concentrations  $c_k$  of the constituents. The balance laws that govern the evolution of these fields can be expressed by the following field equations:

$$\begin{aligned} \dot{\rho} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0 \\ \rho \dot{\mathbf{v}} - \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} &= \rho \mathbf{g} \\ \rho \dot{u} + \nabla \cdot \underline{\underline{\Psi}}_u &= r + \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\nabla}} \mathbf{v} \\ \rho \dot{s} + \nabla \cdot (\underline{\underline{\Psi}}_s/T) &= (r + \varpi)/T \\ \rho \dot{c}_k + \nabla \cdot (\rho \mathbf{J}_k) &= \pi_k, \quad k = 1, \dots, q-1 \end{aligned} \quad (7)$$

where  $\underline{\underline{\sigma}}$  is the stress tensor,  $\mathbf{g}$  is the body force,  $\underline{\underline{\Psi}}_u$  is the internal energy flux vector,  $r$  is the heating source per unit volume,  $\underline{\underline{\Psi}}_s$  is the entropy flux vector,  $\varpi$  is the internal entropy production,  $\mathbf{J}_k = c_k(\mathbf{v}_k - \mathbf{v})$  is the diffusion velocity of the constituent  $k$ ,  $\pi_k$  is the rate of production of mass of component  $k$  per unit volume due to chemical reactions with the condition  $\sum \pi_k = 0$ , and, for a scalar field  $\varphi(\mathbf{x}, t)$ ,  $\dot{\varphi} = D\varphi/Dt = \nabla \varphi \cdot \mathbf{v} + \partial_t \varphi$  is the material derivative of  $\varphi$  following the motion of the mixture. These field equations express the balance laws of the total mass, momentum, internal energy, entropy and  $k$ -component mass, respectively.

Despite the fact that the relationship between the two flux vector  $\underline{\underline{\Psi}}_u$  and  $\underline{\underline{\Psi}}_s$  is a key question in the fluid mixture theory, it is not easy to find in the literature a satisfying treatment that makes clearly the distinction between what is physically significant and what is deduced through simple mathematical considerations. For this reason, and also for the sake of completeness and clarity, in what follows, we shall give a brief outline of how this relationship can be expressed.

In the case of no diffusion ( $\mathbf{J}_k = \mathbf{0}$ ) and non-reacting components ( $\pi_k = 0$ ), the mixture behaves as a closed system and we have  $\underline{\underline{\Psi}}_u = \underline{\underline{\Psi}}_s = \underline{\underline{\psi}}$ . Furthermore,  $\varpi$  can be written as  $\underline{\underline{\zeta}} : \underline{\underline{\nabla}} \mathbf{v} - \underline{\underline{\psi}} \cdot \nabla T/T$ , where  $\underline{\underline{\zeta}} = \underline{\underline{\sigma}} + p \underline{\underline{1}}$  is the viscous stress tensor, which is the volumetric dissipation whose irreversibilities sources are due only to the presence of velocity and temperature gradients.

**Table 1**  
Variables in the generic balance equation.

Balance equation	$\varphi$	$\Gamma$	$\gamma$
Total mass	1	$\mathbf{0}$	0
Momentum	$\mathbf{v}$	$-\underline{\underline{\sigma}}$	$\rho \mathbf{g}$
Energy	$e$	$\Psi_u - \underline{\underline{\sigma}} \mathbf{v}$	$\rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} + r$
Component mass	$c_k$	$\rho \mathbf{J}_k$	$\pi_k$

The same approach (see, for instance, <sup>36,37</sup>) can also be used for the multicomponent reactive mixture. Based on the local state postulate for open systems and on the dissipation partition into separate irreversibilities sources (viscous dissipation, conduction heat transfer, chemical reactions and species diffusion) where the conjugated flux to the thermodynamic driving force  $\nabla T$  is only due to purely heat conduction phenomenon (Fourier's law), the volumetric dissipation  $\varpi$  can be written in this case as

$$\varpi = \underline{\underline{\zeta}} : \underline{\underline{\nabla}} \mathbf{v} - \underline{\underline{\psi}} \cdot \nabla T / T - \sum \pi_k \mu_k^* - \sum \rho \mathbf{J}_k \cdot \nabla T (\mu_k^*) \quad (8)$$

where  $\nabla_T$  is the isothermal gradient operator,  $\underline{\underline{\psi}} = \Psi_s + \sum \rho T \partial_T \mu_k^* \mathbf{J}_k$ , and for a scalar function  $\varphi_k$ ,  $\varphi_k^* = \varphi_k - \varphi_q$  with  $\varphi_q^* = 0$ . Since  $\mu_k^* = \partial_{c_k} g(p, T, \mathbf{c})$ , we can conclude that

$$\Psi_u = \underline{\underline{\psi}} + \sum_{k=1}^{q-1} \rho \partial_{c_k} h(p, T, \mathbf{c}) \mathbf{J}_k \quad (9)$$

$$\Psi_s = \underline{\underline{\psi}} + \sum_{k=1}^{q-1} \rho T \partial_{c_k} s \mathbf{J}_k. \quad (10)$$

With these definitions in mind, the internal energy and the entropy balance laws are equivalent and all the fields in Eq. (7) have now a clear physical meaning. Since we have already introduced the state equations, the mathematical problem must be supplemented, besides initial and boundary conditions, by constitutive laws that express the secondary unknowns  $\{\underline{\underline{\zeta}}; \pi_k; \mathbf{J}_k; \underline{\underline{\psi}}\}$  as functions of the primary unknowns  $\{\mathbf{v}; \rho; T; \mathbf{c}\}$  under the restriction  $\varpi \geq 0$  imposed by the second law of thermodynamics.

Finally, since in the next section we shall make use of a generic quantity, it is of interest to finish this section by giving the general field equation that represent the local balance equations given by (7):

$$\rho \dot{\varphi} + \nabla \cdot \Gamma = \gamma \quad (11)$$

where  $\varphi$  is the specific density, assumed continuous and differentiable, of the global additive conserved quantity,  $\Gamma$  is its surface flux density and  $\gamma$  is its volumetric source density. The values of  $\varphi$ ,  $\Gamma$  and  $\gamma$  for the different balances are listed in Table 1. Note that, unlike the system (7), the energy equation is given in terms of the total energy  $e = u + \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} / 2$ .

### 3.3. Important note

In simplified modeling approaches of underground caverns, it is tempting from the outset to assume that the contribution of the energy that is transported by diffusion is negligible against the conducted energy. Thus, the flux vector  $\Psi_u$  given by Eq. (9) can be reduced to the conduction heat flux vector  $\underline{\underline{\psi}}$ . In this case, the internal energy balance law can be written as  $\rho \dot{u} + \nabla \cdot \underline{\underline{\psi}} = r + \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\nabla}} \mathbf{v}$ . From Section 3.1,  $\dot{u}$  can be expanded as  $\dot{u} = \sum (h_k^0)^* \dot{c}_k + \dot{\tilde{u}}$ , where  $h_k^0$  are the enthalpy arbitrary constants and  $\tilde{u}(p, T, \mathbf{c})$  is a determined function, thus revealing a dependency upon the arbitrary constants which makes the balance equation physically meaningless. Therefore, in order to remedy this problem, it is necessary not to neglect the diffusion part in the flux vector  $\Psi_u$  before removing all indeterminacy. Indeed, in doing so and when

taking into account the mass balance equations, we can get the following internal energy balance equation:

$$\rho \dot{\tilde{u}} + \nabla \cdot (\underline{\underline{\psi}} + \rho (\partial_{c_k} \tilde{h}) \mathbf{J}_k) = r + \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\nabla}} \mathbf{v} - \sum \pi_k (h_k^0)^* \quad (12)$$

where  $\tilde{u}(p, T, \mathbf{c})$  and  $\tilde{h}(p, T, \mathbf{c})$  are determinate functions such that  $u = \sum c_k h_k^0 + \tilde{u}$  and  $h = \sum c_k h_k^0 + \tilde{h}$ . Thus, the indeterminacy is removed and the arbitrary constants  $h_k^0$  are involved only in the reactive case where these constants have to be part of the problem's data.

### 4. Cavern governing equations

Let  $\varphi_\alpha(\mathbf{x}, t)$ , any scalar, vector or tensor function of time and position, assumed continuous and differentiable, denotes the density per unit mass within the phase  $\alpha$  of a global additive quantity  $\Phi_\alpha(t) = \int_{\Omega_\alpha} \rho_\alpha \varphi_\alpha dV$  associated to the contained matter at time  $t$  within the domain  $\Omega_\alpha$ . The time rate of change of  $\Phi_\alpha(t)$  may be expressed as follows:

$$d\Phi_\alpha/dt = \int_{\Omega_\alpha} \dot{\gamma}_\alpha dV - \int_{\partial\Omega_\alpha} \phi_\alpha \cdot \mathbf{n}_\alpha dA \quad (13)$$

with

$$\phi_\alpha = \Gamma_\alpha + \rho_\alpha \varphi_\alpha (\mathbf{v}_\alpha - \omega_\alpha). \quad (14)$$

The values of  $\varphi_\alpha$ ,  $\Gamma_\alpha$  and  $\gamma_\alpha$  for the different balances are already listed in Table 1. Eq. (13) holds for any domain  $\Omega_\alpha$  whether stationary, moving, or expanding. It can be easily derived from the well known Reynolds transport theorem.

Eq. (13) must be complemented by the jump conditions corresponding to the exchanges between phases at interfaces  $\Sigma_{\alpha\lambda}$ :

$$\phi_\alpha \cdot \mathbf{n}_\alpha + \phi_\lambda \cdot \mathbf{n}_\lambda = 0 \quad (15)$$

where, as noted earlier,  $\mathbf{n}_\alpha$  is the outward unit vector on the boundary of  $\Omega_\alpha$  and the notation  $\phi_\alpha$  must be understood here as the quantity of  $\phi$  that is evaluated in the  $\alpha$  phase at the interface. Further details on Eq. (15) are given in many textbooks on interfacial transport phenomena (see, e.g., <sup>42–44</sup>) and will not be given here.

Thereafter, we will apply these formulas (13) and (15) to the balance laws of mass and energy under the assumptions that the contained matter within the domain  $\Omega_\alpha$ , at each time  $t$ , has no velocity and its thermodynamic state remains uniform. These assumptions simplify the model by replacing the initial problem with field variables, functions of space and time, with a simple time-dependent problem in which we have to determine only the state variables ( $p_\alpha, T_\alpha, \mathbf{c}_\alpha$ ) of each phase  $\alpha$ . Although this approach is not fully satisfactory from a theoretical point of view, it remains consistent with a global cavern model, whose external data (such as the mass and energy exchanges with the well, the global heat flux from the salt mass, and the cavern boundary displacement) are known, in the most favorable case, at the whole cavern scale.

It is noteworthy that assuming an artificial stationarity in  $\Omega_\alpha$  does not necessarily mean that there is no exchange with the other domains: we only admit that the velocity field is null at almost every point of  $\Omega_\alpha(t)$  except in a tight area along the boundary  $\partial\Omega_\alpha(t)$ .

In the following part, for convenience, the compact notation  $\dot{\Phi}_\alpha$  will be adopted to substitute  $d\Phi_\alpha/dt$ .

#### 4.1. Mass balance

First, let us consider the mass  $\mathcal{M}_{k\alpha}(t) = \int_{\Omega_\alpha} \rho_\alpha c_{k\alpha} dV$  of the component  $k$  in one of the two fluid phases ( $\gamma$  ou  $\beta$ ). In this case, we have

$$\dot{\Phi}_\alpha = \rho_{k\alpha} (\mathbf{v}_{k\alpha} - \omega_\alpha) \quad (16)$$



in which  $\rho_{k\alpha} = \rho_\alpha c_{k\alpha}$ . The rate of change of the mass  $\mathcal{M}_{k\alpha}$  can therefore be written in the form

$$\dot{\mathcal{M}}_{k\alpha} = Q_{k\alpha} + \pi_{k\alpha} \mathcal{V}_\alpha + \hat{\pi}_{k\alpha} \quad (17)$$

with

$$Q_{k\alpha} = - \int_{\mathcal{O}_\alpha} \rho_{k\alpha} \mathbf{v}_{k\alpha} \cdot \mathbf{n}_\alpha dA \quad (18)$$

$$\hat{\pi}_{k\gamma} = -\hat{\pi}_{k\beta} = - \int_{\Sigma_{\beta\gamma}} \rho_{k\gamma} (\mathbf{v}_{k\gamma} - \boldsymbol{\omega}_\gamma) \cdot \mathbf{n}_\gamma dA \quad (k \neq s) \quad (19)$$

$$\hat{\pi}_{s\beta} = - \int_{\Sigma_{\beta\sigma}} \rho_{s\beta} (\mathbf{v}_{s\beta} - \boldsymbol{\omega}_\beta) \cdot \mathbf{n}_\beta dA \quad (20)$$

where  $\mathcal{V}_\alpha(t)$  is the volume of the domain  $\Omega_\alpha$ . By summing over all components of the phase  $\alpha$  and knowing that  $\sum \mathcal{M}_{k\alpha} = \mathcal{M}_\alpha$ , it follows

$$\dot{\mathcal{M}}_\alpha = Q_\alpha + \hat{\pi}_\alpha \quad (21)$$

with

$$Q_\alpha = \sum Q_{k\alpha} = - \int_{\mathcal{O}_\alpha} \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\alpha dA \quad (22)$$

$$\hat{\pi}_\gamma = \sum \hat{\pi}_{k\gamma} = - \int_{\Sigma_{\beta\gamma}} \rho_\gamma (\mathbf{v}_\gamma - \boldsymbol{\omega}_\gamma) \cdot \mathbf{n}_\gamma dA \quad (23)$$

$$\hat{\pi}_\beta = -\hat{\pi}_\gamma + \hat{\pi}_{s\beta} \quad (24)$$

where we have used the fact that  $\sum \pi_{k\alpha} = 0$ . Writing that  $\mathcal{M}_{k\alpha} = c_{k\alpha} \mathcal{M}_\alpha$ , we can deduce

$$\mathcal{M}_\alpha \dot{c}_{k\alpha} = \pi_{k\alpha} \mathcal{V}_\alpha + Q_{k\alpha} - c_{k\alpha} Q_\alpha + \hat{\pi}_{k\alpha} - c_{k\alpha} \hat{\pi}_\alpha. \quad (25)$$

Concerning the  $i$  phase, as the rock salt is not necessarily pure, the flow production  $\hat{\pi}_{s\beta}$  may be accompanied by the production of insoluble materials such that

$$\dot{\mathcal{M}}_i = \frac{i}{(1-i)} \hat{\pi}_{s\beta} \quad (26)$$

where  $i$  is the concentration of insoluble materials per unit mass of the rock salt; it is assumed to remain constant.

#### 4.2. Energy balance

For each fluid phase  $\gamma$  and  $\beta$ , the rate of change of the energy  $\mathcal{E}_\alpha(t) = \int_{\Omega_\alpha} \rho_\alpha e_\alpha dV$  can be written in the form

$$\dot{\mathcal{E}}_\alpha = - \int_{\mathcal{O}_\alpha} \boldsymbol{\phi}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\alpha dA - \int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} \boldsymbol{\phi}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\alpha dA + \hat{\phi}_\alpha \quad (27)$$

with

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\phi}_\alpha &= \boldsymbol{\psi}_\alpha - \boldsymbol{\zeta}_\alpha \mathbf{v}_\alpha + p_\alpha \boldsymbol{\omega}_\alpha + \mathbf{a}_\alpha \\ \mathbf{a}_\alpha &= \sum \rho_{k\alpha} (\bar{H}_{k\alpha} \mathbf{v}_{k\alpha} - H_\alpha \boldsymbol{\omega}_\alpha) \\ \hat{\phi}_\beta &= -\hat{\phi}_\gamma - \hat{\phi}_i \end{aligned} \quad (28)$$

$$\hat{\phi}_\gamma = - \int_{\Sigma_{\beta\gamma}} \boldsymbol{\phi}_\gamma \cdot \mathbf{n}_\gamma dA, \quad \hat{\phi}_i = - \int_{\Sigma_{\beta i}} \boldsymbol{\phi}_i \cdot \mathbf{n}_i dA$$

and

$$\begin{aligned} H_\alpha &= e_\alpha + p_\alpha \mathcal{V}_\alpha \\ \bar{H}_{k\alpha} &= H_\alpha + \partial_{c_{k\alpha}} h_\alpha - \sum c_{j\alpha} \partial_{c_{j\alpha}} h_\alpha \end{aligned} \quad (29)$$

where  $\boldsymbol{\zeta}_\alpha$  denotes the viscous stress tensor of the  $\alpha$ -phase.

Given the above developments, we shall expand in what follows each term of Eq. (27), apart from the last one, which does not require any expansion. Let us start with the term  $\dot{\mathcal{E}}_\alpha$ . As the velocity is assumed to be zero in  $\Omega_\alpha$ , we have  $\mathcal{E}_\alpha = \mathcal{M}_\alpha u_\alpha$ . If we introduce

the enthalpy  $h_\alpha = u_\alpha + p_\alpha \mathcal{V}_\alpha$  where  $\mathcal{V}_\alpha = \mathcal{V}_\alpha / \mathcal{M}_\alpha$ , we obtain, considering the mass balance (21):

$$\dot{\mathcal{E}}_\alpha = \mathcal{M}_\alpha (\dot{h}_\alpha - \mathcal{V}_\alpha \dot{p}_\alpha) - p_\alpha \dot{\mathcal{V}}_\alpha + h_\alpha Q_\alpha + h_\alpha \hat{\pi}_\alpha \quad (30)$$

with  $\dot{\mathcal{V}}_\alpha = \int_{\partial\Omega_\alpha} \boldsymbol{\omega}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\alpha dA$ . Combining this equality with the expression of  $\dot{h}_\alpha(p_\alpha, T_\alpha, \mathbf{c}_\alpha)$  in terms of  $(\dot{p}_\alpha, \dot{T}_\alpha, \dot{c}_{k\alpha})$  and knowing (25), it follows

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{E}}_\alpha &= \mathcal{M}_\alpha (C_{p\alpha} \dot{T}_\alpha - \mathcal{V}_\alpha T_\alpha A_{p\alpha} \dot{p}_\alpha) - p_\alpha \dot{\mathcal{V}}_\alpha \\ &\quad + \sum_{k=1}^{q_\alpha-1} (Q_{k\alpha} + \hat{\pi}_{k\alpha}) \bar{h}_{k\alpha} + \mathcal{V}_\alpha \sum_{k=1}^{q_\alpha-1} \pi_{k\alpha} \partial_{c_{k\alpha}} h_\alpha \end{aligned} \quad (31)$$

with

$$\begin{aligned} C_{p\alpha} &= \partial_T h_\alpha(p_\alpha, T_\alpha, \mathbf{c}_\alpha) \\ A_{p\alpha} &= \partial_T \mathcal{V}_\alpha(p_\alpha, T_\alpha, \mathbf{c}_\alpha) / \mathcal{V}_\alpha \end{aligned} \quad (32)$$

$$\bar{h}_{k\alpha} = h_\alpha + \partial_{c_{k\alpha}} h_\alpha - \sum c_{j\alpha} \partial_{c_{j\alpha}} h_\alpha$$

where  $C_{p\alpha}$  and  $A_{p\alpha}$  are the specific heat capacity at constant pressure and the isobaric thermal expansion coefficient of the  $\alpha$ -phase, respectively. The quantity  $\bar{h}_{k\alpha}$  is the partial specific enthalpy defined as the partial derivative of the total enthalpy  $\mathcal{H}_\alpha = \mathcal{M}_\alpha h_\alpha(p_\alpha, T_\alpha, \mathbf{c}_\alpha)$  with respect to the mass of the  $k$ -component in the  $\alpha$ -phase, keeping the temperature, pressure, and  $\mathcal{M}_{j\alpha}$  ( $j \neq k$ ) fixed:  $\bar{h}_{k\alpha} = \partial_{\mathcal{M}_{k\alpha}} \mathcal{H}_\alpha$ .

Knowing that  $\boldsymbol{\omega}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\alpha = 0$  and neglecting the contribution of the terms  $\boldsymbol{\psi}_\alpha$  and  $\boldsymbol{\zeta}_\alpha$ , the integral expressed in (27) over the boundary  $\mathcal{O}_\alpha$  becomes

$$- \int_{\mathcal{O}_\alpha} \boldsymbol{\phi}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\alpha dA = - \int_{\mathcal{O}_\alpha} \mathbf{a}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\alpha dA. \quad (33)$$

If we decompose the flow rate  $Q_{k\alpha}$  into inflow and outflow rates:  $Q_{k\alpha} = Q_{k\alpha}^I + Q_{k\alpha}^O$ , and consider that the thermodynamic state of the outgoing matter from  $\Omega_\alpha$  is the same as that of the matter remaining in the cavern, we obtain

$$- \int_{\mathcal{O}_\alpha} \mathbf{a}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\alpha dA = \sum (Q_{k\alpha}^I \bar{H}_{k\alpha}^I + Q_{k\alpha}^O \bar{H}_{k\alpha}^O). \quad (34)$$

As for the integral term over the boundary  $\Sigma_{\alpha\sigma}$ , in accordance with the impermeability assumption of the rock salt to components  $k \neq s$ , we may write it, as a first step, as follows:

$$- \int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} \mathbf{a}_\alpha \cdot \mathbf{n}_\alpha dA = \hat{\pi}_{s\alpha} h_{s\sigma} \quad (35)$$

where  $h_{s\sigma} = h_{s\sigma}(p_\beta, T_\beta)$  is the specific enthalpy of the crystal salt assumed under the same pressure  $p_\beta$  and temperature  $T_\beta$  as in the  $\beta$ -phase. Indeed, the rock salt impermeability to the  $\gamma$ -phase components can be mathematically quantified by  $\int_{\Sigma_{\gamma\sigma}} \mathbf{a}_\gamma \cdot \mathbf{n}_\gamma dA = 0$ , hence the equality (35) holds with  $\hat{\pi}_{s\gamma} = 0$ .<sup>1</sup> However, this equality (35) is less obvious for the phase  $\beta$  and requires some explanations. According to Eq. (3), and assuming that  $H_\beta = h_\beta$  on  $\Sigma_{\beta\sigma}$ , we may first write that  $\mathbf{a}_\beta = \partial_{\mathcal{M}_{s\beta}} \rho_{s\beta} (\mathbf{v}_{s\beta} - \boldsymbol{\omega}_\beta)$ . However, from Euler's relation, one can write that:  $\mathcal{H}_\beta = \mathcal{M}_{s\beta} \bar{h}_{s\beta} + \sum_{k \neq s} \mathcal{M}_{k\beta} \bar{h}_{k\beta}$ , in which the partial specific enthalpy  $\bar{h}_{k\beta}$  appears as the contribution of the component  $k$  to the whole mixture enthalpy. When  $-\rho_{s\beta} (\mathbf{v}_{s\beta} - \boldsymbol{\omega}_\beta) \cdot \mathbf{n}_\beta \geq 0$ , the partial enthalpy  $\bar{h}_{s\beta}$  must be brought by the salt rock which is formed by crystal salt that is in contact with solid insoluble substances. The enthalpy additivity then allows us to bring the term  $\bar{h}_{s\beta} = \partial_{\mathcal{M}_{s\beta}} \mathcal{H}_\beta$  closer to the crystal salt specific enthalpy  $h_{s\sigma}$ ; its dependence on  $p_\beta$  and  $T_\beta$  is only a working assumption whose justification is not so simple as that one relating to a homogeneous thermodynamic system formed by a brine in thermodynamic equilibrium (equality of the chemical potentials) with crystal salt.

<sup>1</sup> Unlike other components, the component  $s$  is such that  $\hat{\pi}_{s\gamma} \neq -\hat{\pi}_{s\beta}$ .

Using (35), the integral term over the boundary  $\Sigma_{\alpha\sigma}$  in Eq. (27) can be transformed as follows:

$$-\int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} \phi_{\alpha} \cdot \mathbf{n}_{\alpha} dA = -\int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} (\psi_{\alpha} - \zeta_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}) \cdot \mathbf{n}_{\alpha} dA - p_{\alpha} \int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} \mathbf{w}_{\alpha} \cdot \mathbf{n}_{\alpha} dA + \hat{\pi}_{s\alpha} h_{s\sigma}. \quad (36)$$

Thus, in view of all the above considerations, the energy balance equation for both  $\gamma$  and  $\beta$  fluid phases, can be expressed in the form

$$\begin{aligned} & \mathcal{M}_{\alpha} (C_{p\alpha} \dot{T}_{\alpha} - v_{\alpha} T_{\alpha} A_{p\alpha} \dot{p}_{\alpha}) \\ &= p_{\alpha} (\dot{V}_{\alpha} - \int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} \mathbf{w}_{\alpha} \cdot \mathbf{n}_{\alpha} dA) + \sum Q_{k\alpha}^I (\bar{H}_{k\alpha}^I - \bar{h}_{k\alpha}) \\ & - \sum \hat{\pi}_{k\alpha} \bar{h}_{k\alpha} + \hat{\pi}_{s\alpha} h_{s\sigma} - v_{\alpha} \sum \pi_{k\alpha} \partial_{c_{k\alpha}} h_{\alpha} \\ & - \int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} (\psi_{\alpha} - \zeta_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}) \cdot \mathbf{n}_{\alpha} dA + \hat{\phi}_{\alpha}. \end{aligned} \quad (37)$$

In the case of a brine filled cavern (only the  $\beta$  phase is present) under a constant pressure, without any chemical reaction ( $\pi_{k\beta} = 0$ ), and exchanging with the outside, during the infinitesimal time interval  $dt$ , only an amount  $dM_{s\beta} = \hat{\pi}_{s\beta} dt$  of salt, the energy balance (37) may be greatly simplified and reduced to  $\mathcal{M}_{\beta} C_{p\beta} dT = -(\bar{h}_{s\beta} - h_{s\sigma}) dM_{s\beta}$ . The quantity  $\bar{h}_{s\beta} - h_{s\sigma}$  is none other than the specific heat of dissolution. We can proceed similarly to show that the latent heat of phase transition (from  $\gamma$  to  $\beta$ ), for an amount  $dM_{j\gamma} = \hat{\pi}_{j\gamma} dt$  of component  $j$  in a two-phase filled cavern, can be written as  $\bar{h}_{j\beta} - \bar{h}_{j\gamma}$ , so that  $(\mathcal{M}_{\gamma} C_{p\gamma} + \mathcal{M}_{\beta} C_{p\beta}) dT = (\bar{h}_{j\beta} - \bar{h}_{j\gamma}) dM_{j\gamma}$ .

Regarding the phase  $\iota$ , since it behaves as a single-component fluid phase, as assumed earlier, its thermodynamic state can be characterized only by a pressure  $p_{\iota}$  and a temperature  $T_{\iota}$ . Its energy balance equation can therefore be written as

$$\mathcal{M}_{\iota} (C_{p\iota} \dot{T}_{\iota} - v_{\iota} T_{\iota} A_{p\iota} \dot{p}_{\iota}) = p_{\iota} (\dot{V}_{\iota} - \int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} \mathbf{w}_{\iota} \cdot \mathbf{n}_{\iota} dA) - \int_{\Sigma_{\alpha\sigma}} (\psi_{\iota} - \zeta_{\alpha} \mathbf{v}_{\iota}) \cdot \mathbf{n}_{\iota} dA + \hat{\phi}_{\iota} \quad (38)$$

in which  $\hat{\phi}_{\iota}$  is the term that describes globally the heat exchange between the two phases  $\iota$  and  $\beta$ .

#### 4.3. Additional assumptions and system of equations

Despite the large amount of simplifying assumptions already expressed, the determination of the thermodynamic state for each phase  $\alpha$  remains an issue, especially since, as shown in Eqs. (37) and (38), there are integral terms over the interfaces  $\Sigma_{\alpha\lambda}$  that cannot be easily quantified unless introducing empirical interfacial laws. Such an approach, although mathematically attractive, seems however very complex in the practical use because it will lead to a rather heavy formalism, whose validation *in situ* and/or in laboratory is at least difficult and even impossible today. Hence we have to adopt some additional simplifying assumptions: we consider that in each domain  $\Omega_{\alpha}$  there is the same pressure  $p_{\alpha} = p$  and the same temperature  $T_{\alpha} = T$ . This modeling approach, adopted in the literature by many authors such as Bérest et al.<sup>45</sup>, Rouabhi et al.<sup>46</sup> and Kushnir et al.<sup>25</sup>, is obviously quite simple but it is not irrelevant in practice and it remains consistent with a global model at the whole cavern scale.

Summing up over the three phases  $\beta$ ,  $\gamma$  and  $\iota$ , and taking into account the volume additivity ( $V = \sum V_{\alpha}$ ), we can get the following system of equations:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{T} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{W} \\ \dot{\Psi} \end{pmatrix} \quad (39)$$

with

$$\begin{aligned} A_{11} &= \sum_{\alpha} \mathcal{M}_{\alpha} v_{\alpha} A_{p\alpha}, & A_{12} &= -\sum_{\alpha} \mathcal{M}_{\alpha} v_{\alpha} B_{T\alpha} \\ A_{21} &= \sum_{\alpha} \mathcal{M}_{\alpha} C_{p\alpha}, & A_{22} &= -\sum_{\alpha} \mathcal{M}_{\alpha} v_{\alpha} A_{p\alpha} T \end{aligned} \quad (40)$$

$$\dot{W} = \dot{V} - \sum_{\alpha} \sum_{k=1}^{q_{\alpha}-1} \bar{v}_{k\alpha} \dot{M}_{k\alpha}$$

$$\Psi = \Psi_{\sigma} + \hat{\Psi} + \Psi_c + \Psi_I$$

where  $B_{T\alpha}$  is the isothermal compressibility factor,  $\bar{v}_{k\alpha}$  is the partial specific volume and the quantities  $\Psi_{\sigma}$ ,  $\hat{\Psi}$ ,  $\Psi_c$  and  $\Psi_I$  are the total heat exchanged between the cavern and the rock salt, the latent heat of phase transition, the heat induced by chemical reactions and the heat resulting from the ingoing matter, respectively. Their expressions are as follows:

$$\begin{aligned} B_{T\alpha} &= -\partial_{p_{\alpha}} v_{\alpha}(p_{\alpha}, T_{\alpha}, \mathbf{c}_{\alpha}) / v_{\alpha} \\ \bar{v}_{k\alpha} &= v_{\alpha} + \partial_{c_{k\alpha}} v_{\alpha} - \sum_{j=1}^{q_{\alpha}-1} C_{j\alpha} \partial_{c_{j\alpha}} v_{\alpha} \end{aligned} \quad (41)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{\sigma} &= -\int_{\partial\Omega} \psi \cdot \mathbf{n} dA \\ \hat{\Psi} &= -\hat{\pi}_{s\beta} (\bar{h}_{s\beta} - h_{s\sigma}) + \sum_{k=1}^{q_{\gamma}-1} \hat{\pi}_{k\gamma} (\bar{h}_{k\beta} - \bar{h}_{k\gamma}) \\ \Psi_c &= -\sum_{\alpha} \sum_{k=1}^{q_{\alpha}-1} v_{\alpha} \mathcal{M}_{\alpha} \pi_{k\alpha} \partial_{c_{k\alpha}} h_{\alpha} \end{aligned} \quad (42)$$

$$\Psi_I = \sum_{k=1}^{q_{\gamma}-1} Q_{k\gamma}^I (\bar{H}_{k\gamma}^I - \bar{h}_{k\gamma}) + \sum_{k=1}^{q_{\beta}-1} Q_{k\beta}^I (\bar{H}_{k\beta}^I - \bar{h}_{k\beta}).$$

It is worth noting that in equation system (39), the contribution of  $\zeta$  has been neglected, and the fact that  $\dot{V} = \int_{\partial\Omega} \omega \cdot \mathbf{n} dA$  and  $\sum_{\alpha} \hat{\phi}_{\alpha} = 0$  have been taken into account.

To ensure the mathematical closure of the problem, the second member of the equation system (39) must be fully known. This can be achieved by knowing not only the volumetric chemical terms ( $\pi_{k\alpha}$ ) and the global terms ( $Q_{k\alpha}$ ,  $Q_{k\alpha}^I$ ,  $\bar{H}_{k\alpha}^I$ ,  $\dot{V}$  and  $\Psi_{\sigma}$ ) resulting from the cavern interactions with its surroundings but also the interfacial terms  $\hat{\pi}_{k\alpha}$  resulting from the mass exchanges at the interfaces  $\Sigma_{\beta\lambda}$  ( $\lambda = \gamma, \sigma$ ). The latter terms may be found either thanks to empirical laws that model the mass transfer kinetics according to the cavern global thermodynamic state, or calculated from Eq. (25) assuming, for each component  $k$ , the thermodynamic equilibrium by imposing the equality of the chemical potentials in order to evaluate, at each time, the concentration  $c_{k\alpha}$ .

In this work we will not go into further details about neither the terms  $\pi_{k\alpha}$  nor the terms  $\hat{\pi}_{k\alpha}$ . We shall, however, in what follows, briefly describe and discuss the cavern interactions with its surroundings.

#### 5. Cavern-well-formation interactions

As illustrated in the schematic Fig. 3, the cavern can be considered as only one important subsystem of the entire underground storage system which may be divided mainly into three subsystems: the cavern (1), the well that connects the cavern to the ground surface (2) and the surrounding formation (3). The latter subsystem can itself be subdivided into two sub-subsystems: the formation around the cavern (3a) and the formation around the well (3b). These sub and sub-subsystems are connected to each other through interfacial laws expressing the transfer of mass, momentum and energy.

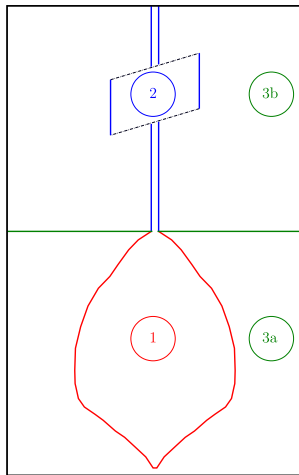


Fig. 3. Schematic illustration of the different subsystems forming the entire underground storage system.

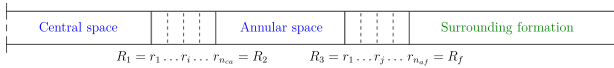


Fig. 4. Schematic geometry of the different compartments forming the well.

When assuming that the cavern variables are known, it can therefore be possible, knowing the interfacial laws, to specify the unknown parts of the boundary conditions for the subsystem (2) and for the sub-subsystem (3a). Given the complete boundary conditions, the problem in each subsystem can then be resolved, leading finally to a new data for the cavern subsystem. As a result, it is a fully coupled problem where the result of one subsystem determines the input of the other and conversely. However, since this coupling is only through interfacial laws, each subsystem can be studied separately, as already done for the cavern subsystem, thereby ensuring the most appropriate formulation.

### 5.1. Well governing equations

The main purpose of the well governing equations is to determine, knowing the appropriate boundary conditions on both the upper (at the ground surface) and lower (at the cavern level) extremities, the thermodynamic state and the velocity field everywhere along the well and particularly at the cavern entrance where the quantities  $(Q_{k\alpha}, Q_{k\alpha}^1, \bar{H}_{k\alpha}^1)$  are needed (see the above cavern equations).

For single-well caverns, various types of tubular structures can be placed in the drilled hole to ensure the cavern operations from the leaching step to the abandonment step. Such a problem is conceptually described by Fig. 4 where the flow cross section is divided into two sub-cross sections defining a central space and an annular space separated from each other and from the surrounding formation by one or possibly several concentric conductive wall layers. In each space, the governing equations are mainly the same, except for the fact that the heat exchange in the central space is only with the annular space whereas for the annular space it is with the central space and the surrounding formation. For this reason, in what follows, they will be derived for a general pipe flow problem; the application to the present case is immediate.

The single phase multicomponent mixture transport equations describing the transient flow in pipes have been developed in a number of references (see, e.g.,<sup>41,47</sup> and references therein) on

the basis of a flow cross-section area averaging procedure that reduce the complex 3D problem to a 1D problem involving only one position variable  $x$  (curvilinear abscissa). This procedure is introduced, however, in a rather mathematical context and thus remains too complex to be used in underground storage applications. Moreover, this procedure is exact only when the equations of state are linear, which is not usually the case.

The aim of this section is to give a summary of the involved equations without going into too much detail, assuming the uniformity of the thermodynamic state variables over the flow cross-section.

Let  $\Omega(x_1, x_2)$  be an arbitrary portion of the pipe located between the position  $x_1$  and  $x_2$  and  $\partial\Omega(x_1, x_2)$  its bounding surface. It can be defined as  $\Omega(x_1, x_2) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 / \mathbf{x} = \mathbf{x}_c(x) + \tau, \tau \cdot \mathbf{t} = 0; x \in [x_1, x_2]\}$ , where  $\mathbf{x}_c(x)$  is the position vector of the pipe axis, assumed regular with respect to  $x$ , and  $\mathbf{t}(x) = \mathbf{x}'_c(x)^2$  is the unit tangent vector. Let also  $\Sigma(x)$  be the cross-section defined as the intersection of  $\Omega(x_1, x_2)$  with the plane passing through  $x$  and with normal vector  $\mathbf{t}$ , and  $\partial\Sigma(x)$  its bounding curve. Denote by  $\mathbf{n}$  the outward unit vector normal to  $\partial\Omega(x_1, x_2)$  and by  $\mathbf{m}$  the outward unit vector normal to  $\partial\Sigma(x)$  and contained in the plane defined by  $\Sigma(x)$ .

When  $|x_2 - x_1|$  approaches zero and assuming that there is no mass flow through the pipe wall ( $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ ), the balance equation of a specific density  $\varphi(x, t)$  could be expressed as

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(x)\partial_t(\rho\varphi)(x, t) + (Q\varphi)'(x, t) \\ = \int_{\Sigma(x)} \gamma J_{\Omega} dA - \left( \int_{\Sigma(x)} \Gamma \cdot \mathbf{t} dA \right)' - \int_{\partial\Sigma(x)} \Gamma \cdot \mathbf{n}_\ell d\ell \end{aligned} \quad (43)$$

with

$$J_{\Omega} = 1 - \tau \cdot \mathbf{t}', \quad J_{\ell} = \|(J_{\Omega} \mathbf{m} - (\tau' \cdot \mathbf{m}) \mathbf{t})\| \quad (44)$$

and

$$Q(x, t) = \mathcal{A}(x)\rho(x, t)v(x, t), \quad \mathcal{A}(x) = \int_{\Sigma(x)} dA \quad (45)$$

where the tangential velocity  $v$  is such that  $\mathbf{v} = v(x, t)\mathbf{t}(x)$  and the values of  $\varphi$ ,  $\Gamma$  and  $\gamma$  are always given by Table 1. Notice that the quantities  $J_{\Omega}$  and  $J_{\ell}$  are reduced to 1 when the tangent vector  $\mathbf{t}$  is independent of  $x$ .

If the cross-section area  $\mathcal{A}(x)$  presents a discontinuity at a point  $y \in [x_1, x_2]$ , then Eq. (43) must be complemented by a jump condition associated to this discontinuity. This condition may be written as

$$[[Q\varphi]] = -[[\int_{\Sigma(y)} \Gamma \cdot \mathbf{t} dA]] + \text{sgn}([[\mathcal{A}]]) \int_{\Sigma_{\ell}(y)} \Gamma \cdot \mathbf{t} dA \quad (46)$$

where  $\Sigma_{\ell}(y)$  is the boundary wall with area  $[[[\mathcal{A}]]]$  and outward unit normal vector  $-\text{sgn}([[\mathcal{A}]])\mathbf{t}(y)$ ,  $\text{sgn}(\cdot)$  is the sign function, and  $[[\phi]](y) = \phi(y^+) - \phi(y^-)$  denotes the jump of a discontinuous function  $\phi(x)$  at  $x = y$ .

When applied to the mass, momentum, total energy and entropy balance laws, Eq. (43) enables us to write the following equations:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}\rho\dot{v} - (\mathcal{A}v)' &= 0 \\ \mathcal{A}\rho\dot{v} + \mathcal{A}p' - (\mathcal{A}\zeta)' &= \mathcal{A}\rho\mathcal{G} + L_{\zeta}\zeta_w \\ \mathcal{A}\rho\left(\dot{u} + p\dot{v} - \sum(\partial_{\mathbf{c}_k} h)\dot{\mathbf{c}}_k\right) + (\mathcal{A}\psi)' &= \mathcal{Z} \\ \mathcal{A}\rho T\left(\dot{s} - \sum(\partial_{\mathbf{c}_k} s)\dot{\mathbf{c}}_k\right) + (\mathcal{A}\psi)' &= \mathcal{Z} \\ \mathcal{A}\rho\dot{\mathbf{c}}_k + (\rho\mathcal{A}J_k)' &= \mathcal{A}\pi_k, \quad k = 1, \dots, q - 1 \end{aligned} \quad (47)$$

<sup>2</sup> The notation  $(\cdot)'$  indicates the derivative with respect to the position  $x$ .

with

$$\mathcal{E} = L_\psi \psi_w - v L_\zeta \zeta_w + \mathcal{A}(v' \zeta - \varkappa) \quad (48)$$

$$\varkappa = \sum (\pi_k \partial_{c_k} h + \rho J_k (\partial_{c_k} h)'), \quad h = h(p, T, \mathbf{c})$$

and

$$\zeta = \frac{1}{\mathcal{A}} \int_{\Sigma(x)} \xi \mathbf{t} \cdot \mathbf{t} d\mathcal{A}, \quad \zeta_w = \frac{1}{L_\zeta} \int_{\partial \Sigma(x)} \xi \mathbf{n} \cdot \mathbf{t} \ell d\ell$$

$$\psi = \frac{1}{\mathcal{A}} \int_{\Sigma(x)} \boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{t} d\mathcal{A}, \quad \psi_w = -\frac{1}{L_\psi} \int_{\partial \Sigma(x)} \boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{n} \ell d\ell \quad (49)$$

$$J_k = \frac{1}{\mathcal{A}} \int_{\Sigma(x)} \mathbf{J}_k \cdot \mathbf{t} d\mathcal{A}, \quad \mathcal{G} = \mathbf{g} \cdot \mathbf{t}$$

where  $\dot{\varphi} = \varphi' + \partial_t \varphi$  is the material derivative of the quantity  $\varphi$ ,  $L_\zeta$  is the wetted perimeter and  $L_\psi$  is the heat-transfer perimeter which is not necessarily equal to  $L_\zeta$ . Notice that the total energy and the entropy balance equations are similar when the local state is postulated, as already discussed in Section 3, is used.

The mathematical closure of Eq. (47) requires knowledge of, on the one hand, the secondary unknowns  $\{\zeta; \pi_k; J_k; \psi\}$  and, on the other hand, the quantities  $\zeta_w$  and  $\psi_w$  resulting from friction and heat transfer with the pipe wall, respectively.

In pipe or duct flow problems, the contribution of the secondary unknowns  $\{\zeta; J_k; \psi\}$  is generally neglected leading to a simpler form of Eq. (47):

$$\mathcal{A} \rho \dot{v} - (\mathcal{A} v)' = 0$$

$$\mathcal{A} \rho \dot{v} + \mathcal{A} p' = \mathcal{A} \rho \mathcal{G} + L_\zeta \zeta_w$$

$$\mathcal{A} \rho (\dot{u} + p \dot{v}) = L_\psi \psi_w - v L_\zeta \zeta_w \quad (50)$$

$$\mathcal{A} \rho T \dot{s} = L_\psi \psi_w - v L_\zeta \zeta_w$$

$$\dot{c}_k = 0, \quad k = 1, \dots, q - 1$$

where we have also assumed that  $\pi_k = 0$ .

Regarding the quantities  $\zeta_w$  and  $\psi_w$ , they are usually given by empirical laws. The stress  $\zeta_w$  is generally expressed as  $\zeta_w = -C_f \rho v |v|/2$ , where  $C_f$  is a friction coefficient. As for the term  $\psi_w$ , since it uses the heat flux vector  $\boldsymbol{\psi}$  across the pipe wall which can be expressed, using the Newton's law, as  $\boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{n} = \bar{h}(T - T_w)$ , where  $\bar{h}$  and  $T_w$  are, respectively, the heat transfer coefficient and the temperature on the wall, it can therefore be defined, with respect to Fig. 4, as

$$(L_\psi \psi_w)_c = \mathcal{H}_{ca}(T_a - T_c) \quad (51)$$

$$(L_\psi \psi_w)_a = \mathcal{H}_{ca}(T_c - T_a) + \mathcal{H}_{af}(T_f - T_a)$$

where the subscripts  $c$ ,  $a$  and  $f$  are referring to the central space, the annular space and the well/formation interface, respectively. The overall coefficient of heat transfer  $\mathcal{H}_{ca}$  and  $\mathcal{H}_{af}$  can be expressed as

$$\frac{1}{\mathcal{H}_{ca}} = \frac{1}{L_\psi(R_1)\bar{h}(R_1)} + \frac{1}{L_\psi(R_2)\bar{h}(R_2)} + \mathcal{R}_{ca} \quad (52)$$

$$\frac{1}{\mathcal{H}_{af}} = \frac{1}{L_\psi(R_3)\bar{h}(R_3)} + \mathcal{R}_{af}$$

where the  $\mathcal{R}_{ca}$  and  $\mathcal{R}_{af}$  are thermal resistances which can be calculated as follows:

$$\mathcal{R}_I = \sum_{i=1}^{n_I-1} r_i \ln(r_{i+1}/r_i) / (\Lambda_i L_\psi(r_i)), \quad I = (ca, af) \quad (53)$$

where  $\Lambda_i$  is the thermal conductivity of the layer between radii  $r_i$  and  $r_{i+1}$ . The heat transfer coefficient  $\bar{h}$  is usually defined as  $\bar{h} = \Delta \text{Nu} / D_T$ , where  $\Delta$  is the fluid thermal conductivity,  $\text{Nu}$  is the Nusselt number and  $D_T = 4\mathcal{A} / L_\psi$  is the thermal diameter.

For both  $C_f$  and  $\text{Nu}$ , empirical laws can be found in specialized textbooks such as Kakaç and Yener<sup>48</sup> and Kaviany<sup>49</sup>.

When the cross-section  $\mathcal{A}$  presents a discontinuity, the application of Eq. (46) provides the following results:

$$[[Q]] = 0$$

$$Q[[v]] + \mathcal{A}^{\text{sgn}(v)}[[p]] = 0$$

$$[[h + v^2/2]] = 0 \quad (54)$$

$$Q[[s]] \geq 0$$

$$[[c_k]] = 0, \quad k = 1, \dots, q - 1.$$

Notice here that the total energy equation is not equivalent to the entropy equation which serves in this case only to ensure solution unicity in case of multiple solutions.

## 5.2. Surrounding formation governing equations

The design of a deep storage cavern (cavern shape, volume, depth) is not only influenced by the surrounding formation (sub-system 3a in Fig. 3) but also by all the covering formations (sub-system 3b) which, in addition to the heat exchange with the well, may undergo important subsidences resulting from the cavern convergence.

Regarding the above equations, the surrounding formation governing equations must provide us with both  $\dot{v}$  and  $\Psi_\sigma$  (see Eqs. (39) and (40)) for the cavern model as well as the temperature  $T_f$  (see Eq. (51)) for the well model. These equations can be reduced to

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \rho \mathbf{g} = \rho \dot{\mathbf{v}} \quad (55)$$

$$\rho C_\sigma \dot{T} + \nabla \cdot \boldsymbol{\psi} = 0$$

expressing the balance of momentum and energy, respectively. Notice that, depending on the nature of the stored fluid and on the rock salt permeability, this model may be enhanced by integrating the relevant field equations associated to the mass diffusion and permeation through the rock salt, without affecting the adopted methodology.

All terms in Eq. (55) have the same meaning as before except the quantity  $C_\sigma$  which becomes the specific heat capacity at constant stress and the material derivative which becomes here with respect to the velocity  $\mathbf{v}$  of the continuum particle that was at the position  $\mathbf{x}_0$  in the reference configuration and is, at the current time  $t$ , at the position  $\mathbf{x}$  in the deformed configuration:  $\mathbf{v} = \partial_t \mathbf{u}(\mathbf{x}_0, t)$ , where  $\mathbf{u}(\mathbf{x}_0, t) = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0$  is the displacement field. The mass density  $\rho$  is such that  $\rho(\mathbf{x}, t)J(\mathbf{x}_0, t) = \rho_0$ , where  $\rho_0 = \rho(\mathbf{x}_0, 0)$  and  $J$  is the Jacobian of the transformation from the undeformed to the deformed configuration defined by the deformation gradient tensor  $\underline{\underline{F}} = \partial_{\mathbf{x}_0} \mathbf{x}$ .

Eq. (55) must be completed with the initial conditions, the boundary conditions (in particular those accounting for the presence of the fluid within the cavern) and the constitutive laws that express the Cauchy Stress tensor  $\underline{\underline{\sigma}}$  and the heat flux vector  $\boldsymbol{\psi}$  as functions of the temperature  $T$  and the deformation gradient  $\underline{\underline{F}}$ . For  $\boldsymbol{\psi}$ , Fourier's law of heat conduction  $\boldsymbol{\psi} = -\underline{\underline{\Lambda}} \nabla T$ , where  $\underline{\underline{\Lambda}}$  is the thermal conductivity tensor, is generally used. However, for  $\underline{\underline{\sigma}}$ , the constitutive relation is not immediate, especially for rock salts which express a rather complex time-dependent behavior (see, e.g.,<sup>50–52</sup>). We can debate about the advantages and disadvantages of this or that law; but there can be no debate about the need of a large deformation formalism since the cavern convergence may, in certain cases, as illustrated, for instance, by Bérest<sup>53</sup>, be relatively large. But, despite an extensive literature (see, e.g.,<sup>54–61</sup>) on the subject, many aspects of this formalism remain obscure and are still a matter of intense research. It is not the right context here to go into details, however, for the sake of completeness of our approach, we will briefly present, in the remainder of this section, a thermodynamically consistent approach based on the partition



of the total strain rate and on an adequate definition of the elastic strain rate.

Let  $\underline{\underline{D}} = (\nabla \mathbf{v})^s$  be the Eulerian strain rate tensor given by the symmetric part of the velocity gradient. In literature, most works are based on the partition of  $\underline{\underline{D}}$  into an elastic and an inelastic parts, disagreements come with the definition of the elastic strain rate (see, e.g.,<sup>62</sup>). We assume here that it may be written, following the example of hypo-elastic materials<sup>63</sup>, in the form  $\underline{\underline{D}}^e = H^{-1} : \overset{\circ}{\underline{\underline{\tau}}}$ ,

where  $\overset{\circ}{\underline{\underline{\tau}}} = \dot{\underline{\underline{\tau}}} + \underline{\underline{\tau}} \underline{\underline{W}} - \underline{\underline{W}} \underline{\underline{\tau}}$  is the Jaumann rate of the Kirchoff stress  $\underline{\underline{\tau}} = J^e \underline{\underline{\sigma}}$ ,  $\underline{\underline{W}} = (\nabla \mathbf{v})^A$  is the spin tensor,  $J^e$  is such that  $J^e / J^e = \text{tr}(\underline{\underline{D}}^e)$ , and the fourth-order tensor  $H$  is the instantaneous elastic modulus tensor. The remaining part of  $\underline{\underline{D}}$  is assumed to be composed of a thermal strain rate caused by temperature and a viscoplastic strain rate  $\underline{\underline{D}}^{vp}$ . Hence, when the material isotropy is assumed, we can write

$$\underline{\underline{D}} = \frac{1+\nu}{E} \overset{\circ}{\underline{\underline{\tau}}} - \frac{\nu}{E} \text{tr}(\overset{\circ}{\underline{\underline{\tau}}}) \underline{\underline{1}} + \alpha_\ell \dot{T} \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{D}}^{vp} \quad (56)$$

where  $E, \nu$  (not to be confused with the specific volume in sections above) and  $\alpha_\ell$  denote the Young's modulus, Poisson's ratio and the coefficient of linear thermal expansion, respectively. Recalling that  $J/J^e = \text{tr}(\underline{\underline{D}})$  and since by assumption we have, at time  $t = 0$ ,  $J(0) = J^e(0) = 1$ , we can deduce

$$J = J^e(\underline{\underline{\tau}}) J^{in}(T, \zeta) \quad (57)$$

with

$$\begin{aligned} J^e(\underline{\underline{\tau}}) &= \exp \left\{ \frac{1-2\nu}{E} (\text{tr}(\underline{\underline{\tau}}) - \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}}_0)) \right\} \\ J^{in}(T, \zeta) &= \exp \left\{ 3\alpha_\ell (T - T_0) + \zeta \right\} \end{aligned} \quad (58)$$

in which  $\underline{\underline{\sigma}}_0 = \underline{\underline{\sigma}}(0)$ ,  $T_0 = T(0)$  and  $\zeta = \int_0^t \text{tr}(\underline{\underline{D}}^{vp}) dt$ .

Consider now the intrinsic dissipation per unit volume of the actual configuration  $\varpi_i$ . It can be written as

$$\varpi_i = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}} - \rho(\dot{f} + sT) \quad (59)$$

where  $f = u - Ts$  is the Helmholtz specific free energy.<sup>3</sup> Let  $\eta$ , which may be a scalar, vector or tensor, denote a discrete set of internal variables that characterize the material's past history and assume that  $\zeta$  is also an internal variable. Denote all of them by  $\xi = (\zeta, \eta)$ . If the local thermodynamic state is defined by  $(\underline{\underline{\tau}}, T, \xi)$ , it follows that

$$\begin{aligned} J\varpi_i &= J^{in} (H^{-1} : \underline{\underline{\tau}} - \rho_0 \partial_{\underline{\underline{\tau}}} f) : \underline{\underline{\tau}} \\ &+ (J^{in} \alpha_\ell \text{tr}(\underline{\underline{\tau}}) - \rho_0 (\partial_T f + s)) \dot{T} + J \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}}^{vp} - \rho_0 \partial_{\xi} f \dot{\xi} \end{aligned} \quad (60)$$

where we have used the fact that  $\underline{\underline{\tau}} : \underline{\underline{H}}^{-1} : (\underline{\underline{\tau}} \underline{\underline{W}} - \underline{\underline{W}} \underline{\underline{\tau}}) = 0$ . If the positivity of  $\varpi_i$  is assumed whatever the thermodynamic state  $(\underline{\underline{\tau}}, T, \xi)$  and whatever the strain rates  $\underline{\underline{\tau}}$  and  $\dot{T}$ , we can firstly deduce

$$\begin{aligned} \rho_0 \partial_{\underline{\underline{\tau}}} f &= J^{in} H^{-1} : \underline{\underline{\tau}} \\ \rho_0 (\partial_T f + s) &= J^{in} \alpha_\ell \text{tr}(\underline{\underline{\tau}}) \end{aligned} \quad (61)$$

$$J\varpi_i = J \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}}^{vp} - \rho_0 \partial_{\xi} f \dot{\xi} \geq 0$$

and thus, from the first equation of (61), that

$$\rho_0 f(\underline{\underline{\tau}}, T, \xi) = J^{in}(T, \zeta) \frac{1}{2} \underline{\underline{\tau}} : \underline{\underline{H}}^{-1} : \underline{\underline{\tau}} + \rho_0 \phi(T, \xi). \quad (62)$$

<sup>3</sup> The dissipation  $\varpi$  introduced in Section 3 can be split into intrinsic  $\varpi_i$  and thermal  $\varpi_\psi = -(\psi \cdot \nabla T)/T$  parts.

Hence, the viscoplastic strain rate  $\underline{\underline{D}}^{vp}$  and the evolution law of  $\xi$ , which may be expressed as

$$\underline{\underline{D}}^{vp} = \underline{\underline{\mathcal{E}}}(\underline{\underline{\sigma}}, T, \xi), \quad \dot{\xi} = \mathcal{X}(\underline{\underline{\sigma}}, T, \xi) \quad (63)$$

should, besides the objectivity requirement, i.e., invariance by translation and rotation of the frame of reference, be restricted, in accordance to Eqs. (61) and (62), by the condition:

$$J \left( \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}}^{vp} - J^e \frac{1}{2} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{H}}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}} \right) - \rho_0 (\partial_\zeta \phi \dot{\zeta} + \partial_\eta \phi \dot{\eta}) \geq 0. \quad (64)$$

Under this thermodynamic restriction, Eqs. (56) and (63) can therefore give rise to a wide range of rheological behavior since we can choose the arbitrary function  $\phi(T, \xi)$  in a manner that this condition is always fulfilled. Note however that this function must also satisfy the second equation of (61) under the fact that the heat capacity  $C_\sigma$ , introduced in (55), may be defined as:  $C_\sigma = T \partial_T s(\underline{\underline{\tau}}, T, \xi)$ .

## 6. Illustrative example

As an example of illustration, we consider the effect of the cyclic loading conditions on the cavern thermodynamic behavior. The aim is to show that this question cannot be rigorously answered without considering the thermo-mechanical aspects in the surrounding rock salt, regardless of the nature of the stored fluid. In order to reduce the number of data, the problem is simplified as follows: (a) the well is suppressed, (b) the cavern, assumed to be spherical with an initial volume  $v_0 = 300\,000 \text{ m}^3$ , is located in an infinite elasto-viscoplastic medium with uniform initial temperature  $T_\infty$  and uniform isotropic initial stress  $-p_\infty \underline{\underline{1}}$ , (c) the volume of the brine as well as the volume of the insoluble materials are neglected, and (d) at  $t = 0$ , the cavern thermodynamic state is in equilibrium with the surrounding rock salt ( $p(0) = p_\infty$ ,  $T(0) = T_\infty$ ). The quantities  $T_\infty$  and  $p_\infty$  are the averages over the cavern surface of the geothermal temperature and the geostatic pressure, respectively.

A brief summary of the main equations governing this case is given in the next section, before presenting the stored fluid, the rock salt behavior and the loading and boundary conditions in Sections 6.2–6.4, respectively.

### 6.1. Summary of the governing equations

For the thermodynamic problem in the cavern, the system (39) can be reduced in this case to

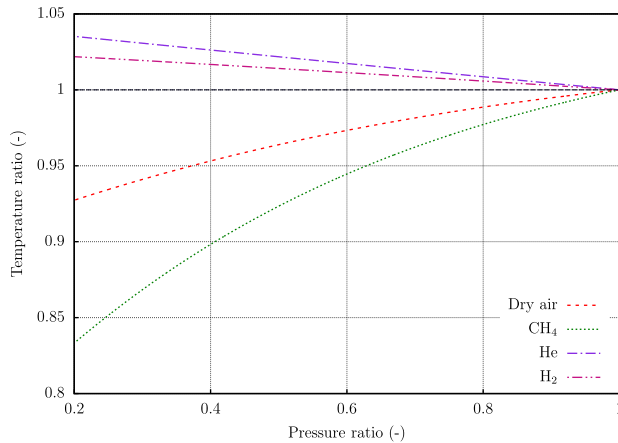
$$\begin{pmatrix} A_p & -B_T \\ \mathcal{M}C_p & -\nu A_p T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{T} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{v}/v - \dot{\mathcal{M}}/\mathcal{M} \\ Q^1(H^1 - h) + \Psi_\sigma \end{pmatrix} \quad (65)$$

where the phase subscript notation is omitted because it is superfluous in this case.

Regarding the thermo-mechanical problem in the rock salt formation, in spherical coordinates, the system (55) becomes (inertial forces neglected)

$$\begin{aligned} \partial_r \sigma_r + \frac{2}{r} (\sigma_r - \sigma_\theta) &= 0 \\ \partial_r^2 T + \frac{2}{r} \partial_r T &= (\rho C_\sigma / \Lambda) \dot{T} \end{aligned} \quad (66)$$

where the subscripts  $r$  and  $\theta$  refer to the radial and tangential components, respectively,  $\Lambda$  is the thermal conductivity (assumed isotropic in this case) and  $r = r(r_0, t)$  is the current radial position of the material point initially at  $r_0 \in [a_0, +\infty[$ , where  $a_0$  is the initial cavern radius. As for the constitutive law, under the



**Fig. 5.** Temperature ratio change  $T/T_0$  as a function of the pressure ratio  $p/p_0$  during an isenthalpic expansion from  $p_0 = 22$  MPa and  $T_0 = 40$  °C to  $p = 0.2 \times p_0$ .

assumption that the elastic strains remain infinitesimal ( $\underline{\tau} \approx \underline{\sigma}$ ), we can write from Eq. (56) that

$$\begin{aligned} \dot{H}_r &= \frac{(1+\nu)}{E} \dot{\sigma}_r - \frac{\nu}{E} \text{tr}(\underline{\dot{\sigma}}) + \alpha_\ell \dot{T} + D_r^{vp} \\ \dot{H}_\theta &= \frac{(1+\nu)}{E} \dot{\sigma}_\theta - \frac{\nu}{E} \text{tr}(\underline{\dot{\sigma}}) + \alpha_\ell \dot{T} + D_\theta^{vp} \end{aligned} \quad (67)$$

where  $H_r = \ln(\partial_0 r)$  and  $H_\theta = \ln(r/r_0)$  are the logarithmic strains.

### 6.2. Stored fluid

The analysis is conducted using four working fluids: pure methane ( $\text{CH}_4$ ), dry air, hydrogen ( $\text{H}_2$ ) and helium (He). For each substance, a special high accuracy equation of state is used: equation of Setzmann and Wagner<sup>64</sup> for methane, equation of Lemmon et al.<sup>65</sup> for dry air and equations of Kunz and Wagner<sup>18</sup> for hydrogen and helium. These gases, besides the fact that they are different in terms of the compressibility behavior, can be classified into two distinct categories depending on the sign of the Joule-Thomson coefficient  $\partial_p T(h, p)$ : one formed by hydrogen and helium for which  $\partial_p T(h, p) < 0$ , and the other by methane and air for which  $\partial_p T(h, p) > 0$ , as illustrated by Fig. 5, showing the temperature change as a function of the pressure during an isenthalpic expansion.

### 6.3. Rock salt behavior

The viscoplastic strain rate tensor  $\underline{D}^{vp}$  is given by Lemaitre creep law<sup>15</sup>, which can be expressed as

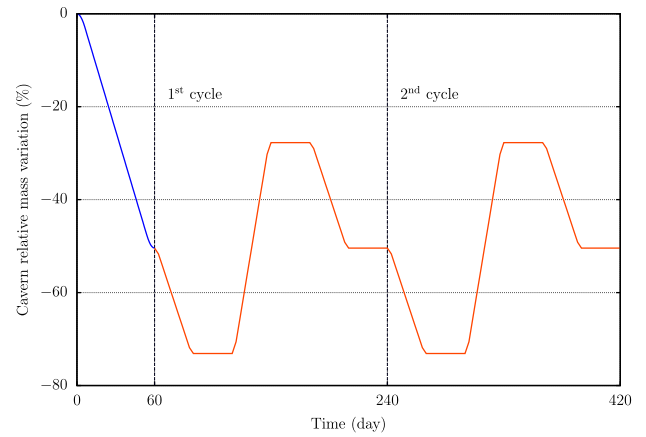
$$\underline{D}^{vp} = \frac{3}{2} \frac{\dot{\gamma}}{q} \underline{\sigma}' \quad (68)$$

where  $\underline{\sigma}' = \underline{\sigma} - \text{tr}(\underline{\sigma})\underline{1}/3$  is the deviatoric tensor part of  $\underline{\sigma}$ ,  $q = \sqrt{3/2} \|\underline{\sigma}'\|$  is the Von Mises equivalent stress and  $\gamma$  is a scalar internal variable, accounting for material hardening, whose evolution law is of the form

$$\frac{d\gamma}{dt} = \left( \frac{q}{K(T)} \right)^\beta, \quad K(T) = K_r \exp\left(B\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_r}\right)\right) \quad (69)$$

where  $(\alpha, \beta, K_r, T_r, B)$  are material constants.

All material parameters needed for the simulations are given in Table 2. These parameters come from MINES ParisTech laboratory database.



**Fig. 6.** Imposed cavern relative mass variation; only the first two cycles are plotted.

### 6.4. Loading and boundary conditions

Salt cavern storage involves generally cyclic loading operations with a predefined range of the cavern pressure depending on the characteristics of both the well and the surrounding rock. In the case of gas storage, the cavern pressure varies typically in the range from  $0.2 \times p_\infty$  to  $0.8 \times p_\infty$ .

In this illustrative example, the cavern pressure will not be explicitly imposed. As in the *in situ* case, it will result from mass flow injection and withdrawal. Fig. 6 gives the imposed cavern relative mass variation  $(\mathcal{M}(t)/\mathcal{M}(0) - 1) \times 100$  used for all the simulations. As can be seen from this figure, after a first withdrawal period of 60 days, the loading conditions go through a cyclic phase that maintains the time-average cavern mass equal to 50% of the initial mass. In each cycle, which consists of a period of withdrawal followed by a period of injection and a period of rest, the cavern mass fluctuates between a maximum and a minimum values of about  $-28\%$  and  $-73\%$  of the initial mass, respectively. The imposed mass flow rate for each gas is thus calculated in each case according to these predefined conditions. The cycling period is set to 180 days.

The thermodynamic state of the matter entering the cavern is assumed constant in time and equal to the initial cavern thermodynamic state defined by the pressure  $p(0) = 22$  MPa and the temperature  $T(0) = 40$  °C.

At the cavern wall, the boundary conditions for the thermo-mechanical problem are of the form

$$\sigma_r = -p_c, \quad T = T_c \quad (70)$$

where  $(p_c, T_c)$  are the solution of the system (65).

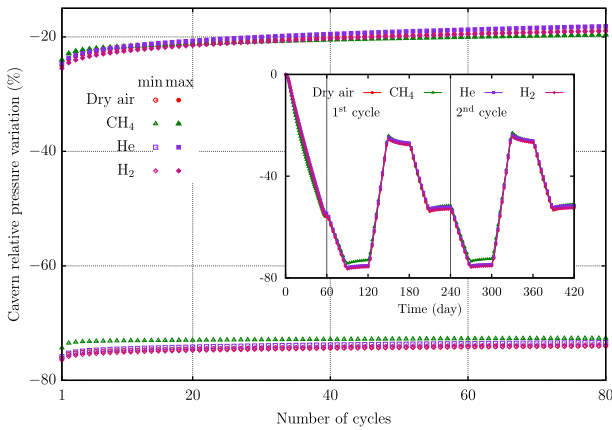
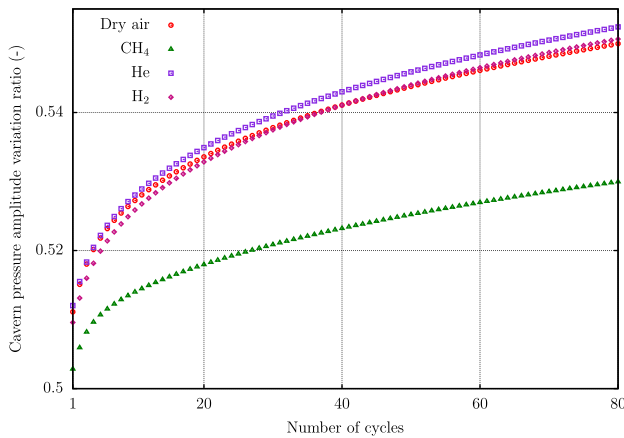
### 6.5. Results and discussion

First, for a given quantity  $\varphi(t)$ , let  $(\varphi(t)/\varphi(0) - 1) \times 100$  defines its relative variation and  $(\max \varphi - \min \varphi)/\varphi(0)$  its amplitude variation ratio over a cycle (the temperature is in °C).

Figs. 7 and 8 show the cavern relative pressure variation and the amplitude variation ratio during the loading process, respectively. Independently of the considered gas, the pressure variations remain in a correct range as explained just above. Although the significant differences in the compressibility behavior, the difference between the different gases remains relatively small. This is essentially due to the fact that the simulations are performed not under the same mass flow rate but under the same mass variation.

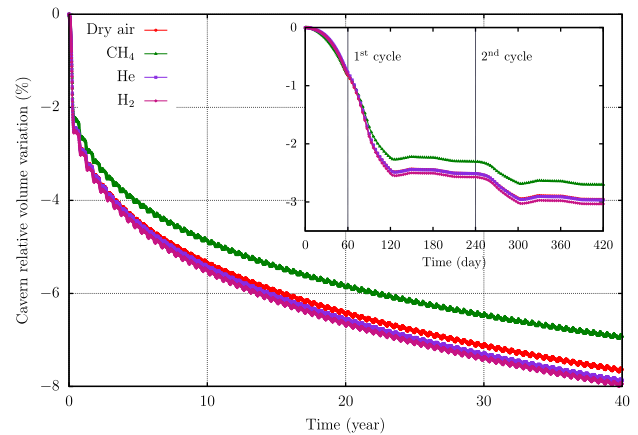
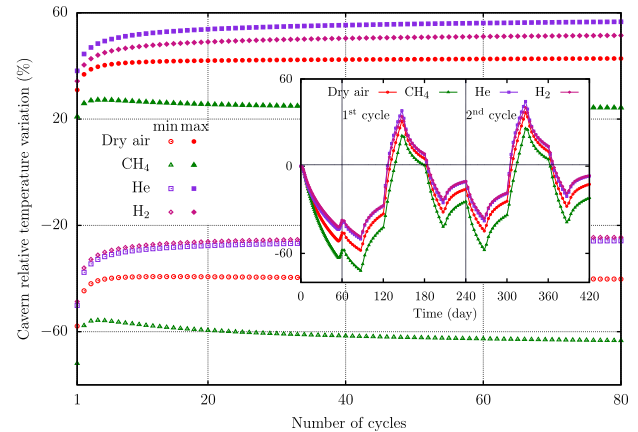
**Table 2**  
Rock salt material constants.

Thermo-elastic parameters				
$E$ (MPa)	$\nu$	$\alpha_\ell$ (1/K)	$\Lambda$ (W/(m K))	$\rho C_\sigma$ (J/(m <sup>3</sup> K))
25 000	0.25	$4 \times 10^{-5}$	5.78	$2 \times 10^6$
Viscoplastic parameters, unit system ( $\mu\text{m/m}$ , MPa, d, K)				
$\alpha$	$\beta$	$K_r$	$T_r$	$B$
0.3	3.24	0.72	303	772

**Fig. 7.** Cavern relative pressure variation: minimum and maximum values over each cycle as a function of the number of cycles. The inset plot shows this variation during the first 420 days.**Fig. 8.** Cavern pressure amplitude variation ratio as a function of the number of cycles.

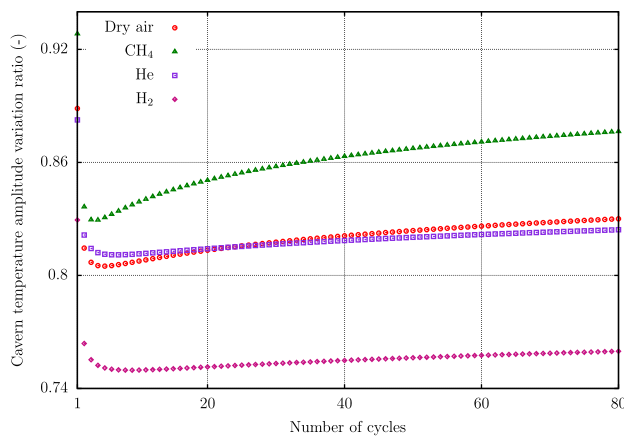
Despite the fact that the cavern mass is conserved at the end of each withdrawal/injection operation, as shown in Fig. 6, the cavern pressure evolution is not negligible (see Figs. 7 and 8). This evolution results mainly from the cavern volume loss due to the rock salt creep as can be seen from Fig. 9 showing the cavern relative volume variation as a function of time. From this figure, we can also realize that the effect of the cycling on the volume loss is rather small and that the difference between the four considered gases, despite its evolution over the years, remains relatively limited: after 40 years, the difference between the two extreme cases ( $\text{CH}_4$  and  $\text{H}_2$ ) is around 1%.

Fig. 10 shows the cavern relative temperature evolution during the loading process. Unlike the pressure and the volume, the temperature evolution depends significantly on the nature of the

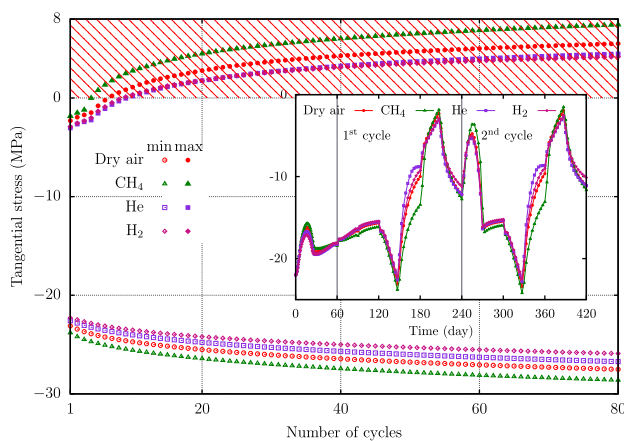
**Fig. 9.** Cavern relative volume variation as a function of time. The inset plot shows a zoom on the first 420 days.**Fig. 10.** Cavern relative temperature variation: minimum and maximum values over each cycle as a function of the number of cycles. The inset plot shows this variation during the first 420 days.

stored fluid. However, since this dependency acts by translating both the minimum and the maximum values, the amplitude variation ratio remains in the same order of magnitude, with a maximum difference of about 0.1% between  $\text{CH}_4$  and  $\text{H}_2$  as can be seen from Fig. 11. Notice that the observed temperature evolution is partly due to the heat exchange between the cavern and the surrounding rock salt. It is also noteworthy that, despite their differences in terms of the Joule–Thomson effect, both categories of gases behave similarly: the temperature increases during injection and decreases during withdrawal.

When dealing only with these considerations, it seems then that the imposed loading conditions are in rather good adequation with the global cavern performances in terms of pressure, volume and

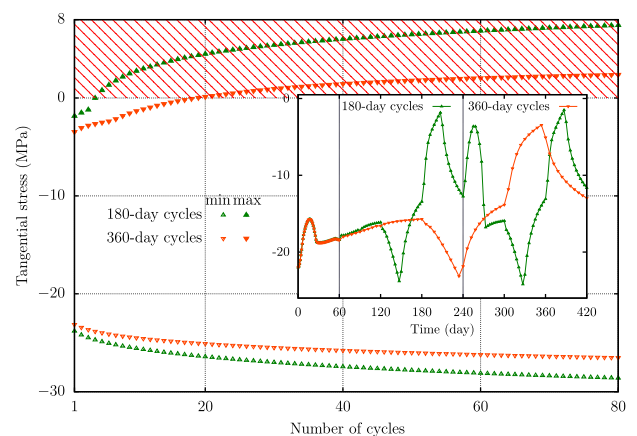


**Fig. 11.** Cavern temperature amplitude variation ratio as a function of the number of cycles.



**Fig. 12.** Evolution of the tangential stress at the cavern wall: minimum/maximum values within each cycle as a function of the number of cycles. The inset plot shows this evolution during the first 420 days.

temperature variations. However, this cannot be totally concluded without considering the mechanical cavern stability conditions which deal generally with the onset of tensile stress and salt dilation (see, e.g., <sup>15,66–69</sup>). Here, our analysis will be limited to the former aspect. Fig. 12 shows the tangential stress component on the cavern wall during the loading process. As can be seen, this stress becomes positive after only few cycles and tends, for CH<sub>4</sub> for example, approximately towards 8 MPa after 80 cycles. This situation is not admissible for rock salts unless assuming a tensile strength greater than 8 MPa which is physically not possible because these rocks are generally characterized by a small tensile strength (around 1 MPa). In order to remedy this problem, the loading conditions must therefore be changed. This can be accomplished by modifying either the amplitude or the cycling period, or both of them, of the cavern mass variation. Fig. 13 illustrates the case when only the cycling period is changed. As can be shown from this figure, which concerns only the CH<sub>4</sub> gas, when the cycling period is increased (by a factor of 2 in this case), the onset of the positive stress is time-shifted, thus allowing more admissible cycles, and the maximum value is significantly reduced (by about a factor of 3 in the present case).



**Fig. 13.** Evolution of the tangential stress at the cavern wall: minimum/maximum values within each cycle as a function of the number of cycles for two cyclic loading scenarios. The inset plot shows this evolution during the first 420 days. Stored fluid: CH<sub>4</sub>.

## 7. Concluding remarks

We formulated in this paper a thermodynamically consistent framework for underground salt cavern storage. This was accomplished by dividing the whole underground storage system to three subsystems: the cavern itself, the well that connects it to the ground surface and the formation that surrounds both of them. For each subsystem, the main governing equations are derived. The constitutive equations, either for the fluids filling the cavern, or for the solid formation are also discussed. The model capabilities are then partially highlighted through an illustrative example showing the effect of the cyclic loading conditions on the cavern mechanical stability.

The present work requires, however, several further investigations in order to complete the modeling approaches in each subsystem. The most immediate one is the development of a more accurate rheological law of rock salts that fits, with a single parameter set, not only the creep tests as currently observed in the technical literature, but also the short-term triaxial tests where dilatancy phenomena can be observed. The main objective here is to remedy inconsistencies between rheological laws and failure criteria used by the community of salt-rock experts to design salt caverns. This issue will be addressed in a forthcoming paper (Labaune et al.<sup>70</sup>).

Following the growth of renewable energy sources, various types of gases, as discussed in the introduction and through the illustrative example, may be used as working fluids in different underground salt cavern storage concepts. Among these gases are those which can significantly interact with the surrounding environment (diffusion through the cavern wall, mass exchange through the interface between the stored fluid and the brine...) and some of the associated problems may also require further theoretical and experimental investigations. These phenomena can be of great importance when the mass balances need to be accurately quantified in order to be able to capture leakages anomalies when predictions deviate abnormally from metered values.

## Acknowledgments

The authors would like to acknowledge Prof. Michel Tijani (MINES ParisTech) for his valuable contribution. We are also thankful to Dr. Faouzi Hadj-Hassen (MINES ParisTech) and Dr. Yvan Charnavel (Storengy) for their suggestions.



## References

1. Ter-Gazarian A. *Energy Storage for Power Systems*. Peter Peregrinus Ltd; 1994.
2. Cavallo A. Controllable and a affordable utility-scale electricity from intermittent wind resources and compressed air energy storage (CAES). *Energy*. 2007;32(2):120–127.
3. Succar S, Williams RH. In: *Compressed Air Energy Storage: Theory, Resources, and Applications for Wind Power, Tech. Rep.* Princeton Environmental Institute; 2008.
4. Kepplinger J, Crotagino F, Donadei S. Present trends in compressed air energy and hydrogen storage in Germany. In: *SMRI Fall 2011 Technical Conference*. 2011.
5. El Murr A. Etude du revêtement des cavités minées dans un stockage adiabatique d'air comprimé [Ph.D. thesis]. MINES ParisTech, France; 2015.
6. Nadau L, Leplay P, Fourmigué J-F, Mempoiteil A, Hadj Hassen F. A regenerator pilot to evaluate the technical and economic relevance of energy storage by adiabatic compressed air energy storage by ceramic media. In: *9th International Renewable Energy Storage Conference*. 2015.
7. ADEME. Etude portant sur l'hydrogène et la méthanation comme procédé de valorisation de l'électricité excédentaire 2014. <http://www.ademe.fr>.
8. Lehner M, Tichler R, Steinmüller H, Koppe M. Power-to-gas: technology and business models. Springer; 2014.
9. Götz M, Lefebvre J, Mörs F, Koch AM, Graf F, Bajohr S, Reimert R, Kolb T. Renewable power-to-gas: a technological and economic review. *Renew Energy*. 2016;85:1371–1390.
10. Bailera M, Lisbona P, Romeo LM. Power to gas-oxyfuel boiler hybrid systems. *Int J Hydrogen Energy*. 2015;40(32):10168–10175.
11. ANR, Stockage souterrain massif et réversible de vecteurs énergétiques fluides (O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>), Project No. ANR-15-CE06-0015 2015–2017. <http://www.agence-nationale-recherche.fr>.
12. Senseny PE, Hansen FD, Russell JE, Carter NL, Handin JW. Mechanical behaviour of rock salt: phenomenology and micromechanisms. *Int J Rock Mech Min Sci & Geomech Abstr*. 1992;29(4):363–378.
13. Munson DE. Constitutive model of creep in rock salt applied to underground room closure. *Int J Rock Mech Min Sci*. 1997;34(2):233–247.
14. Heusermann S, Rofls O, Schmidt U. Nonlinear finite-element analysis of solution mined storage caverns in rock salt using the Lubby2 constitutive model. *Computers and Structures*. 2003;81(8–11):629–638.
15. Tijani M. Contribution à l'étude thermomécanique des cavités réalisées par lessivage dans des formations géologiques salines, Habilitation à diriger des recherches, spécialité sciences de l'univers. Université Pierre et Marie Curie; 2008.
16. Aubertin M, Gill DE, Ladanyi B. A unified viscoplastic model for the inelastic flow of alkali halides. *Mech Mater*. 1991;11(1):63–82.
17. Cristescu ND. A general constitutive equation for transient and stationary creep of rock salt. *Int J Rock Mech Min Sci & Geomech Abstr*. 1993;30(2):125–140.
18. Kunz O, Wagner W. The GERG-2008 wide-range equation of state for natural gases and other mixtures: an expansion of GERG-2004. *J Chem Eng Data*. 2012;57(11):3032–3091.
19. Herrmann S, Kretzschmar H-J, Teske V, Vogel E, Ulbig P, Span R, Gatley DP. Properties of humid air for calculating power cycles. *J Eng Gas Turbines Power*. 2010;132(1):093001.
20. Deng JQ, Yang Q, Liu YR. Time-dependent behaviour and stability evaluation of gas storage caverns in salt rock based on deformation reinforcement theory. *Tunnelling and Underground Space Technology*. 2014;42:277–292.
21. Moghadam SN, Nazokkar K, Chalaturnyk RJ, Mirzabozorg H. Parametric assessment of salt cavern performance using a creep model describing dilatancy and failure. *Int J Rock Mech Min Sci*. 2015;79:250–267.
22. Wang T, Yang C, Ma H, Li Y, Shi X, Li J, Daemen JJK. Safety evaluation of salt cavern gas storage close to an old cavern. *Int J Rock Mech Min Sci & Geomech Abstr*. 2016;83:95–106.
23. Zhang QY, Duan K, Jiao YY, Xiang W. Physical model test and numerical simulation for the stability analysis of deep gas storage cavern group located in bedded rock salt formation. *Int J Rock Mech Min Sci*. 2017;94:43–54.
24. Nieland JD. Salt cavern thermodynamics – comparison between hydrogen, natural gas, and air storage. In: *SMRI Fall 2008 Technical Conference*. 2008.
25. Kushnir R, Dayan A, Ullmann A. Temperature and pressure variations within compressed air energy storage caverns. *Int J Heat Mass Transf*. 2012;55:5616–5630.
26. Raju M, Khaitan SK. Modeling and simulation of compressed air storage in caverns: a case study of the Huntorf plant. *Appl Energy*. 2012;89(1):474–481.
27. Tietze V, Stolten D. Comparison of hydrogen and methane storage by means of a thermodynamic analysis. *Int J Hydrogen Energy*. 2015;40(35):11530–11537.
28. Xia C, Zhou Y, Zhou S, Zhang P, Wang F. A simplified and unified analytical solution for temperature and pressure variations in compressed air energy storage cavern. *Renew Energy*. 2015;74:718–726.
29. Lestringant C, Bérest P, Brouard B. Thermo-mechanical effects in compressed air storage (CAES). In: *SMRI Fall 2010 Technical Conference*. 2010.
30. Serbin K, Śliżowski J, Urbańczyk K, Nagy S. The influence of thermodynamic effects on gas storage cavern convergence. *Int J Rock Mech Min Sci*. 2015;79:166–171.
31. Khaledi K, Mahmoudi E, Datcheva M, Schanz T. Analysis of compressed air storage caverns in rock salt considering thermo-mechanical cyclic loading. *Environ Earth Sci*. 2016;75(15).
32. Böttcher N, Görke U-J, Kolditz O, Nagel T. Thermo-mechanical investigation of salt caverns for short-term hydrogen storage. *Environ Earth Sci*. 2017;76(3).
33. Pernette E, Dussaud M. Underground storages at Tersanne and Etrez: prediction and simulation of cavity leaching in a salt layer charged with insoluble materials. In: *Sixth International Symposium on Salt, Toronto, Canada*. 1983.
34. Hugout B. Conception des modèles d'exploitation des cavités salines, Tech. Rep. M.D5-BH/BZ E 50423. Gaz de France; 1984.
35. Charnavel Y, Leca D, Poulain F. Advanced geometrical modelling of salt dissolution during cavern leaching – illustration with a case study. In: *SMRI Meeting, Las Vegas, Nevada, USA*. 1999.
36. Fer F. *Thermodynamique macroscopique, Tome I: systèmes fermés*. Gordon and Breach, Science Publishers Ltd; 1970.
37. Fer F. *Thermodynamique macroscopique, Tome II: systèmes ouverts*. Gordon and Breach, Science Publishers Ltd; 1971.
38. Truesdell C. *Rational Thermodynamics*. 2nd ed., Springer, New York; 1984.
39. Drew DA, Passman SL. *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer, New York; 1999.
40. Wilmanski K. *Continuum Thermodynamics. Part I: Foundations*. World Scientific Publishing Company; 2008.
41. Jakobsen HA. *Chemical Reactor Modeling. Multiphase Reactive Flows*. Springer, Berlin; 2008.
42. Slattery JC, Sagis L, Oh ES. *Interfacial Transport Phenomena*. 2nd ed., Springer, New York; 2007.
43. Miller CA, Neogi P. *Interfacial Phenomena Equilibrium and Dynamic Effects*. 2nd ed., Taylor & Francis, New York; 2008.
44. Ishii M, Hibiki T. *Thermo-fluid Dynamics of Two-phase Flow*. 2nd ed., Springer, New York; 2011.
45. Bérest P, Bergues J, Brouard B. Review of static and dynamic compressibility issues relating to deep underground salt caverns. *Int J Rock Mech Min Sci*. 1999;36:1031–1049.
46. Rouabhi A, Tijani M, Stab O, Charnavel Y, You T. A semi-analytical approach for modelling heat transfer during salt-cavern leaching process. *Int J Numer Anal Methods Geomech*. 2008;32:1617–1634.
47. Delhaye J-M. *Thermohydraulique des réacteurs nucléaires*. EDP Sciences, France; 2008.
48. Kakaç S, Yener Y. *Convective Heat Transfer*. 2nd ed., CRC Press, Florida; 1995.
49. Kaviany M. *Principles of Heat Transfer*. John Wiley & Sons, New York; 2002.
50. Munson DE, Dawson PR. Salt constitutive modeling using mechanism maps. In: *Proceedings of the 1st Conference on the Mechanical Behavior of Salt*. 1982.
51. Tijani M, Vouille G, Hugout B. Le sel gemme en tant que liquide visqueux. In: *Congrès International De Mécanique Des Roches, Melbourne*. 1983:241–246.
52. Roberts LA, Buchholz SA, Mellegard KD, Düsterloh U. Cyclic loading effects on the creep and dilation of salt rock. *Rock Mech Rock Eng*. 2015;48:2581–2590.
53. Bérest P. The mechanical behavior of salt and salt caverns. In: Kwasniewski M, Lydzba D, eds. *Rock Mechanics for Resources, Energy and Environment*. Taylor & Francis Group, London; 2013:17–29.
54. Green AE, Naghdi PM. A general theory of an elastic-plastic continuum. *Arch Rational Mech Anal*. 1965;18:251–281.
55. Lee EH. Elastic-plastic deformations at finite strains. *J Appl Mechanics, ASME*. 1969;36:1–6.
56. Mandel J. Équations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques. *Int J Solids and Structures*. 1973;9:725–740.
57. Casey J, Naghdi PM. Small deformations superposed on large deformations of an elastic-plastic material. *Int J Solids and Structures*. 1983;19(12):1115–1146.
58. Naghdi PM. A critical review of the state of finite plasticity. *J Appl Math Phys*. 1990;41:315–394.
59. Lubarda VA. Constitutive analysis of large elasto-plastic deformation based on the multiplicative decomposition of deformation gradient. *Int J Solids and Structures*. 1991;27:885–895.
60. Sidoroff F, Dogui A. Thermodynamics and duality in finite elastoplasticity. In: Maugin GA, Drouot R, Sidoroff F, eds. *Continuum Thermomechanics: The Art and Science of Modelling Material Behaviour*. Kluwer Academic Publishers; 2000:389–400.
61. Dafalias YF. Finite elastic-plastic deformations: beyond the plastic spin. *Theoret Appl Mech*. 2011;38(4):321–345.
62. Mandel J. Sur la définition de la vitesse de déformation élastique en grande transformation élastoplastique. *Int J Solids Structures*. 1983;19(7):573–578.
63. Truesdell C, Noll W. *The Non-Linear Field Theories of Mechanics*. 3rd ed., Stuart S. Antman; 1965.
64. Setzmann U, Wagner W. A new equation of state and tables of thermodynamic properties for methane covering the range from the melting line to 625 K at pressures up to 1000 MPa. *J Phys Chem Ref Data*. 1991;20(6):1061–1155.
65. Lemmon EW, Jacobsen RT, Penoncello SG, Friend DG. Thermodynamic properties of air and mixtures of Nitrogen, Argon and Oxygen from 60 to 2000 K at pressures to 2000 MPa. *J Phys Chem*. 2000;29:331–362.

66. Vouille G, Bergues J, Durup G, You T. Study of the stability of caverns in rock salt created by solution mining – proposal for a new design criterion. In: *ISRM International Symposium – EUROCK 93, Lisboa*. 1993.
67. Lux K-H, Dresen R. Design of salt caverns for high frequency cycling of storage gas. In: Bérest P, Ghoreychi M, Hadj Hassen F, Tijani M, eds. *Mechanical Behavior of Salt. Proceedings of the 7th Conference*. Taylor & Francis Group; 2012:371–380.
68. Brouard B, Bérest P, Djizanne H, Frangi A. Mechanical stability of a salt cavern submitted to high-frequency cycles. In: Bérest P, Ghoreychi M, Hadj Hassen F, Tijani M, eds. *Mechanical Behavior of Salt. Proceedings of the 7th Conference*. Taylor & Francis Group; 2012:381–389.
69. Brückner D, Minkley W, Lindert A. The improved IfG gas storage cavern design concept. In: Bérest P, Ghoreychi M, Hadj Hassen F, Tijani M, eds. *Mechanical Behavior of Salt. Proceedings of the 7th Conference*. Taylor & Francis Group; 2012:391–398.
70. Labaune P, Rouabhi A, Tijani M, Martin LB, You T. Dilatancy criteria for salt cavern design: a comparison between stress- and strain-based approaches. *Rock Mech Rock Eng*. 2017 [submitted].



Contents lists available at ScienceDirect

## International Journal of Heat and Mass Transfer

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/ijhmt](http://www.elsevier.com/locate/ijhmt)

# Modeling heat and mass transfer during ground freezing taking into account the salinity of the saturating fluid



A. Rouabhi\*, E. Jahangir, H. Tounsi

MINES ParisTech, PSL Research University, Centre de Géosciences, 35 rue St Honoré, 77300 Fontainebleau, France

## ARTICLE INFO

## Article history:

Received 25 September 2017

Received in revised form 11 December 2017

Accepted 14 December 2017

Available online 19 December 2017

## Keywords:

Artificial ground freezing

Heat and mass transfer

Phase change

Salinity

Freezing-thawing tests

Numerical modeling

## ABSTRACT

In geotechnical engineering applications, the modeling of artificial ground freezing is primarily aimed at predicting the extent of frozen zone around the cooling sources. This modeling could be more or less complex not only according to the material's texture and the hydro-geological context but also to the salt concentration of the saturating fluid.

Through a thermodynamically consistent framework, a fully coupled heat and mass transfer formulation considering the salinity effect was derived. This formulation was intended to capture the most relevant phenomena of ground freezing encountered in geotechnical applications. Particular attention was given to the phase change problem where appropriate simplifying assumptions were made in order to make the proposed methodology easier to apply in field applications. The proposed approach was validated by means of freezing-thawing laboratory tests, carried out on specimens initially fully saturated with sodium chloride solutions at various concentrations. Good agreement was obtained between the measured and predicted results.

© 2017 Elsevier Ltd. All rights reserved.

## 1. Introduction

The artificial ground freezing technique is used for waterproofing and strengthening soils and soft rocks by decreasing their permeability and increasing their mechanical properties [1]. In the recent years, its use in geotechnical applications has become increasingly popular, especially when the hydro-geological context is so complex that conventional civil and mining engineering methods are either too expensive and not cost-effective or environmentally unacceptable (see, e.g., [2–4]). However, this technique requires the control of the freezing process and the use of numerical tools to predict with accuracy and reliability the evolution of the frozen zones. If the effect of the salt concentration in the saturating fluid is ignored or not correctly modeled, those predictions can be seriously affected because the presence of salt causes the bulk liquid to freeze at lower temperature, depending on the salt concentration [5].

The effect of the salt concentration on the properties of the bulk liquid is not limited to the freezing point depression phenomenon. It also impacts all the thermodynamic properties of both the aqueous solution (density, heat capacity...) and the coexisting phases (latent heat, saturation concentration...). When coupled with the

thermal, fluid flow and mechanical effects, this requires combining knowledge from many engineering disciplines, including chemical and thermo-mechanical engineering.

In chemical engineering, a tremendous effort has been made to provide accurate and complete models for aqueous solutions; see for instance the work of Archer and Carter [6] who developed a wide-range equation of state for the sodium chloride solution on the basis of a model originally proposed by Pitzer et al. [7]. In thermo-mechanical engineering, frozen porous media approaches, both experimental and theoretical, have also been extensively developed. However, there has been little effort in the literature to investigate the effect of the saturating liquid salinity within a unified methodology that can easily integrate the knowledge of the different research communities. Besides, parallel efforts have led to independent developments with considerable inconsistencies in both terminology and methodology. Particularly, we can notice the existence of two research approaches: one modeling explicitly the propagation of the phase-change fronts and other one considering these fronts implicitly through the use of an empirical relationship giving the liquid saturation degree as a function of the porous thermodynamic state. The first approach, despite the fact that in some cases it takes into account the salinity effect (see, e.g., [8–10]), would be very difficult to apply in large scale ground freezing problems since a multitude of fronts can coexist and overlap. As for the second approach, commonly used by civil

\* Corresponding author.

E-mail address: [ahmed.rouabhi@mines-paristech.fr](mailto:ahmed.rouabhi@mines-paristech.fr) (A. Rouabhi).



**Nomenclature****Main symbols**

$\bar{v}_{w\alpha}$	partial specific volume of water in the phase $\alpha$ ( $\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ )
$\bar{g}_{w\alpha}$	partial specific free energy of water in the phase $\alpha$ ( $\text{J kg}^{-1}$ )
$\bar{h}_{w\alpha}$	partial specific enthalpy of water in the phase $\alpha$ ( $\text{J kg}^{-1}$ )
$\bar{s}_{w\alpha}$	partial specific entropy of water in the phase $\alpha$ ( $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ )
$\eta_\lambda$	dynamic viscosity of the phase $\lambda$ (Pa s)
$\dot{\pi}^i$	mass rate of ice formation ( $\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$ )
$\Lambda_\alpha$	thermal conductivity of the phase $\alpha$ ( $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ )
$\mu_{w\lambda}$	chemical potential of water in the phase $\lambda$ ( $= \bar{g}_{w\lambda}$ ) ( $\text{J kg}^{-1}$ )
$v_\alpha$	specific volume of the phase $\alpha$ ( $\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$ )
$\rho C$	volumetric heat capacity ( $\text{J m}^{-3} \text{K}^{-1}$ )
$\rho^\alpha$	apparent density of the phase $\alpha$ ( $\text{kg m}^{-3}$ )
$\rho_\alpha$	density of the phase $\alpha$ ( $\text{kg m}^{-3}$ )
$\underline{D}_\lambda$	diffusivity tensor associated to the diffusion of salt in the phase $\lambda$ ( $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ )
$\underline{K}_\lambda$	permeability tensor associated to the filtration of the phase $\lambda$ ( $\text{m}^2$ )
$\underline{\Lambda}$	thermal conductivity tensor ( $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ )
$\vec{v}_\alpha$	velocity of the phase $\alpha$ ( $\text{m s}^{-1}$ )
$\vec{\psi}$	conductive heat flux vector ( $\text{W m}^{-2}$ )
$\vec{J}$	diffusion velocity of salt ( $\text{m s}^{-1}$ )
$\vec{V}$	filtration velocity of the phase $\lambda$ ( $\text{m s}^{-1}$ )
$c$	salt concentration in the phase $\lambda$ ( $\text{kg kg}^{-1}$ )
$C_\alpha$	heat capacity at constant pressure of the phase $\alpha$ ( $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ )
$c_{\text{sat}}$	salt concentration at saturation ( $\text{kg kg}^{-1}$ )

$D_\lambda$	diffusivity coefficient of the salt in the phase $\lambda$ ( $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ )
$g_\alpha$	specific free energy of the phase $\alpha$ ( $\text{J kg}^{-1}$ )
$h_\alpha$	specific enthalpy of the phase $\alpha$ ( $\text{J kg}^{-1}$ )
$L_{\lambda\gamma}$	latent heat of phase change on the coexistence curve ( $\text{J kg}^{-1}$ )
$n$	porosity (-)
$n_\alpha$	volume fraction of the phase $\alpha$ (-)
$p_\alpha$	pressure of the phase $\alpha$ (Pa)
$p_{\lambda\gamma}$	coexistence pressure at the thermodynamic equilibrium between $\lambda$ and $\gamma$ (Pa)
$p_c$	capillary pressure (Pa)
$s_\alpha$	specific entropy of the phase $\alpha$ ( $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ )
$S_\lambda$	liquid saturation degree (-)
$T$	temperature (K)
$T_{\lambda\gamma}$	coexistence temperature at the thermodynamic equilibrium between $\lambda$ and $\gamma$ (K)

**Subscripts or superscripts  $\alpha$** 

$\gamma$	ice
$\lambda$	liquid
$\sigma$	solid skeleton

**Subscripts  $k$** 

$s$	salt
$w$	water

**Special symbols**

$\Delta\bar{\varphi}_w$	difference between water partial specific quantities ( $\bar{\varphi}_{w\gamma} - \bar{\varphi}_{w\lambda}$ )
-------------------------	---

engineers, soil scientists and hydrogeologists (for a detailed review of this approach, see, e.g., [11–13]), it is often applied to the case of pure water-saturated porous media without clearly specifying the methodology that might be used to explore the general case where the saturating fluid is not a pure liquid. Some models used by hydrogeologists to simulate climate change-induced permafrost thaw already include the salinity effect (see, e.g., [14,15]), however they are based on some simplifying assumptions which are incompatible with the degree of accuracy needed in geotechnical applications, such as constant thermodynamic properties and absence of capillary effects. Some other models developed recently have also attempted to include the salinity effect (see, e.g., [16]), but there is still a need for additional thermodynamic consistency, especially regarding phase change, and for further experimental validation.

The main objective of this paper is to present a modeling approach that deals adequately with the salinity effect and includes the major relevant issues within a thermodynamically consistent framework. The thermodynamics of phase change is directly derived from the liquid and ice Gibbs energies, and the simplifications required to produce the final model and what they involve are rigorously justified. The paper is divided into two parts: the modeling formalism (Section 2) which is based on a macroscopic continuum approach (in the sense of Coussy [17]) and the model validation (Section 3) through comparison with experimental data from laboratory tests, carried out on specimens initially fully saturated with sodium chloride solutions at various concentrations. Note that only the thermo-hydraulic problem coupled with the salinity effects is presented in the first part, and that the laboratory tests aim to validate mainly the salinity effects; the hydraulic aspects were already validated in a previous paper

[18] and the coupling with the mechanical issues will be addressed in a future work.

**Notation and nomenclature:** Throughout the paper, vectors are denoted by an arrow over the symbol, e.g.,  $\vec{a}$ . Second order tensors are denoted by two lines under the symbol, e.g.,  $\underline{a}$ . The divergence operator is denoted by  $\vec{\nabla}$ . and  $\vec{\nabla} a$  is the gradient of  $a$ . The material time derivative is denoted by a dot over the symbol, e.g.,  $\dot{a}$ . All introduced field variables are assumed to be functions of the position vector  $\vec{x}$  and time  $t$ . Furthermore, since we are studying a multiphase multicomponent problem, we will make use of subscripts and superscripts to designate quantities of interest. The Greek letters ( $\alpha, \beta, \dots$ ) are used to name the phases, with  $\alpha$  for a generic phase. The Latin lower case letters ( $j, k, \dots$ ) are used to name the components, with  $k$  for a generic component. The pair of letters  $k\alpha$  is used to designate the component  $k$  in the phase  $\alpha$ . A summary of the main symbols is given in the Nomenclature.

**2. Model development**

The theory of porous media is an efficient tool for investigating ground freezing processes. With the assumption of local thermal equilibrium (single temperature  $T$ ) and the concept of volume fractions, adopted in the literature by many authors such as Coussy [17], Nishimura et al. [19] and Vitel et al. [18], the resulting framework is obviously quite simple but is not irrelevant in practice and remains consistent with the level of approximation involved in large-scale geotechnical applications. The proposed model is based on such a framework. Thus, the ground subjected to freezing is modeled as a porous medium consisting of a solid skeleton  $\sigma$

encompassing inter-connected voids through which a liquid phase  $\lambda$ , a solution of water w and sodium chloride s, can circulate. Since our primary interest is with initially fully saturated porous media, no gaseous phase is considered in this work. Under freezing conditions, phase change gives rise to ice, a mono-component (pure water) solid phase that will be treated separately (phase  $\gamma$ ) since it exchanges matter with the liquid phase. It is assumed that ice follows the movement of the solid skeleton phase  $\sigma$  and behaves as a fluid phase characterized by a pressure and a temperature. This last assumption is motivated by the existence, at the pore scale, of an unfrozen liquid film that separates ice from skeleton particles [20,21] and ensures a hydrostatic stress state within the crystal.

With these considerations in mind, the macroscopic balance and constitutive equations are derived in Sections 2.1 and 2.2, respectively. To address the problem of phase change, a thermodynamically consistent framework is proposed in Section 2.3, and in order to obtain an easier formalism that can be used in engineering applications, some simplifications of the equations of state are proposed in Section 2.4.

### 2.1. Macroscopic balance equations

The macroscopic balance equations developed hereafter have been obtained by applying the volume averaging method to the pore scale balance equations, as can be found in [22,23]. This method introduces the volume fraction  $n_\alpha$  as the fraction of the REV (Representative Elementary Volume) space occupied by the phase  $\alpha$ :  $n_\alpha = \delta V_\alpha / \delta V$ . For a given quantity  $\varphi$ , its macroscopic apparent (average over the volume  $\delta V$ ) and intrinsic (average over the volume  $\delta V_\alpha$ ) values  $\varphi^\alpha$  and  $\varphi_\alpha$  are then macroscopically related by  $\varphi^\alpha = n_\alpha \varphi_\alpha$ . Note that the porosity  $n$  is given by  $n = \sum_{\alpha \neq \sigma} n_\alpha$  so that  $n_\sigma + n = 1$ .

#### 2.1.1. Balance of mass

The movement of each phase  $\alpha$  is characterized by its velocity  $\vec{v}_\alpha(\vec{x}, t)$  associated to the apparent density  $\rho^\alpha$ . Thus, the mass flow  $\rho^\alpha \vec{v}_\alpha \cdot \vec{n} \delta \mathcal{A}$  of the phase  $\alpha$ , through an elementary surface  $\delta \mathcal{A}$  of the porous medium oriented with a unit normal vector  $\vec{n}$ , is the sum of the flow  $\rho^\alpha \vec{v}_\sigma \cdot \vec{n} \delta \mathcal{A}$  resulting from the movement of the solid phase  $\sigma$  and the flow  $\rho^\alpha (\vec{v}_\alpha - \vec{v}_\sigma) \cdot \vec{n} \delta \mathcal{A}$  due to the relative movement of the phase  $\alpha$  with respect to the solid phase  $\sigma$ . This implies the following equality for any vector  $\vec{n}$ :  $n_\alpha \vec{v}_\alpha \cdot \vec{n} = n_\alpha \vec{v}_\sigma \cdot \vec{n} + \vec{V}^\alpha \cdot \vec{n}$ , where  $\vec{V}^\alpha$  is the filtration velocity of the phase  $\alpha$  through the porous medium:

$$\vec{V}^\alpha = n_\alpha (\vec{v}_\alpha - \vec{v}_\sigma) \quad (1)$$

Similarly, to describe the movement of each component k of the phase  $\alpha$ , the macroscopic velocity  $\vec{v}_{k\alpha}(\vec{x}, t)$  is introduced so that the mass flow  $\rho_k^\alpha \vec{v}_{k\alpha} \cdot \vec{n} \delta \mathcal{A}$  of the component k could be decomposed into a flow  $\rho_k^\alpha \vec{v}_\alpha \cdot \vec{n} \delta \mathcal{A}$  induced by the movement of the phase  $\alpha$  and a flow  $\rho_k^\alpha (\vec{v}_{k\alpha} - \vec{v}_\alpha) \cdot \vec{n} \delta \mathcal{A}$  resulting from the relative movement of the constituent k in respect of the phase  $\alpha$ , knowing that  $\rho_k^\alpha$  is the macroscopic apparent density of the component k. This implies the following equality for any vector  $\vec{n}$ :  $n_\alpha c_{k\alpha} \vec{v}_{k\alpha} \cdot \vec{n} = n_\alpha c_{k\alpha} \vec{v}_\alpha \cdot \vec{n} + \vec{J}_k^\alpha \cdot \vec{n}$ , where  $\vec{J}_k^\alpha$  is the diffusion velocity of the constituent k in the phase  $\alpha$ :

$$\vec{J}_k^\alpha = n_\alpha c_{k\alpha} (\vec{v}_{k\alpha} - \vec{v}_\alpha) \quad (2)$$

and  $c_{k\alpha} = \rho_k^\alpha / \rho^\alpha$  is the mass concentration of the component k in the phase  $\alpha$ .

Because the solid skeleton phase  $\sigma$  has a particular role in geomechanics since the ultimate goal is often to determine its deformation, the variation rate of every physical quantity  $\varphi(\vec{x}, t)$  attached to the porous medium will be described according to the macroscopic motion of the solid phase:  $\dot{\varphi} = \vec{\nabla} \varphi \cdot \vec{v}_\sigma + \partial \varphi / \partial t$ .

Furthermore, since the liquid phase  $\lambda$  contains only two components, water w and salt s, only one mass concentration and one diffusion velocity are required to set up the problem to be solved. This enables to simplify the notations by setting:  $\vec{V} = \vec{V}^\lambda$ ,  $\vec{J} = \vec{J}_s^\lambda$  and  $c = c_{s\lambda}$ .

With those notations and definitions in mind, if no chemical reaction takes place, the mass balance of the phases  $\lambda$  and  $\gamma$  can be written as follows:

$$\dot{\rho}^\lambda + \vec{\nabla} \cdot (\rho_\lambda \vec{V}) = -\hat{\pi}^\gamma \quad (3)$$

$$\dot{\rho}^\gamma = \hat{\pi}^\gamma \quad (4)$$

where  $\hat{\pi}^\gamma$  is the amount of mass provided to the phase  $\gamma$  by the phase change of the water w. By summing (3) and (4), the term  $\hat{\pi}^\gamma$  disappears, and the mass balance equation of the two phases  $\lambda$  and  $\gamma$  can be written as

$$\dot{\rho}^\lambda + \dot{\rho}^\gamma + \vec{\nabla} \cdot (\rho_\lambda \vec{V}) = 0 \quad (5)$$

Concerning the mass balance equation of the salt s, it can be written in terms of  $c$  as:

$$\rho^\lambda \dot{c} + \rho_\lambda \vec{V} \cdot \vec{\nabla} c + \vec{\nabla} \cdot (\rho_\lambda \vec{J}) = \hat{\pi}^\gamma c \quad (6)$$

The right hand side of this equation has the following physical interpretation: for a system with a homogeneous concentration ( $\vec{\nabla} c$  and  $\vec{J}$  are null fields), phase change induces the variation of salt concentration in the liquid phase (cryo-concentration). Indeed, it is easy to see that the increase of  $c$  is due to the phase  $\gamma$  mass creation:  $\rho^\lambda dc = c d\rho^\gamma$ .

#### 2.1.2. Balance of momentum

Only the mechanical equilibrium at the interface  $\lambda\gamma$  is studied here, knowing that, at the microscopic scale, contributions of the thermodynamic properties of the interfaces are usually ignored, except the one relative to the surface tension which relates the interfacial pressures. This relation is generally expressed by Laplace's equation that gives the interfacial pressure difference as a function of the surface tension and the interface mean curvature [24]. At the macroscopic scale, the key point, usually deduced from Laplace's equation, is only the existence of a relationship between the fluid bulk pressure difference and the other state variables, particularly, volumetric fractions  $n_\alpha$  or equivalently saturation degrees  $S_\alpha = n_\alpha / n$ . In our case, such relation can be formulated in terms of the liquid saturation degree  $S_\lambda$  as follows:

$$S_\lambda = S_\lambda(p_c, T) \quad (7)$$

where  $p_c$  is the capillary pressure defined as the difference between the pressure  $p_\gamma$  of the phase  $\gamma$  (non-wetting phase) and the pressure  $p_\lambda$  of the phase  $\lambda$  (wetting phase):  $p_c = p_\gamma - p_\lambda$ . For partially liquid-saturated regions where ice and liquid phases are present simultaneously,  $S_\lambda$  varies and  $p_c$  is nonzero;  $S_\lambda$  is assumed as unity for liquid-saturated regions. The function  $S_\lambda(p_c, T)$  is an empirical function which may be deduced from laboratory tests. By using a function  $S_\lambda$  and not an incremental law, we assume that the determination of  $S_\lambda$  is independent from the type of the tests (freezing or thawing tests). This hypothesis is similar to the one used for the modeling

of wetting-drying phenomenon in unsaturated porous media. This analogy between wetting-drying phenomenon and soil freezing phenomenon has been already investigated by number of researchers such as Koopmans and Miller [25], Spaans and Baker [26], and Watanabe and Flury [27].

It is noteworthy that experimental determination of  $S_i$  is not always evident, since it requires, in particular, advanced measurement techniques of liquid phase content (see, e.g., [28–30]). An alternative option would be to determine  $S_i$  as a solution of a back-analysis where the model response is calibrated against the results of laboratory testing (as is the case in the present work) and/or *in situ* measurements (as in the work of Vitel et al. [4]). It is also of interest to note that in saline-saturated porous media subjected to freezing, the cryo-concentration effect may cause the precipitation of salt crystals [31], which could influence the saturation degree  $S_i$ . This phenomenon, still a challenging problem due to the experimental difficulty to determine simultaneously the amount of ice and salt crystals, will not be considered in this work.

### 2.1.3. Balance of energy

By assuming the thermal equilibrium between phases ( $T_\sigma = T_i = T_\gamma = T$ ), the heat balance equation, which can be derived by considering balance equation of either the internal energy or the enthalpy, can be written in the following form:

$$\rho C \dot{T} + \rho_i C_i \vec{V} \cdot \vec{\nabla} T = -\vec{\nabla} \cdot \vec{\psi} - \hat{\pi}^\gamma \Delta \bar{h}_w \quad (8)$$

with

$$\rho C = \sum \rho^\alpha C_\alpha \quad (9)$$

where  $C_\alpha$  is the heat capacity at constant pressure (the summation is over all phases),  $\vec{\psi}$  is the conductive heat flux vector, and the quantity  $\Delta \bar{h}_w$  is none other than the latent heat of phase change which will be given in Section 2.3.

### 2.1.4. Summary of balance equations

The unknowns of the problem are scalar or vector functions of space and time ( $\vec{x}, t$ ). If the porosity  $n$ , the mass density  $\rho_\sigma$  and the thermal capacity  $C_\sigma$  of the solid skeleton are all known, the thermo-hydraulic problem to solve will have ten scalar unknowns:  $T, p_\lambda, p_\gamma, c, \rho_\lambda, \rho_\gamma, \Delta \bar{h}_w, C_\lambda, C_\gamma$  and  $\hat{\pi}^\gamma$ , and three vector unknowns:  $\vec{V}, \vec{J}$  and  $\vec{\psi}$ . We already have the following four equations:

$$\begin{cases} \dot{\rho}^\gamma = \hat{\pi}^\gamma \\ \dot{\rho}^\lambda + \dot{\rho}^\gamma + \vec{\nabla} \cdot (\rho_\lambda \vec{V}) = 0 \\ \rho^\lambda \dot{c} - c \dot{\rho}^\gamma + \rho_\lambda \vec{V} \cdot \vec{\nabla} c + \vec{\nabla} \cdot (\rho_\lambda \vec{J}) = 0 \\ \rho C \dot{T} + \Delta \bar{h}_w \dot{\rho}^\gamma + \rho_i C_i \vec{V} \cdot \vec{\nabla} T + \vec{\nabla} \cdot \vec{\psi} = 0 \end{cases} \quad (10)$$

with

$$\rho^\lambda = n \rho_i S_i, \quad \rho^\gamma = n \rho_\gamma (1 - S_i) \quad (11)$$

where  $S_i$  and  $\rho C$  are given by (7) and (9). Consequently, the system (10) has to be supplemented by nine constitutive equations: five thermodynamic equations of state linking  $\rho_\lambda, \rho_\gamma, \Delta \bar{h}_w, C_\lambda$  and  $C_\gamma$  to the thermodynamic state variables ( $T, p_\lambda, p_\gamma, c$ ), and four complementary equations that express the secondary unknowns  $\{\hat{\pi}^\gamma, \vec{\psi}, \vec{V}, \vec{J}\}$  as functions of the primary unknowns, chosen to be  $\{T, p_\lambda, c\}$ .

## 2.2. Constitutive equations

### 2.2.1. Equations of state

The mass density and the heat capacity of the solid phase  $\sigma$  are considered constants. As for the fluid phases, we shall assume, as generally done when dealing with macroscopic modeling approaches for multiphase porous media, that all relations between thermodynamic quantities, valid in terms of microscale variables, remain valid in terms of macroscale variables [32,33].

In order to build thermodynamically compatible relations, the best way of proceeding is to consider, for a given phase, its thermodynamic potential from which can be derived, by appropriate partial derivatives, all of the remaining state functions. With a thermodynamic state characterized by the independent variables ( $p_\alpha, T, c$ ), the thermodynamic potential is the Gibbs specific free energy  $g_\alpha$  (naturally,  $g_\gamma$  is independent of the concentration  $c$ ) and the remaining state functions may derive from it according, for example, to the following relations (see, e.g., [34,35]):

$$\begin{aligned} v_\alpha &= \frac{\partial g_\alpha}{\partial p_\alpha}, & C_\alpha &= -T \frac{\partial^2 g_\alpha}{\partial T^2} \\ s_\alpha &= -\frac{\partial g_\alpha}{\partial T}, & h_\alpha &= g_\alpha - T \frac{\partial g_\alpha}{\partial T} \end{aligned} \quad (12)$$

where  $v_\alpha = 1/\rho_\alpha, s_\alpha$  and  $h_\alpha$  are the specific volume, the specific entropy and the specific enthalpy of the phase  $\alpha$ , respectively. These equations show that the state functions are not independent; they need to obey thermodynamic compatibility conditions such as  $T \partial^2 v_\alpha / \partial T^2 + \partial C_\alpha / \partial p_\alpha = 0$ . Moreover, for a fixed concentration  $c$  and a given reference state ( $p_{0\alpha}, T_0$ ), the knowledge of the specific volume  $v_\alpha(p_\alpha, T, c)$  and the heat capacity  $C_{0\alpha}(T, c) = C_\alpha(p_{0\alpha}, T, c)$  for the pressure  $p_{0\alpha}$  allows the determination of  $g_\alpha(p_\alpha, T, c)$  as follows:

$$\begin{aligned} g_\alpha(p_\alpha, T, c) &= h_{0\alpha}(c) - s_{0\alpha}(c)T + \int_{p_{0\alpha}}^{p_\alpha} v_\alpha(x, T, c) dx \\ &+ \int_{T_0}^T \left(1 - \frac{T}{x}\right) C_{0\alpha}(x, c) dx \end{aligned} \quad (13)$$

Eq. (13), obtained by integrating the first two equations of (12), includes, in addition to the well-defined integral terms, the arbitrary functions  $h_{0\alpha}(c) = h_\alpha(p_{0\alpha}, T_0, c)$  and  $s_{0\alpha}(c) = s_\alpha(p_{0\alpha}, T_0, c)$  which must have no role in the problem as long as the two phases do not exchange matter. However, if the exchange of matter takes place (water mass exchange), these functions will play an important role since the interactions between the two phases  $\lambda$  and  $\gamma$  will be governed by the difference between their state functions. To handle these differences, the following notations will be adopted in what follows for every quantity  $\varphi_\alpha(p_\alpha, T, c)$ , knowing that  $\partial \varphi_\gamma / \partial c = 0$ :

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}_{w\alpha}(p_\alpha, T, c) &= \varphi_\alpha - c \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial c} \\ \Delta \bar{\varphi}_w(p_\lambda, p_\gamma, T, c) &= \bar{\varphi}_{w\gamma}(p_\gamma, T) - \bar{\varphi}_{w\lambda}(p_\lambda, T, c) \end{aligned} \quad (14)$$

In the case where  $p_\lambda = p_\gamma = p$ , for simplicity,  $\Delta \bar{\varphi}_w(p, T, c)$  will be used instead of  $\Delta \bar{\varphi}_w(p, p, T, c)$ . The quantity  $\bar{\varphi}_{k\alpha} = \partial(\mathcal{M}_\alpha \varphi_\alpha) / \partial \mathcal{M}_{k\alpha}$  represents a partial specific quantity, defined as the partial derivative with respect to the mass of the  $k$ -component, keeping the temperature, pressure, and the remaining masses fixed, of the associated global additive thermodynamic state function  $\mathcal{M}_\alpha \varphi_\alpha$ , where  $\mathcal{M}_\alpha$  is the mass of the phase  $\alpha$ . Notice that, in the particular case of  $\varphi_\alpha = g_\alpha, \bar{\varphi}_{k\alpha}$  is the chemical potential of the component  $k$  in the phase  $\alpha$ .

The operator which associates  $\bar{\varphi}_{w\alpha}$  to  $\varphi_\alpha$  is linear and commutes with the derivation and integration operators with respect to the variables  $p_\alpha$  and  $T$ . Thus, applying this operator to the terms of Eq. (13) leads to:

$$\begin{aligned} \bar{g}_{w\alpha}(p_\alpha, T, c) = & \bar{h}_{0w\alpha}(c) - \bar{s}_{0w\alpha}(c)T + \int_{p_{0\alpha}}^{p_\alpha} \bar{v}_{w\alpha}(x, T, c) dx \\ & + \int_{T_{0\alpha}}^T \left(1 - \frac{T}{x}\right) \bar{C}_{0w\alpha}(x, c) dx \end{aligned} \quad (15)$$

As the interactions between the two phases involve, on the one hand, the difference  $\Delta\bar{h}_w$ , as already introduced in the heat Eq. (8), and, on the other hand, the difference  $\Delta\bar{g}_w$ , as we shall show in the next section, it would consequently be necessary to determine the unknown functions  $\Delta\bar{h}_{0w}(c)$  and  $\Delta\bar{s}_{0w}(c)$ .

### 2.2.2. Complementary equations

In order to express the secondary unknowns  $\{\bar{\psi}; \bar{V}; \bar{J}\}$  as functions of the primary unknowns  $\{T; p_\lambda; c\}$ , we shall consider the generalized laws of Darcy, Fick and Fourier commonly used in porous media literature:

$$\bar{V} = -\frac{K_\lambda}{\eta_\lambda} (\nabla p_\lambda - \rho_\lambda \bar{g}), \quad \bar{J} = -\underline{D}_\lambda \nabla c, \quad \bar{\psi} = -\underline{\Delta} \nabla T \quad (16)$$

In the first expression,  $\underline{K}_\lambda$  is the intrinsic permeability tensor associated to the  $\lambda$ -phase filtration through the solid skeleton,  $\eta_\lambda$  is the dynamic viscosity and  $\bar{g}$  is the gravity acceleration vector. In the second expression,  $\underline{D}_\lambda$  is the diffusivity tensor associated to the relative motion of the salt (solute) with respect to the phase  $\lambda$  (solvent). In the last expression,  $\underline{\Delta}$  is the thermal conductivity tensor associated, unlike the motion of the salt and the phase  $\lambda$ , to the entire porous medium. The three tensors  $\underline{K}_\lambda$ ,  $\underline{D}_\lambda$  and  $\underline{\Delta}$ , generally symmetric and positive definite, may vary not only with temperature, pressure and concentration, but also with the saturation degree since frozen zones may be conceived as zones where the liquid phase flow is inhibited by the presence of pore ice.

Concerning the term  $\bar{\pi}^v$ , it may be ruled either by empirical laws that account for the mass exchange kinetics between the bulk phases  $\lambda$  and  $\gamma$  or by assuming the thermodynamic equilibrium between liquid and ice phases. The second option, widely used in the literature (see, e.g., [17,36,37]), is adopted in this paper. It requires the equality of the water chemical potentials, which leads to:

$$\Delta\bar{g}_w(p_\lambda, p_\gamma, T, c) = 0 \quad (17)$$

Thus, equality (17) provides us with a new relationship between the state variables  $(p_\lambda, p_\gamma, T, c)$ .

### 2.3. Thermodynamics of phase change

The liquid and ice phases can coexist regardless of their pressures  $p_\lambda$  and  $p_\gamma$ . When the interface between the two phases is large enough, the area of contact is flat and the pressures in the two phases are equal. However, for narrow interfaces, which is generally the case in soil pore space, surface tension effect becomes important and the interface mechanical equilibrium leads to a pressure difference across a curved surface.

First, in the absence of capillarity ( $p_\lambda = p_\gamma = p$ ), the equality of the water chemical potentials (17) enables to link the three variables  $(p, T, c)$  and thus limiting the thermodynamic state of the system to the knowledge of only two of them. In particular, if  $T$  and  $c$  are held constant, the pressure  $p$  becomes a known function of  $(T, c)$ :  $p = p_{\lambda\gamma}(T, c)$  and, if we denote by  $T = T_{\lambda\gamma}(p, c)$  its reciprocal function for a given concentration  $c$ , we thereby obtain the following conditions:

$$\begin{aligned} \forall(T, c) : \Delta\bar{g}_w(p_{\lambda\gamma}(T, c), T, c) &= 0 \\ \forall(p, c) : \Delta\bar{g}_w(p, T_{\lambda\gamma}(p, c), c) &= 0 \end{aligned} \quad (18)$$

The reference state being arbitrary, it can be chosen as an equilibrium state of the system, such as

$$p_{0\lambda} = p_{0\gamma} = p_0 \quad \text{and} \quad T_{0\lambda} = T_{0\gamma} = T_{\lambda\gamma}(p_0, c) = T_0(c) \quad (19)$$

Consequently, Eq. (15) becomes:

$$\begin{aligned} \bar{g}_{w\alpha}(p_\alpha, T, c) = & \bar{g}_{0w\alpha}(c) - (T - T_0(c))\bar{s}_{0w\alpha}(c) \\ & + \int_{p_0}^{p_\alpha} \bar{v}_{w\alpha}(x, T, c) dx \\ & + \int_{T_0(c)}^T \left(1 - \frac{T}{x}\right) \bar{C}_{0w\alpha}(x, c) dx \end{aligned} \quad (20)$$

Since the integration limits are independent of  $\alpha$ , chemical equilibrium conditions at the reference state ( $p = p_0$ ) and at the state such as  $p_\alpha = p_{\lambda\gamma}(T, c)$  lead to the following equality:

$$\begin{aligned} (T_0(c) - T)\Delta\bar{s}_{0w}(c) + \int_{p_0}^{p_{\lambda\gamma}(T, c)} \Delta\bar{v}_w(x, T, c) dx \\ + \int_{T_0(c)}^T \left(1 - \frac{T}{x}\right) \Delta\bar{C}_{0w}(x, c) dx = 0 \end{aligned} \quad (21)$$

which allows to express, in the most general form, the thermodynamic compatibility condition between the empirical functions  $v_\alpha, C_{0\alpha}$  and  $p_{\lambda\gamma}$ . According to this condition, the expression of  $\Delta\bar{s}_{0w}$  can therefore be obtained from the five functions  $v_\gamma(p_\gamma, T)$ ,  $C_{0\gamma}(T)$ ,  $v_\lambda(p_\lambda, T, c)$ ,  $C_{0\lambda}(T, c)$  and  $p_{\lambda\gamma}(T, c)$ , provided that it depends only on the concentration  $c$ .

In the presence of capillarity ( $p_\lambda \neq p_\gamma$ ), Eq. (20) can be rewritten as

$$\bar{g}_{w\alpha}(p_\alpha, T, c) = \bar{g}_{w\alpha}(p_{\lambda\gamma}(T, c), T, c) + \int_{p_{\lambda\gamma}(T, c)}^{p_\alpha} \bar{v}_{w\alpha}(x, T, c) dx \quad (22)$$

Then, for a given triplet  $(p_\lambda, T, c)$ , the chemical equilibrium conditions  $\Delta\bar{g}_w(p_{\lambda\gamma}(T, c), T, c) = 0$  and  $\Delta\bar{g}_w(p_\lambda, p_\gamma, T, c) = 0$  lead to a condition involving the pressure  $p_\gamma$ :

$$\forall(p_\lambda, T, c) : \int_{p_{\lambda\gamma}}^{p_\gamma} v_\gamma(x, T) dx = \int_{p_{\lambda\gamma}}^{p_\lambda} \bar{v}_{w\lambda}(x, T, c) dx \quad (23)$$

This equality provides the expression of the capillary pressure  $p_c = p_\gamma - p_\lambda$  as a function of  $(p_\lambda, T, c)$ . Indeed,  $v_\gamma$  is strictly positive, the function  $\vartheta(p_\gamma) = \int_{p_{\lambda\gamma}}^{p_\gamma} v_\gamma(x, T) dx$  is thereby strictly increasing, and thus invertible. Hence, it comes that

$$p_c(p_\lambda, T, c) = \vartheta^{-1} \left( \int_{p_{\lambda\gamma}}^{p_\lambda} \bar{v}_{w\lambda}(x, T, c) dx \right) - p_\lambda \quad (24)$$

Moreover, knowing that  $\Delta\bar{g}_w = 0$ , the latent heat of phase change  $\Delta\bar{h}_w$  in the energy Eq. (8) becomes  $\Delta\bar{h}_w = T\Delta\bar{s}_w$ . On the other hand, the derivative of Eq. (22) with respect to  $T$ , gives:

$$\bar{s}_{w\alpha}(p_\alpha, T, c) = \bar{s}_{w\alpha}(p_{\lambda\gamma}(T, c), T, c) - \int_{p_{\lambda\gamma}(T, c)}^{p_\alpha} \frac{\partial \bar{v}_{w\alpha}}{\partial T}(x, T, c) dx \quad (25)$$

Thus, we obtain

$$\begin{aligned} \Delta\bar{h}_w(p_\lambda, p_\gamma, T, c) = & L_{\lambda\gamma}(T, c) + \int_{p_{\lambda\gamma}(T, c)}^{p_\lambda} T \frac{\partial \bar{v}_{w\lambda}}{\partial T}(x, T, c) dx \\ & - \int_{p_{\lambda\gamma}(T, c)}^{p_\gamma} T \frac{\partial v_\gamma}{\partial T}(x, T) dx \end{aligned} \quad (26)$$

where  $L_{\lambda\gamma}(T, c) = \Delta\bar{h}_w(p_{\lambda\gamma}(T, c), T, c) = T\Delta\bar{s}_w(p_{\lambda\gamma}(T, c), T, c)$  is the latent heat of liquid  $\lambda$  to solid  $\gamma$  phase change for an equilibrium state such as  $p_\lambda = p_\gamma = p_{\lambda\gamma}(T, c)$ . The derivative of the equality



$\Delta \bar{g}_w(p_{\lambda\gamma}(T, c), T, c) = 0$  with respect to  $T$  leads to the generalized Clausius-Clapeyron equation:

$$L_{\lambda\gamma}(T, c) = T \Delta \bar{v}_w(p_{\lambda\gamma}, T, c) \frac{\partial p_{\lambda\gamma}}{\partial T} \quad (27)$$

2.4. Simplification of the equations of state

The equations formulated above are all what is required to the resolution of the fully coupled thermo-hydraulic problem. Unfortunately, the mathematical expressions of the thermodynamic potentials  $g_\alpha$  that best reproduce the real behavior of a fluid  $\alpha$  in a wide range of thermodynamic states can take complicated forms, making the numerical computations very time consuming. This is typically the case of water and aqueous solutions (see, e.g., [6,7,38,39]). In order to achieve an explicit analytic formalism that can be easily handled by numerical codes, it is therefore essential to adopt, while maintaining a certain thermodynamic consistency, some simplifying assumptions. This is what we shall develop in this subsection based on the Gibbs potential functions given, on the one hand, by Feistel and Wagner [39] for hexagonal ice (the most appropriate form of ice for geotechnical applications) and, on the other hand, by Archer and Carter [6] for aqueous sodium chloride solution. It should be noted that the thermodynamic consistency between these potentials is satisfied at the level of the thermodynamic potentials of water in the liquid and ice phases. Indeed, the Gibbs specific free energy  $g_\lambda$  can be written in the form

$$g_\lambda(p, T, c) = (1 - c)g_w(p, T) + cg_\infty(p, T) + \tilde{g}_\lambda(p, T, c) \quad (28)$$

where  $g_w$  and  $g_\infty$  are the Gibbs specific free energy functions of the liquid water and the aqueous solution at infinite dilution, respectively, and  $\tilde{g}_\lambda(p, T, c)$  is a fully known function. The chemical potential of water in the phase  $\lambda$  is  $\mu_{w\lambda} = \bar{g}_{w\lambda} = g_\lambda - c \partial g_\lambda / \partial c$ , hence

$$\mu_{w\lambda} = g_w + \tilde{g}_\lambda - c \frac{\partial \tilde{g}_\lambda}{\partial c} \quad (29)$$

Consequently, to ensure consistency between the thermodynamic potentials of the two phases, and therefore remove the indeterminacy caused by the arbitrary constants, it is sufficient that  $g_w$  and  $g_\gamma$  are compatible with each other. This was accomplished by using for liquid water the Gibbs potential function proposed by Wagner and Prub [38] which covers a validity range for temperatures from the melting curve to 1273 K and pressures up to 1000 MPa.

It is worth pointing out that, although the law for liquid water is calibrated only for temperatures above the melting curve, it is a common practice in thermodynamics to extrapolate such a law to temperatures below this curve [40]. The only restriction, required for the mechanical stability, is the positive sign of the isothermal compressibility coefficient. This extrapolation concerns only the liquid phase; the temperature of the solid phase is always below the melting curve. This means that the difference of pressures  $p_\gamma - p_\lambda$  is positive, which refers to the case where the ice in the pores of the porous medium is always surrounded by the unfrozen liquid film.

Let us start the simplification process. Fig. 1 shows, in the temperature-pressure diagram, the two-phase coexistence curves corresponding to  $p = p_{\lambda\gamma}(T, c)$  for different values of  $c$ , numerically obtained from the equality  $\Delta \bar{g}_w(p, T, c) = 0$ . These results show a nearly perfect linearity over a large pressure and temperature range. A first-order development with respect to temperature, near  $p_0$  for instance, can thus provide a sufficient approximation:

$$p_{\lambda\gamma}(T, c) = p_0 + p'_{\lambda\gamma}(c)(T - T_0(c)) \quad (30)$$

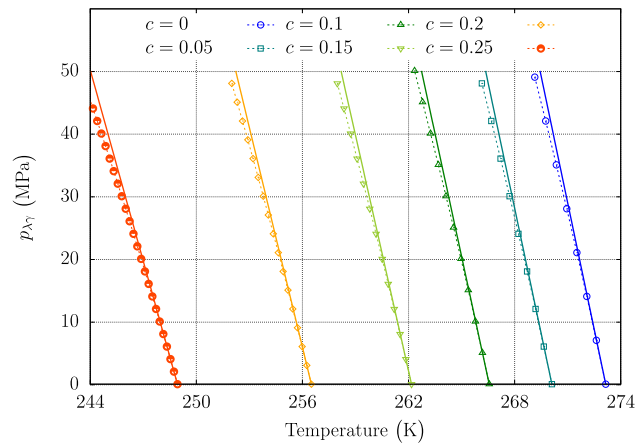


Fig. 1. Representative curves of the function  $p_{\lambda\gamma}(T, c)$  for six values of  $c$  and their linear approximations (solid lines).

with  $p'_{\lambda\gamma}(c) = (\partial p_{\lambda\gamma} / \partial T)(T_0(c), c)$ . As shown in Fig. 1, good agreement can be observed between those curves (dashed lines with symbols) and their linear approximation (30). In the same way, the two-phase coexistence curves corresponding to  $T_{\lambda\gamma}(p, c)$  can be obtained as

$$T_{\lambda\gamma}(p, c) = T_0(c) + \frac{p - p_0}{p'_{\lambda\gamma}(c)} \quad (31)$$

In order to take full advantage of these simplifications, let us now assume that the specific volumes  $v_\alpha$  do not depend on pressure  $p_\alpha$ . With this assumption, the equality (23) becomes:

$$p_\gamma - p_\lambda = \rho_\gamma(T) \Delta \bar{v}_w(T, c) (p_{\lambda\gamma}(T, c) - p_\lambda) \quad (32)$$

This equality is of particular interest since it expresses the capillary pressure  $p_c = p_\gamma - p_\lambda$  appearing in Eq. (7) in terms of only the pressure  $p_\lambda$  and the function  $p_{\lambda\gamma}(T, c)$  given by (30). Moreover, since  $p_{\lambda\gamma}(T, c) - p_\lambda$  can be rewritten as  $p_{\lambda\gamma}(T, c) - p_{\lambda\gamma}(T_{\lambda\gamma}(p_\lambda, c), c)$  and  $p_{\lambda\gamma}(T, c)$  is, for a given concentration  $c$ , linear with respect to temperature, it follows that

$$p_\gamma - p_\lambda = \rho_\gamma(T) \Delta \bar{v}_w(T, c) p'_{\lambda\gamma}(c) (T - T_{\lambda\gamma}(p_\lambda, c)) \quad (33)$$

On the other hand, the variation of  $T_{\lambda\gamma}$  with respect to  $p_\lambda$  can be neglected compared to the variations caused by  $c$ , as can be observed from Fig. 2 showing  $T_{\lambda\gamma}$  as a function of  $c$  for a range between 0 and 0.25 (nearly saturated solution), and for three

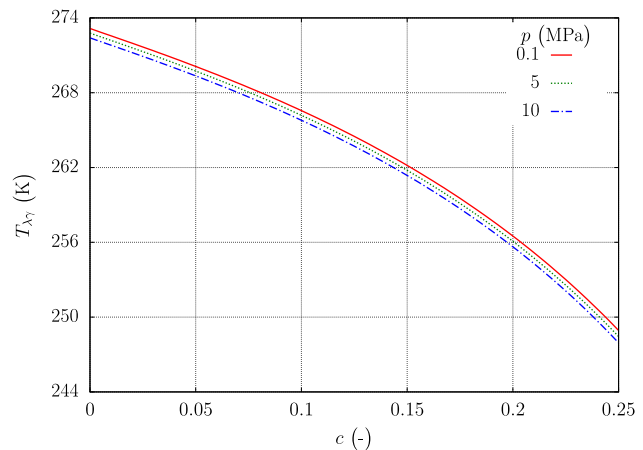


Fig. 2. Representative curves of the function  $T_{\lambda\gamma}(p, c)$  for three values of  $p$ .

values of  $p_\lambda$  in the pressure range of interest for geotechnical applications. The function  $T_{\lambda\gamma}(p_\lambda, c)$  can thus be replaced by  $T_0(c)$  in Eq. (33) which becomes:

$$p_\gamma - p_\lambda = \rho_\gamma(T) \Delta \bar{v}_w(T, c) p'_{\lambda\gamma}(c) (T - T_0(c)) \quad (34)$$

Following the same approach adopted to simplify  $p_{\lambda\gamma}$ , the explicit expression of  $L_{\lambda\gamma}(T, c)$  can also be obtained. Indeed, from Fig. 3, showing  $L_{\lambda\gamma}(T, c)$  as a function of temperature for different values of  $c$ , it can be deduced that a first-order approximation is again valid:

$$L_{\lambda\gamma}(T, c) = L_0(c) + L'_0(c)(T - T_0(c)) \quad (35)$$

with, according to (27),  $L_0(c) = T_0(c) \Delta \bar{v}_w(T_0(c), c) p'_{\lambda\gamma}(c)$  and  $L'_0(c) = (\partial L_{\lambda\gamma} / \partial T)(T_0(c), c)$ .

As shown in Fig. 3, the resulting approximations are in good agreement with the data obtained from the equality  $L_{\lambda\gamma}(T, c) = \Delta \bar{h}_w(p_{\lambda\gamma}(T, c), T, c)$ .

If we assume that the specific volumes are also independent of the temperature, thus  $v_\gamma$  is a constant and  $v_\lambda$  is a function of  $c$  only, then it follows from (34) and (26) that

$$p_\gamma - p_\lambda = \rho_\gamma L_0(c) \left( \frac{T}{T_0(c)} - 1 \right) \quad (36)$$

$$\Delta \bar{h}_w(p_\lambda, p_\gamma, T, c) = L_{\lambda\gamma}(T, c) = L_0(c) + L'_0(c)(T - T_0(c)) \quad (37)$$

where we have chosen  $v_\alpha$  corresponding to the reference state ( $p_0, T_0(c)$ ). The three functions  $L_0(c)$ ,  $L'_0(c)$  and  $T_0(c)$  due to the coexistence of  $\lambda$  and  $\gamma$  are given in Table 1, where we have also added the expressions of  $v_\alpha$  and  $C_\alpha$  as functions of  $c$  taken at the reference state ( $p_0, T_0(c)$ ) and the expression of the sodium chloride concentration at saturation  $c_{sat}(T)$  as a function of temperature. All these functions have been established by applying the least-square method to minimize the difference between the computed data deduced from the complete thermodynamic potentials given in the articles previously cited and their respective approximations.

### 2.5. Important note

To derive the simplified Eqs. (36) and (37), it appears finally that the main assumptions that have been made are, on the one hand, the linearisation with respect to  $T$  of the functions  $p_{\lambda\gamma}$  and  $L_{\lambda\gamma}$  and, on the other hand, the independence of the specific volumes  $v_\alpha$  with respect to  $p$  and  $T$ . Unlike the first assumption that acts only on the two Eqs. (36) and (37), the second one concerning the specific volumes  $v_\alpha$  affects also the formulation of the mass

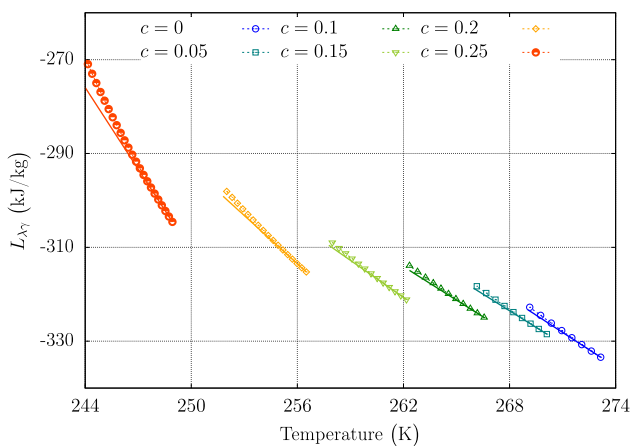


Fig. 3. Representative curves of the function  $L_{\lambda\gamma}(T, c)$  for six different values of  $c$  and their linear approximations (solid lines).

balance equations by removing the transient terms (pressure and temperature rate terms when expressing  $v_\alpha$  (or  $\rho_\alpha$ ) in system (10) as functions of  $p_\alpha, T_\alpha$  and  $c$ ) which cannot generally be neglected, depending on the porous media properties (permeability, thermal conductivity, ...) and on the applied loading rates. Consequently, a distinction could be made between the assumptions leading to the simplified Eqs. (36) and (37) and those adopted while establishing balance equations even if it is somewhat detrimental to the model's consistency. Indeed, the impact of these inconsistencies is minor and their presence could be tolerated since the two simplified equations are used only in empirical relationships: (36) is used in Eq. (7), whereas (37) is multiplied by the term  $\tilde{\pi}^i$  (see Eq. (8)) corresponding to the mass exchange between phases which kinetic is empirically defined.

## 3. Laboratory experiments and model validation

In order to validate the model under freeze-thaw conditions, an experimental program was carried out and the testing procedure was investigated numerically. A brief summary of the laboratory experiments is given in the next section, before presenting the numerical simulations and the comparison between experimental results and model predictions in Sections 3.2 and 3.3, respectively.

### 3.1. Laboratory experiments

A series of laboratory tests were conducted on porous limestone cylindrical specimens with a diameter of 50 mm and a height of 100 mm. For each specimen, the test consists of applying a freeze-thaw cycle in an environmental chamber and measuring the temperature at two points of the specimen: inside (point A) and at the surface of the specimen (point B). The temperature of the specimen at points A and B was measured continuously using two thermocouples with accuracy of  $\pm 0.1$  °C. Fig. 4(a) illustrates schematically the geometry of the specimen as well as the locations of the thermocouples. The environmental chamber, with internal dimensions of 54 cm  $\times$  54 cm  $\times$  62 cm, is capable of providing cooling and heating between  $-30$  °C and  $130$  °C, with a ramp rate of up to  $1$  °C per minute. Fig. 4(b) shows a photograph of the specimen inside the environmental chamber. Prior to testing, each specimen was saturated with an aqueous solution of sodium chloride with a specific concentration for seven days.

Two thermal loading paths were considered. In the first, the specimen was subjected to multi-stage temperature variations, whereas in the second one the temperature was applied by imposing fixed rates during the freezing and the thawing periods. A typical example of such loadings is illustrated in Fig. 4(c), showing the air temperature inside the environmental chamber. The first type of the temperature loading history, relatively complex, was used for specimens saturated with pure water, whereas the second was used for specimens saturated with aqueous solution. The use of different loadings allows us to test the capacity of the model to reproduce the measured data under various conditions.

### 3.2. Numerical simulations

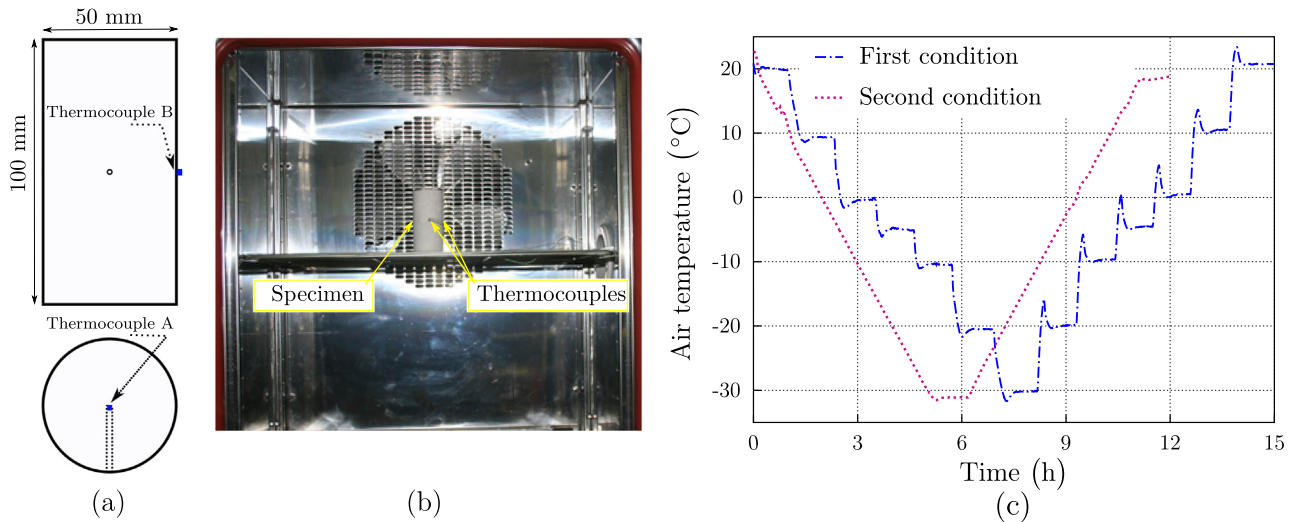
As will be shown in the illustrations of the next section, the measured temperatures at the surface and inside the specimen are rather different, especially during the period where the phase change occurs. The temperature distribution inside the specimen cannot therefore be considered homogeneous. Hence, to better interpret the experimental results, the tested specimen was analyzed as a structure subjected to boundary conditions.

Assuming the isotropy of the thermal conductivity tensor ( $\underline{\underline{\Lambda}} = \Lambda \underline{\underline{1}}$ ) and the diffusivity tensor ( $\underline{\underline{D}}_i = D_i \underline{\underline{1}}$ ), and neglecting

**Table 1**  
Simplified equations of state ( $p_0 = 0.1$  MPa).

$\varphi = \varphi^0(1 + \sum a_i c^{b_i})$	$\varphi^0$	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$b_1$	$b_2$	$b_3$
$v_\gamma$ (m <sup>3</sup> kg <sup>-1</sup> )	$1.090844 \times 10^{-3}$						
$C_\gamma$ (J kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	2096.71						
$v_\lambda$ (m <sup>3</sup> kg <sup>-1</sup> )	$1.000157 \times 10^{-3}$	-0.701	0.247		0.98	2.675	
$C_\lambda$ (J kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	4219.44	-3.224	3.356		1.082	1.379	
$T_0$ (K)	273.1526	-0.215	-1.312	-20.572	1	2.702	6.176
$L_0$ (J kg <sup>-1</sup> )	-333427	-0.420	-15.47	0.529	1	4.145	1.477
$L'_0$ (J kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	-2458.25	-0.4524	145.821	614412	0.79	3.56	10.17

$c_{sat}(T) = 0.2626 + 0.535 \times \theta^{1.888} - 0.479 \times \theta^2, \theta = T/T_0^0 - 1.$



**Fig. 4.** (a) Schematic illustration of the specimen geometry and the locations of the thermocouples. (b) Photograph of the specimen inside the environmental chamber. (c) Typical temperature variations of the air inside the environmental chamber.

the contribution of the velocities  $\vec{V}$  and  $\vec{v}_\sigma$ , the balance laws that govern the evolution of the temperature and the salt concentration fields in the specimen can then be expressed by the following system of equations:

$$\begin{cases} A_{11} \frac{\partial \theta}{\partial t} + A_{12} \frac{\partial c}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (\rho_\lambda D_\lambda \vec{\nabla} c) \\ A_{21} \frac{\partial \theta}{\partial t} + A_{22} \frac{\partial c}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (\Lambda \vec{\nabla} \theta) \end{cases} \quad (38)$$

with

$$\begin{aligned} A_{11} &= cA \frac{\partial p_c}{\partial \theta}, & A_{12} &= n\rho_\lambda S_\lambda + cA \frac{\partial p_c}{\partial c} \\ A_{21} &= \rho C - A\tilde{L}_{\lambda\gamma} \frac{\partial p_c}{\partial \theta}, & A_{22} &= -A\tilde{L}_{\lambda\gamma} \frac{\partial p_c}{\partial c} \end{aligned} \quad (39)$$

and

$$\begin{aligned} S_\lambda &= S_\lambda(p_c), & p_c(\theta, c) &= -\rho_\gamma L_0(c) \frac{(\theta_0(c) - \theta)}{1 + \theta_0(c)} \\ A &= n\rho_\gamma \frac{dS_\lambda}{dp_c}, & \tilde{L}_{\lambda\gamma}(\theta, c) &= \frac{L_0(c)}{T_0} + L'_0(\theta - \theta_0(c)) \\ \theta &= \frac{T}{T_0^0} - 1, & \theta_0(c) &= \frac{T_0(c)}{T_0^0} - 1 \end{aligned} \quad (40)$$

where the change of variable from  $T$  to  $\theta$  is operated in order to make the primary unknowns of the model (temperature and salt concentration) dimensionless and of the same order of magnitude, therefore leading to a better numerical conditioning. The system (38) is deduced from the initial system (10) by using the simplified equations (36) and (37) and assuming that the specific volumes are independent of pressure and temperature, that the porosity change

is negligible, and that the function  $S_\lambda$  is independent of temperature. The Macaulay brackets in the expression of  $p_c$ , defined for any real number  $x$  as  $\langle x \rangle = (x + |x|)/2$ , are used to ensure the positiveness of  $p_c$  which holds, since  $-\rho_\gamma L_0(c) > 0$ , for  $\theta \leq \theta_0(c)$ .

To complete the mathematical formulation of the problem, the system (38) is supplemented by the constraint on  $c$ :

$$c \leq c_{sat}(T) \quad (41)$$

which expresses the fact that the salt concentration must always remain less than the saturation value. Moreover, it must be completed by the appropriate initial and boundary conditions. The initial condition is stated by imposing the adequate temperature and concentration measured at the beginning of each test. Regarding the boundary conditions, the Newton's law of cooling is used for  $T$ :

$$\vec{\psi} \cdot \vec{n} = H(T - T_a) \quad (42)$$

where  $H$  is the convective heat transfer coefficient,  $T_a$  is the air temperature inside the environmental chamber and  $\vec{n}$  is the outward unit vector normal to the boundary of the specimen. For  $c$ , zero-flux boundary conditions are assumed.

The quantities needed in Eqs. (38)–(41) concerning the phases  $\lambda$  and  $\gamma$  are given in Table 1, whereas  $D_\lambda$ ,  $\Lambda$  and  $S_\lambda$  are determined as follows. The diffusivity coefficient  $D_\lambda$ , generally dependent on many factors (porous medium, type of solute-solvent, temperature...), is assumed constant. The thermal conductivity  $\Lambda$  is expressed by the geometric mean of the thermal conductivities of the phases [41]:

$$\Lambda = \Lambda_\sigma^{n_\sigma} \Lambda_\lambda^{n_\lambda} \Lambda_\gamma^{n_\gamma} = \Lambda_\sigma^{1-n} \Lambda_\lambda^{n S_\lambda} \Lambda_\gamma^{n(1-S_\lambda)} \quad (43)$$



As for the saturation degree  $S_s$ , it is given by the van Genuchten model [42]:

$$S_s(p_c) = \left(1 + \left(\frac{p_c}{P}\right)^{1/(1-m)}\right)^{-m} \quad (44)$$

where  $m$  and  $P$  are constant material parameters. It is worth noting that this function, used classically to model the drying-wetting mechanisms in unsaturated media, is also used in thermo-hydraulic modeling of freezing ground (as in [17,19,43,18], to cite only a few). In the present study, its use in ground freezing problems where the porous medium is initially saturated with an aqueous solution should be regarded as an empirical extrapolation which accuracy could be assessed only through experimental verification.

The material constants  $m$  and  $P$  were calibrated in a first step on the basis of results from the tests with pure water and multi-stage loading conditions. Table 2 gives the values of these constants, and also those of all the remaining constants as well as the value of the convective heat transfer coefficient  $H$ .

All numerical simulations were carried out using the software COMSOL and its nonlinear coefficient form PDE interface.

Since the simulated specimen and loads were symmetric with respect to the specimen axis, only a quarter of the specimen was simulated using a uniform mesh with approximately 1000 eight-node quadrilateral elements.

### 3.3. Comparison between experimental results and model predictions

To demonstrate the model capability to reproduce the major characteristics of the macroscopic behavior of the tested specimens, the results of four of the performed tests are presented in this section. They correspond to four distinct salt concentrations (0, 0.1, 0.17 and 0.25) and concern the temperature as a function of time of the two points A and B as considered in the experimental procedure (see Fig. 4(a)). In each case, the computed results (solid lines) are plotted together with the test results (circle points), and, for an easier interpretation, the air temperature inside the environmental chamber is also replotted (dashed lines) for reference.

Fig. 5 shows the temperature curves versus time in the case of pure water ( $c = 0$ ). As it can be observed, a good agreement between the experimental and numerical results is obtained, not only during the freezing period (negative temperature rate) but also during the thawing one (positive temperature rate). The plateau caused by the latent heat (around 0 °C) is relatively well reproduced by the model.

Figs. 6–8 show the temperature curves versus time for the concentration 0.1, 0.17 and 0.25, respectively. Many observations can be drawn from these results. First, when the initial concentration is lower than the saturation value (around 0.26), the experimental curves (Figs. 6 and 7) show two characteristic behaviors corresponding to a significant change in the temperature rate (slope of the curve): one around the freezing-melting point of the initial solution, and another, more pronounced, around the freezing-melting point of the saturated solution. These phenomena, associated to the phase change process, are not of the same nature. The former is common with the case of pure water as observed previously in Fig. 5, but with, on the one hand, a shift in the coexistence temperature related to the salt concentration of the initial solution and, on the other hand, a less

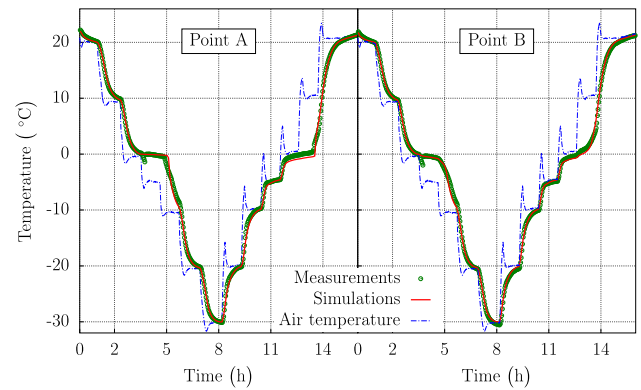


Fig. 5. Comparison between measured and predicted results:  $c = 0$ .

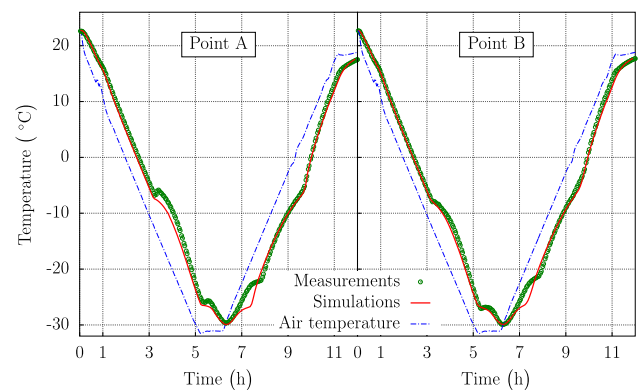


Fig. 6. Comparison between measured and predicted results:  $c = 0.1$ .

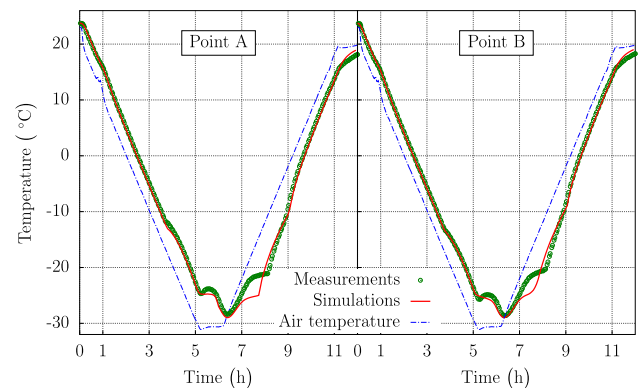


Fig. 7. Comparison between measured and predicted results:  $c = 0.17$ .

pronounced phase change plateau related to the evolution of the coexistence temperature with the salt concentration in the liquid phase. The latter is due to the threshold effect imposed by the salt dissolution process in which the salt concentration cannot exceed the saturation level. These observations seem to be consistent with the common understanding of the basic mechanism associated to the freezing of aqueous solutions: the continuous conversion of

Table 2

Constants used in the numerical simulations.

$\rho_\sigma$ (kg m <sup>-3</sup> )	$C_\sigma$ (J kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	$\Lambda_\sigma$ (W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	$D_\sigma$ (m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	$n$	$m$	$P$ (MPa)
2500	900	2	10 <sup>-14</sup>	0.18	0.6	0.3

$$\Lambda_i = 0.6 \text{ (W m}^{-1} \text{ K}^{-1}\text{)}, \Lambda_j = 2.3 \text{ (W m}^{-1} \text{ K}^{-1}\text{)}, H = 20 \text{ (W m}^{-2} \text{ K}^{-1}\text{)}.$$

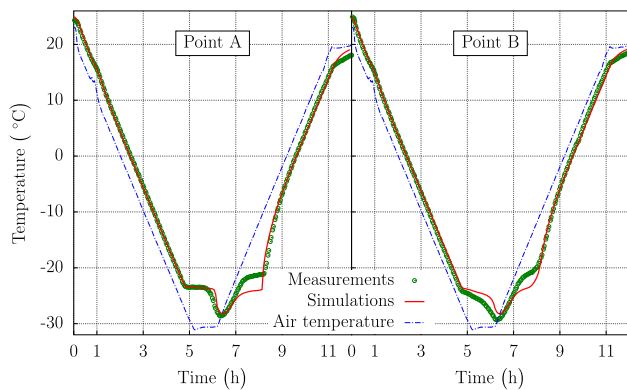


Fig. 8. Comparison between measured and predicted results:  $c = 0.25$ .

the pure liquid water into ice or vice versa is accompanied by a continuous change of the solute concentration in the remaining solvent phase, resulting in a continuous change of the coexistence temperature. Second, when the initial concentration is closer to the saturation value, only the characteristic behavior relative to the freezing-melting point of the saturated solution is observed (see Fig. 8). This confirms what we have previously described. Third, we can notice that the model is capable of simultaneously reproducing all the experimental data, especially during the freezing process. Except at the beginning of the thawing phase, where the unsymmetric behavior with respect to the freezing phase is slightly underestimated, the quality of the predicted results shows that the proposed model is a very promising approach to deal with the complex behavior of porous media saturated with aqueous solutions and subjected to freezing and thawing.

#### 4. Conclusions

In this work, we formulated a thermodynamically consistent framework for the ground freezing process, taking into account the salinity of the saturating fluid. This was accomplished through a macroscopic approach where the phase-change fronts are not modeled explicitly, but represented in terms of the liquid saturation degree which is assumed to be given by the same empirical function as in the case where the salinity of the saturating fluid is neglected. On the other hand, based on the thermodynamic equilibrium between liquid and ice phases, two relationships as explicit functions of both temperature and salt concentration were derived; namely the capillary pressure and the latent heat of phase change. The former relationship was involved in the empirical function expressing the liquid saturation degree, whereas the latter was directly used in the heat balance equation. The developed approach was then applied to the modeling of laboratory freezing-thawing tests and the model capabilities were evaluated through a comparison with the experimental results.

Although the ability of the model to capture the main relevant phenomena associated to the salinity effect is rather satisfactory, several further investigations are required to complete the proposed modeling approach and to increase the reliability in its predictive capacity. Two of the most important ones concern: (1) the validity of the relationship between the liquid saturation degree, temperature and salt concentration for different types of porous media, especially those with fine-textured materials, and (2) the coupling with the mechanical problem in order to extend this modeling to the ground deformations.

#### Conflict of interest

The authors declared that there is no conflict of interest.

#### References

- [1] O. Andersland, B. Ladanyi, *Frozen Ground Engineering*, Wiley, 2004.
- [2] E. Pimentel, S. Papakonstantinou, G. Anagnostou, Numerical interpretation of temperature distributions from three ground freezing applications in urban tunnelling, *Tunn. Undergr. Space Technol.* 28 (0) (2012) 57–69.
- [3] G. Russo, A. Corbo, F. Cavuoto, S. Autuori, Artificial Ground Freezing to excavate a tunnel in sandy soil. Measurements and back analysis, *Tunn. Undergr. Space Technol.* 50 (2015) 226–238.
- [4] M. Vitel, A. Rouabhi, M. Tijani, F. Guérin, Thermo-hydraulic modeling of artificial ground freezing: application to an underground mine in fractured sandstone, *Comput. Geotech.* 75 (2016) 80–92.
- [5] A. Banin, D.M. Anderson, Effects of salt concentration changes during freezing on the unfrozen water content of porous materials, *Water Resour. Res.* 10 (1) (1974) 124–128.
- [6] D.G. Archer, R.W. Carter, Thermodynamic properties of the NaCl+ H<sub>2</sub>O system. 4. Heat capacities of H<sub>2</sub>O and NaCl (aq) in cold-stable and supercooled states, *J. Phys. Chem. B* 104 (35) (2000) 8563–8584.
- [7] K.S. Pitzer, J.C. Peiper, R. Busey, Thermodynamic properties of aqueous sodium chloride solutions, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 13 (1) (1984) 1–102.
- [8] I. Kececioglu, B. Rubinsky, A continuum model for the propagation of discrete phase-change fronts in porous media in the presence of coupled heat flow, fluid flow and species transport processes, *Int. J. Heat Mass Transfer* 32 (6) (1989) 1111–1130.
- [9] V. Vasil'Ev, A. Maksimov, E. Petrov, G. Tsympkin, Mathematical model of the freezing-thawing of saline frozen soil, *J. Appl. Mech. Techn. Phys.* 36 (5) (1995) 689–696.
- [10] T. Lucas, J.-M. Chourot, P. Bohuon, D. Flick, Freezing of a porous medium in contact with a concentrated aqueous freezant: numerical modelling of coupled heat and mass transport, *Int. J. Heat Mass Transfer* 44 (11) (2001) 2093–2106.
- [11] Q. Li, S. Sun, Y. Xue, Analyses and development of a hierarchy of frozen soil models for cold region study, *J. Geophys. Res. D: Atmos.* 115 (3) (2010) 1–18.
- [12] Z. Liu, Y. Sun, X. Yu, Theoretical basis for modeling porous geomaterials under frost actions: a review, *Soil Sci. Soc. Am. J.* 76 (2) (2012) 313–330.
- [13] B.L. Kurylyk, K. Watanabe, The mathematical representation of freezing and thawing processes in variably-saturated, non-deformable soils, *Adv. Water Resour.* 60 (0) (2013) 160–177.
- [14] Y.I. Galushkin, K. Sitar, S. Frolov, Basin modelling of temperature and heat flow distributions and permafrost evolution, Urengoy and Kuyumbinskaya Areas, Siberia, *Permafrost Periglac. Process.* 24 (4) (2013) 268–285.
- [15] J. Frederick, B. Buffett, Taliks in relict submarine permafrost and methane hydrate deposits: pathways for gas escape under present and future conditions, *J. Geophys. Res.: Earth Surface* 119 (2) (2014) 106–122.
- [16] D. Wu, Y. Lai, M. Zhang, Thermo-hydro-salt-mechanical coupled model for saturated porous media based on crystallization kinetics, *Cold Reg. Sci. Technol.* 133 (2017) 94–107.
- [17] O. Coussy, Poromechanics of freezing materials, *J. Mech. Phys. Solids* 53 (8) (2005) 1689–1718.
- [18] M. Vitel, A. Rouabhi, M. Tijani, F. Guérin, Modeling heat and mass transfer during ground freezing subjected to high seepage velocities, *Comput. Geotech.* 73 (2016) 1–15.
- [19] S. Nishimura, A. Gens, S. Olivella, R. Jardine, THM-coupled finite element analysis of frozen soil: formulation and applications, *Geotechnique* 59 (3) (2009) 159–171.
- [20] G.W. Scherer, Crystallization in pores, *Cem. Concr. Res.* 29 (8) (1999) 1347–1358.
- [21] A.W. Rempel, J. Wettlaufer, M.G. Worster, Premelting dynamics in a continuum model of frost heave, *J. Fluid Mech.* 498 (2004) 227–244.
- [22] S.M. Hassanizadeh, W.G. Gray, Mechanics and thermodynamics of multiphase flow in porous media including interphase boundaries, *Adv. Water Resour.* 13 (4) (1990) 169–186.
- [23] S. Whitaker, *The Method of Volume Averaging, Theory and Applications of Transport in Porous Media*, Kluwer Academic, Dordrecht, 1999.
- [24] J.C. Slattery, L. Sagis, E.-S. Oh, *Interfacial Transport Phenomena*, Springer Science & Business Media, 2007.
- [25] R.W.R. Koopmans, R.D. Miller, Soil freezing and soil water characteristic curves, *Soil Sci. Soc. Am. Proc.* 30 (1966) 680–685.
- [26] E.J.A. Spaans, J.M. Baker, The soil freezing characteristic: its measurement and similarity to the soil moisture characteristic, *Soil Sci. Soc. Am. J.* 60 (1) (1996) 13–19.
- [27] K. Watanabe, M. Flury, Capillary bundle model of hydraulic conductivity for frozen soil, *Water Resour. Res.* 44 (12) (2008) W12402.
- [28] K. Watanabe, M. Mizoguchi, Amount of unfrozen water in frozen porous media, *Cold Regions Sci. Technol.* 34 (2002) 103–110.
- [29] A. Fabbri, T. Fen-Chong, A. Azouni, J.-F. Thimus, Investigation of water to ice phase change in porous media by ultrasonic and dielectric measurements, *J. Cold Regions Eng.* 23 (2) (2009) 69–90.
- [30] Y. Wu, S. Nakagawa, T.J. Kneafsey, B. Dafflon, S. Hubbard, Electrical and seismic response of saline permafrost soil during freeze-thaw transition, *J. Appl. Geophys.* 146 (2017) 16–26.
- [31] X. Wan, Y. Lai, C. Wang, Experimental study on the freezing temperatures of saline silty soils, *Permafrost Periglac. Process.* 26 (2) (2015) 175–187.
- [32] C. Marle, On macroscopic equations governing multiphase flow with diffusion and chemical reactions in porous media, *Int. J. Eng. Sci.* 20 (5) (1982) 643–662.

- [33] G.F. Pinder, W.G. Gray, *Essentials of Multiphase Flow in Porous Media*, John Wiley & Sons, 2008.
- [34] F. Fer, *Thermodynamique Macroscopique, Tome I: Systèmes fermés*, Gordon and Breach, 1970.
- [35] F. Fer, *Thermodynamique Macroscopique, Tome II: Systèmes ouverts*, Gordon and Breach, 1970.
- [36] T. Fen-Chong, A. Fabbri, M. Thiery, P. Dangla, Poroelastic analysis of partial freezing in cohesive porous materials, *J. Appl. Mech.* 80 (2) (2013) 020910.
- [37] M. Zhou, G. Meschke, A three-phase thermo-hydro-mechanical finite element model for freezing soils, *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.* 37 (18) (2013) 3173–3193.
- [38] W. Wagner, A. Prub, The IAPWS formulation 1995 for the thermodynamic properties of ordinary water substance for general and scientific use, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 31 (2) (2002) 387–535.
- [39] R. Feistel, W. Wagner, A new equation of state for H<sub>2</sub>O ice Ih, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 35 (2) (2006) 1021–1047.
- [40] V. Holten, J.V. Sengers, M.A. Anisimov, Equation of state for supercooled water at pressures up to 400 MPa, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 43 (4) (2014) 043101.
- [41] J. Côté, J.-M. Konrad, A generalized thermal conductivity model for soils and construction materials, *Can. Geotech. J.* 42 (2) (2005) 443–458.
- [42] M.T. van Genuchten, A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils, *Soil Sci. Soc. Am. J.* 44 (5) (1980) 892–898.
- [43] N. Boukpeti, J. Thimus, Freezing of fractured porous materials, in: *Current Practices in Cold Regions Engineering*, 2006, pp. 1–12.