



HAL
open science

Couplages dans les géomatériaux multiphasiques : effets de la température et de la chimie

Hasan Ghasemzadeh

► **To cite this version:**

Hasan Ghasemzadeh. Couplages dans les géomatériaux multiphasiques : effets de la température et de la chimie. Planète et Univers [physics]. Ecole des Ponts ParisTech, 2006. Français. NNT : 2006ENPC0611 . pastel-00002077

HAL Id: pastel-00002077

<https://pastel.hal.science/pastel-00002077>

Submitted on 3 Sep 2010

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.



THESE DE DOCTORAT

Spécialité : Géotechnique

présentée à

L'ECOLE NATIONALE DES PONTS ET CHAUSSEES

par

Hasan GHASEMZADEH

Sujet de la thèse

COUPLAGES DANS LES GEOMATERIAUX MULTIPHASIQUES
EFFETS DE LA TEMPERATURE ET DE LA CHIMIE

Centre d'Enseignement et de Recherche en Mécanique des Sols
(CERMES)

Soutenue le vendredi 5 mai 2006 devant le jury composé de :

M.	Isam SHAHROUR	Rapporteur
M.	Lyesse LALOUI	Rapporteur
Mme	Farimah MASROURI	Examinateur
M.	Pierre DELAGE	Examinateur
M.	Behrouz GATMIRI	Examinateur

A tous mes frères et sœurs en Iran

A ma tendre et chère femme Zéinab

A mes enfants Amin et Kiria

REMERCIEMENTS

Durant ma thèse, j'ai bénéficié d'une bourse de K.N. Toosi université de technologie que je remercie vivement.

Mes remerciements s'adressent tout d'abord au Monsieur Behrouz Gatmiri, qui m'a invité à préparer ce travail de doctorat au sein du CERMES. Ses idées et ses conseils ont été de grande valeur pour l'aboutissement de cette thèse. Je remercie particulièrement Professeur Pierre Delage, qui a suivi une grande partie du travail ; sa disponibilité et son soutien pendant les moments les plus difficiles ont été très précieux. Mes remerciements sont également adressés au Professeur Roger Frank, qui m'a aidé de venir étudier en France en tant que directeur du CERMES à l'époque.

Le Professeur Isam Shahrour à l'Université des Sciences et Technologies de Lille et Professeur Lyesse Laloui Chef de groupe Géomécanique Environnementale au laboratoire de mécanique des sols de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne qui m'ont honorés en acceptant la tâche d'être rapporteurs de ce travail. Je leurs en suis reconnaissant. Je remercie Professeur Farima Masrouri d'avoir accepté d'être également membre et président du jury.

Je remercie Weimin Ye, Yingfa Lu, Alain le Koubi, Khoa Van Nguyen, Grégoire Priol, Anh Minh Tang, Jean Paul Karam, Imen Saïd, Khaldoun Karraz et tous les membres du CERMES qui m'ont assuré une ambiance de travail particulièrement agréable.

Je n'ai pas des mots suffisants pour remercier mon épouse Zeinab Fargah, qui m'a encouragée à venir en France et m'a soutenu toutes ces années.

ABSTRACT

Transport of chemical components in soil through water is the major cause of pollution of the soil. This transport takes place around landfills and nuclear waste storage areas, tailings and mine wastes, and so on. A great number of these sites are unsaturated of water and in some cases heat can change the fate of chemical species, that lead us to a coupled problem. In this dissertation, numerical simulation with an existent thermo-hydro-mechanical model and theoretical modelisation and numerical simulation of transport and interactions of one chemical species in multiphase media are presented

Integrated THM model in the Code_Aster is presented. Excavation, engineering barrier and thermal load of waste nuclear storage well are modeled. Verification of model is presented with these simulations.

A thermo-hydro-mechanical behaviour coupled with chemical phenomena is presented with a fully coupled method that water, gas, chemical species and soil skeleton were considered as constituents and corresponding unknowns are temperature, water pressure, gas pressure, chemical concentration and displacements. For each constituent, mass balance equation and linear momentum equation are written and solved simultaneously to find related unknowns. The results of this model have been compared with the theoretical and experimental results existing in the literature. Furthermore, results of some applications of this model are included.

Some areas where further work is required are identified. In particular, there is a need to perform experiments to obtain necessary soil parameters to permit accurate modelling of the heat and contaminant transport in unsaturated soils.

Keywords: Unsaturated soil, coupling, thermo-hydro-mechanic, suction, finite element, pollution transport, osmotic efficiency, chemical consolidation, soil/solute interaction.

RESUME

Le transport des composants chimiques dans le sol par l'eau est une cause principale de la pollution du sol. Ce transport a lieu autour des remblais et de la zone de stockage du déchet nucléaire, des rejets et des pertes de mine, etc. Un grand nombre de ces sites est non saturé de l'eau et dans certains cas la chaleur peut changer le destin des espèces chimiques, qui nous mènent à un problème couplé dans le milieu multiphasique. Dans ce mémoire, les simulations numériques avec un modèle thermo-hydro-mécanique existant et les modélisations théoriques et les simulations numériques du transport et les interactions d'une espèce chimique dans les milieux multiphasiques sont présentées.

Les formulations THM intégrées dans le Code_Aster sont présentés. L'excavation, la mise en place de barrière ouvragée et le chargement thermique de puits de stockage des déchets nucléaires sont modélisés. La vérification du modèle est présentée à travers de ces simulations numériques.

Une modélisation théorique du comportement thermo-hydro-mécanique couplée aux phénomènes chimiques est ensuite présentée dans le cadre d'une approche entièrement couplée dans laquelle l'eau, le gaz, l'espèce chimique et le squelette de sol ont été considérés comme constituants ; les inconnues correspondantes sont la température, la pression de l'eau, la pression de gaz, la concentration chimique et les déplacements. Pour chaque constituant, l'équation de bilan de masse et la loi de comportement appropriée sont écrites et résolues simultanément. Les résultats de ce modèle ont été comparés à des résultats théoriques et expérimentaux existant dans la littérature. Les résultats de quelques applications du modèle sont également présentées.

Enfin, quelques perspectives de recherche sont proposées. En particulier, il y a un besoin d'effectuer des expériences pour obtenir les paramètres nécessaires du sol pour permettre de modéliser plus précisément le transport de la chaleur et du soluté dans les sols non saturés et déformables.

Mots-clés : Sol non saturé, couplage, thermo-hydro-mécanique, succion, éléments finis, transport de pollution, efficacité osmotique, consolidation chimique, interaction sol/soluté.

NOTATIONS

σ'	la contrainte effective
σ	la contrainte totale
ε	le tenseur des déformations
D	la matrice de rigidité
P_g	la pression de gaz
P_w	la pression d'eau
s	la succion ($s = P_g - P_w$)
E_L	le module d'élasticité d'Young en chargement
E_u	le module d'élasticité d'Young en déchargement
σ_1	la contrainte principale majeure
σ_3	la contrainte principale mineure
P_{atm}	la pression atmosphérique
T	la température
C	la concentration de soluté
C_s	la concentration de soluté adsorbé
χ	le coefficient de Bishop
θ	la teneur en eau
v	la vitesse de l'eau dans les pores
e	l'indice des vides
S_r	le degré de saturation
S_{ru}	le degré de saturation résiduelle
n	la porosité
U	la vitesse de l'eau
V_v	la vitesse de la vapeur
\mathbf{D}	le tenseur de dispersion hydrodynamique
D_m	le coefficient de diffusion moléculaire
D^*	le coefficient de diffusion moléculaire effective
D_{disp}	le coefficient de dispersion mécanique
τ	la tortuosité
K_b	la constante de Boltzmann
a_L	le coefficient de dispersion longitudinal
a_T	le coefficient de dispersion transversal
P_e	le nombre de Péclet
ρ_b	la densité apparente de l'aquifère.
K_d	le coefficient de distribution
erf	la fonction d'erreur
$erfc$	la fonction complémentaire d'erreur
δ_{ij}	le symbole de Kronecker ($\delta_{ij} = 1$ si $i=j$ et 0 sinon)

Ψ	le potentiel thermodynamique
Ψ_m	le potentiel matriciel
Ψ_o	le potentiel osmotique
ρ_w	la densité d'eau
ρ_v	la densité d'air
h	l'humidité relative
K_w	la perméabilité à l'eau
K_g	la perméabilité à l'air
h_{fg}	la chaleur latente
μ_w	la viscosité de l'eau
μ_g	la viscosité du gaz
λ	la conductivité thermique du milieu
λ_w	la conductivité thermique de l'eau
λ_v	la conductivité thermique de la vapeur
λ_a	la conductivité thermique de l'air
λ_c	la conductivité thermique du soluté
H	le coefficient de solubilité du gaz dans l'eau
C_T	la chaleur spécifique totale du milieu
C_{Pw}	la chaleur spécifique de l'eau
C_{Pv}	la chaleur spécifique de la vapeur
C_{Pg}	la chaleur spécifique du gaz
C_{Pc}	la chaleur spécifique du soluté
R	la constante universelle des gaz
P_{os}	la pression osmotique
ω	l'efficacité osmotique
ζ	le paramètre d'interaction chimio-mécanique

TABLE DES MATIERS

Remerciements	iii
Abstract.....	i
Résumé	iii
Notations.....	v
Table des matiers	vii
Chapitre Un: Introduction générale	1
Chapitre Deux: Elements Bibliographiques	3
2.1 Introduction	3
2.2 Comportement thermo-hydro-mécanique.....	4
2.3 Transfert de polluant en phase aqueuse	8
2.3.1 Différentes formes de la pollution	8
2.3.2 Les modèles géochimiques et transfert.....	11
2.3.3 Modèles empiriques et semi-empiriques	18
2.3.4 Résolution de l'équation de convection-dispersion	21
2.4 Paramètres influents sur le transfert couplé.....	23
2.4.1 Les travaux expérimentaux.....	24
2.4.2 Le couplage THMC	26
2.5 Conclusion	26
Chapitre Trois: Application de modèle THM.....	29
3.1 Introduction	29
3.2 Formulation thermo-hydro-mécanique.....	29
3.2.1 Equation d'équilibre	29
3.2.2 Loi de comportement.....	30
3.2.3 Conservation de la masse d'eau.....	35

3.2.4 Conservation de la masse d'air	43
3.2.5 L'équation d'équilibre de l'énergie	44
3.3 Application par le Code_Aster	45
3.3.1 Description générale d'une coupe horizontale du sol non saturé soumise à un chargement thermique	47
3.3.2 Résultats et Interprétation de modélisation 1	56
3.3.3 Résultats et Interprétation de la modélisation 2.....	68
3.4 Conclusion	89
Chapitre Quatre: Modélisation THCM.....	92
prise en compte des effets chimiques dans le comportement	92
4.1 Introduction	92
4.2 Constituant d'eau	92
4.2.1 Transfert de l'eau liquide.....	92
4.2.2 Conservation de la masse d'eau.....	98
4.3 Constituant gaz	99
4.4 Constituant chimique	100
4.4.1 Transfert d'un constituant chimique.....	101
4.4.2 Conservation du constituant chimique	102
4.5 Conservation de l'énergie	103
4.6 Equation d'équilibre.....	105
4.7 Loi de comportement.....	105
4.7.1 Surfaces d'état du modèle.....	106
4.8 Intégration numérique par la méthode des éléments finis.....	108
4.8.1 Système des équations THCM	109
4.8.2 Les conditions aux limites et initiales.....	110
4.8.3 Résolution des équations	113
4.8.4 Discrétisation dans l'espace.....	114
4.8.5 Discrétisation dans le temps	116
4.8.6 Méthode de résolution	117

4.8.7 Critère de convergence	118
4.8.8 Code de calcul	119
4.9 Conclusion	124
Chapitre Cinq: Validation et application numérique du code de calcul	126
5.1 Introduction	126
5.2 Couplage THM	127
5.2.1 L'échauffement d'une argile non saturée –Villar et al. (1993)	127
5.3 Transfert du soluté dans un milieu saturé.....	134
5.3.1 Diffusion pure de soluté dans un sol saturé.....	134
5.3.2 Convection de soluté dans le sol saturé.....	137
5.3.3 Diffusion-convection de soluté dans le sol saturé	140
5.4 Transfert du soluté dans un milieu non saturé	141
5.4.1 La dispersion du soluté dans les billes de verre non saturé	141
5.4.2 Transfert de soluté et interaction sol/soluté dans le sol non saturé	148
5.4.3 Sorption/désorption du soluté dans un sol non saturé	151
5.5 Applications du code de calcul	158
5.5.1 Transfert des solutés dans le sol non saturé.....	158
5.5.2 Transfert d'un soluté dans un sol non saturé avec différentes efficacités osmotiques	161
5.5.3 Concentration chimique et déplacement mécanique dans un milieu non saturé ...	167
5.5.4 Transfert thermo-hydro-chimio-mécanique dans un milieu non saturé déformable	171
5.6 Conclusion	179
Chapitre Six: Conclusions et perspectives.....	181
Chapitre Sept: Références bibliographiques.....	183
Annexe A : Formulation théorique	i
Annexe B : Forme matricielle.....	viii
Annexe C : Mode d'emploi du code "θ-STOCK"	xiii
Annexe D: Lexique	xxvii

CHAPITRE UN: INTRODUCTION GENERALE

La gestion du transport de polluants dans les sols est un enjeu majeur pour la préservation de l'environnement et la durabilité des structures. Les polluants proviennent de l'infiltration d'eaux usées, de déchets enterrés, de fuites provenant d'activités humaines et industrielles, d'actions accidentelles et ils interagissent de manière importante avec les sols. Ces transports de polluants peuvent être accompagnés d'une variation de température due aux conditions climatiques ou au dégagement de chaleur provenant de déchets. L'action combinée de la chaleur, du polluant, de l'eau et leurs transports respectifs dans le sol conduisent à introduire des modèles thermo-hydro-chimio-mécanique (THCM) couplés pour les géomatériaux multiphasiques.

L'augmentation de l'exploitation de pétrole avec injection de vapeur, le transport de polluant dans les sols, le traitement des sols pollués par biodégradation, la corrosion des conteneurs de déchets nucléaires enterrés sont quelques exemples où intervient le comportement THCM des géomatériaux multiphasiques.

Le deuxième chapitre de ce mémoire présente une synthèse sur des équations et des modèles THCM des sols en insistant sur l'aspect chimique et ses interactions avec le sol. Tout d'abord, on présente une revue des études concernant la modélisation du comportement THM existant dans la littérature. On présentera les transferts de polluant dans la phase aqueuse et dans les phases séparées et aussi les phénomènes chimio-mécanique qui peuvent être couplés avec le transport de contaminant.

Le chapitre trois est consacré à la description du modèle THM des milieux multiphasiques développés au CERMES et intégrée dans le Code_Aster. Tout d'abord, les équations de THM seront présentées. Après avoir présenté l'équation d'équilibre, les lois constitutives linéaires et non linéaires (basées sur la loi hyperbolique de Kondner et Duncan) seront présentées. Ensuite on présentera la conservation de la masse d'eau et d'air et la conservation d'énergie. Enfin, les vérifications et les applications de ce module seront

présentées par des simulations axisymétriques d'une tranche bi-matériau du sol représentant la barrière ouvragée et la barrière géologique soumis à la charge thermique dégagé par les déchets nucléaires.

Le chapitre quatre porte sur les équations THCM dans les milieux poreux non saturés. Après avoir présenté le transfert d'eau sous l'effet de pression osmotique, on présentera la conservation de la masse d'eau ainsi que le transfert d'air et la conservation de la masse d'air. Et puis le transfert du soluté dissous, ses interactions avec le sol et la conservation de la masse du soluté seront abordés. Les équations de mouvement de chaleur et de conservation de l'énergie seront présentées avec également l'équation d'équilibre et la loi de comportement. Le comportement mécanique du sol non saturé dépendra des variations de la succion, de la température et de la concentration. Les surfaces d'états de l'indice des vides et du degré de saturation dépendant de la concentration chimique seront introduites.

Une fois établi, le système d'équations différentielles qui décrit le comportement non saturé non isotherme des sols en présence de transfert de soluté, on présentera le traitement numérique permettant de résoudre le système par la méthode des éléments finis. Enfin on présentera la structure du code de calcul aux éléments finis θ -STOCK en approfondissant la description des modules développés pendant ce travail.

Le chapitre cinq est dédié à la vérification et aux applications du module THCM du code de calcul θ -STOCK à travers des différents exemples analytiques, expérimentaux et numériques. Les exemples portent sur le transfert d'élément chimique dans les sols saturés et non saturés et ses interactions avec les sols. Les exemples et les applications montrent les effets de couplage entre les différentes composantes thermiques, hydriques, mécaniques et chimiques.

Dans le sixième chapitre, les conclusions de l'étude ainsi que les perspectives possibles pouvant orienter des recherches futures sont présentées.

CHAPITRE DEUX: ELEMENTS BIBLIOGRAPHIQUES

2.1 Introduction

L'étude du transport des polluants dans les sols a connu un grand essor lors de la dernière décennie. L'origine et la source de polluants sont très variées, d'origine accidentelle ou déversé volontairement, nous pouvons citer non exhaustivement : pollution par les résidus miniers, les pollutions issues des industries métallurgiques, les pollutions dites diffuses d'industries de pulpe et de papier, des installations de raffinage de pétrole, des industries de peinture, l'application de pesticides, les engrais inorganiques, une autre source correspond au stockage de déchets (urbains ou industriels) mal confinés. Ces pollutions affectent les sols, l'eau souterraine et l'air dans le cas de polluants volatils.

Le transport des polluants est soumis à des forces d'origines chimiques et hydriques. Dans certains cas, il peut être affecté par des actions thermiques et mécaniques. Inversement, il a des effets sur le transfert de l'eau, de la chaleur et sur la déformation des sols. Afin de modéliser ces phénomènes couplés, on commence par une brève bibliographie des problèmes thermo-hydro-mécanique. Le transfert des polluants sera ensuite, considéré en complément de l'approche THM.

Le paragraphe 2.2 présente une synthèse de la modélisation des transferts d'eau et de la chaleur dans les sols déformables. Le paragraphe 2.3 est consacré aux transferts de polluant dans la phase aqueuse et à la modélisation des phénomènes géochimiques qui peuvent être couplés avec le transport de contaminant. Les paramètres influants sur le transfert des espèces chimiques et les effets des espèces chimiques sur le sol seront présentés dans le paragraphe 2.4. On décrit brièvement dans cette partie un important mécanisme chimio-mécanique couplé existant dans les argiles sensibles au changement d'état chimique.

2.2 Comportement thermo-hydro-mécanique

L'étude du comportement thermo-hydro-mécanique des milieux poreux s'est développée considérablement ces dernières années du fait de l'importance des problèmes liés à la conception de certains ouvrages tels que les galeries de stockage souterrain des déchets (nucléaires, urbaines et industriels) et l'exploitation pétrolière. Les méthodes numériques donnent la possibilité de traitement complètement couplé des problèmes thermo-hydro-mécaniques. Dans une première approche, de nombreuses études ont été faites en découplant le problème et en envisageant deux des trois mécanismes: hydro-mécanique, hydro-thermique ou bien thermo-mécanique.

Les travaux de Terzaghi (1925) concernant le comportement mécanique d'un milieu poreux en étudiant la consolidation unidimensionnelle d'un sol, constituent la base des recherches en hydro-mécanique. Biot (1941, 1956) généralise la théorie de consolidation de Terzaghi en faisant une analyse tridimensionnelle de la consolidation d'un milieu poreux dans le cadre d'élasticité linéaire.

Dans les années 70, les modèles THM se sont développés plus particulièrement avec les problèmes reliés à la production d'énergie dans les réservoirs géothermiques. Schiffman (1971) fait partie des premiers auteurs qui a pris en compte une variation de température dans les relations hydro-mécaniques. Il a ajouté le transport de chaleur par conduction dans les équations de Biot en considérant la dilatation thermique des grains. Aboustit et al. (1982) ont appliqué le principe variationnel sur leur système d'équation thermo-hydro-mécanique. La théorie de la consolidation thermo-élastique quasi-statique infinitésimale qu'ils ont utilisée est basée sur la théorie des mélanges. Dans ces travaux la dilatation thermique du fluide ainsi que le phénomène de convection ne sont pas pris en compte. Une résolution numérique pour les déformations thermiques d'un milieu poreux soumis à des flux de chaleur constant au cours du temps dans le cadre de l'élastoplastique a été présentée par Lewis et al. (1986). Ils ont pris en compte l'ensemble des couplages entre les comportements mécanique, hydraulique et thermique ainsi que les effets convectifs dans le milieu. Les équations de comportement thermo-élastoplastique avec une surface de charge thermique et une loi d'écoulement non associée sont présentées par Hueckel et Peano (1987) et Hueckel et Borsetto (1990). Ces études ont été effectuées pour des sols saturés d'eau (milieux biphasiques).

En ce qui concerne les milieux multiphasiques, différents travaux ont été effectués pour développer la notion de contrainte effective dans les sols non saturés dans les années 50

(Bishop, 1959 ; Aitchison, 1961). Bishop (1959) a présenté la contrainte effective comme une fonction linéaire de la succion :

$$\sigma' = (\sigma - P_g) + \chi(P_g - P_w) \quad \text{Eq. 2-1}$$

où σ' et σ sont la contrainte effective et la contrainte totale, respectivement. P_g et P_w sont la pression de gaz et la pression d'eau et $P_g - P_w$ est la succion. χ est un paramètre entre 0 et 1 qui est nul pour les sols secs et égal à 1 pour les sols saturés.

L'approche en contrainte effective dans les sols non saturés facilite le passage entre l'état non saturé et l'état saturé, l'implantation des modèles dans les codes aux éléments finis (Schrefler et al., 1990), une modélisation satisfaisante des problèmes où le cisaillement est dominant (Charlier et Radu, 1997). Cependant, il y a des inconvénients : le coefficient de Bishop (χ) est une fonction complexe qui dépend du degré de saturation, de l'indice des vides et des chemins de sollicitation (Jennings et Burland, 1962) et il semble varier en fonction de la succion (Bishop et Blight, 1963) ; la détermination expérimentale de (χ) est difficile ; le comportement volumique et l'effondrement en remouillage des sols non saturés ne peuvent pas être modéliser correctement (Jennings et Burland, 1962). Ces arguments montrent qu'il est difficile, de modéliser les sols non saturés avec une approche en contrainte effective.

Dans le prolongement des approches de Coleman (1962) et Matyas et Radhakrishna (1968), Fredlund et Morgenstern (1977) ont considéré deux tenseurs de contrainte indépendants ($(\sigma - P_g$ et $P_g - P_w)$ ou $(\sigma - P_w$ et $P_g - P_w)$ ou $(\sigma - P_g$ et $\sigma - P_w)$) pour considérer le comportement des sols non saturés. Cette approche est une approche alternative à celle de la contrainte effective. On note que l'approche des variables indépendantes a été adoptée par la majorité des auteurs (Alonso et al., 1990 ; Wheeler et Sivakumar, 1992, 1995 ; Cui et Delage, 1996 ; Geiser, 1998).

Matyas et Radhakrishna (1968) ont expérimentalement mis en évidence la validité de la surface d'état de l'indice des vides et du degré de saturation pour les variations monotones de contrainte et de succion. Cette notion a été surtout employée dans la modélisation des écoulement et des déformations des barrages en terre à différentes étapes de leur construction, leur mise en eau, etc...(Alonso et al., 1988 ; Gatmiri, 1992 ; Gens et al., 1997). Différents auteurs ont élargi cette notion aux conditions non isothermes en introduisant la température du milieu comme une autre variable du problème dans l'expression mathématique des surfaces d'état (Thomas et King, 1992 ; Thomas et He, 1997 ; Gatmiri, 1997 ; Gatmiri et Jenab, 1998).

L'étude sur le couplage dans les milieux poreux multiphasiques et non isothermes a été initialement développée dans les milieux rigides, les phases étant le liquide et le gaz. Rollins et al. (1954) ont présenté un modèle en supposant que les transferts se produisaient uniquement dans la vapeur d'eau. Philip et de Vries (1957) ont présenté leur modèle avec des transferts sous les gradients de température et d'humidité dans les phases liquide et vapeur. En 1958 de Vries a élaboré le modèle en adoptant une approche mécanique basée sur l'interaction du liquide, de la vapeur d'eau et de la structure poreuse au niveau microscopique, toujours pour un sol indéformable.

La plupart des travaux THM couplés dans les milieux non saturés sont basés sur ceux de Philip et de Vries. Luikov (1966) a de son côté développé des théories alternatives à celle de Philip et de Vries (1957) qui consiste à remplacer la teneur en eau volumique dans la formulation de Philip et de Vries par le potentiel capillaire. Sophocleous (1979), Milly (1982) et Pollock (1986) ont étendu la théorie de Philip et de Vries (1957) en utilisant la pression capillaire ou succion dans le milieu non saturé comme une des variables du problème. Thomas et King (1991, 1992) ont proposé leur modèle basé sur le modèle de Luikov (1966). L'avantage de ce modèle est sa compatibilité avec les approches classiques et les formes habituelles de formulations écrites en géotechnique. Thomas et Sanson (1995) ont modifié ce modèle afin d'intégrer la pression du gaz.

Parmi les premiers travaux sur le couplage thermo-hydro-mécanique dans les milieux poreux non saturés et déformables, on peut citer le modèle de Geraminezad et Saxena (1986) qui est basée sur la théorie de Philip et de Vries (1957). Dans ce modèle, la prise en compte des déformations est limitée aux déformations volumiques sous les variations de la pression du gaz et de la succion dans le cadre de la thermo-élasticité ; les effets des chargements extérieurs ne sont pas considérés. Zienkiewicz et al. (1990) ont également donné un modèle basé sur l'élargissement de la notion de contrainte effective aux conditions non saturées en apportant des modifications au facteur χ de Bishop, bien que cela reste un sujet controversé dans la littérature (Jennings et Burland, 1962). La réponse du milieu non saturé dans les différents états de saturation a été modélisée par Gawin et al. (1995). Par ailleurs, les déformations du milieu non saturé ont été modélisées par l'intermédiaire de la notion de surface d'état (Thomas et He, 1995, Gatmiri, 1997).

En utilisant (σ - P_g et P_g - P_w) comme variables indépendantes, Gatmiri (1997) a proposé un modèle intégrant les équations de transfert et la conservation des différentes composantes d'un milieu poreux non saturé dans des conditions non isothermes en utilisant une loi de

comportement non linéaire hyperbolique de Kondner-Duncan. La notion d'une surface d'état de l'indice des vides qui dépend de la température, de la succion et des contraintes nettes, a été également introduite. La formulation a été résolue par la méthode des éléments finis dans le code de calcul θ -STOCK. On expliquera ce modèle en détail dans le chapitre suivant.

Le stockage des déchets nucléaire dans les sols a été examiné par de nombreux auteurs (dont Gens et al., 1998, 2002 ; Collin et al. 2002 ; Thomas et al., 2003 ; Martin et Barcala, 2005). Gens et al. (1998, 2002) ont examiné l'interaction entre la roche hôte (granite) et la barrière en argile (bentonite très compactée) dans le cadre du projet FEBEX, consacré à une recherche sur le chargement thermique et hydraulique à l'échelle réelle sur une barrière ouvragée, dans le laboratoire souterrain du Grimsel en Suisse. Leurs analyses montrent un comportement complexe du système roche/barrière dû à la nature couplée des phénomènes thermiques, hydriques et mécaniques. Ils ont montré que les propriétés hydrauliques et la diffusion de vapeur jouent un rôle important dans les analyses. L'essai *mock-up*, un complément du projet FEBEX, a été réalisé pendant 55 mois dans lequel le chargement thermique et l'hydratation de la barrière en briquettes de bentonite gonflante à l'échelle réelle a été effectué (Martin et Barcala, 2005). Au contraire de l'essai *in situ* mentionné, les conditions aux limites dans cet essai ont été bien contrôlées. Ils ont trouvé que le régime thermique est homogène et symétrique et que le flux d'eau en phases liquide et vapeur sont orientés selon une direction radiale. Ils ont conclu que la resaturation de la barrière en bentonite est apparemment contrôlée par les propriétés hydrauliques et le gradient de température.

Collin et al. (2002) ont proposé un modèle THM en intégrant la formulation mécanique d'Alonso et al. (1990). Un essai sur la bentonite compactée non saturé soumis au chargement thermique et hydrique a été simulé numériquement par ce modèle. Leurs résultats montrent des phénomènes comme le séchage dû à l'évaporation et à la resaturation d'échantillon autour de la source d'eau. En comparant les résultats numériques et expérimentaux, ils ont conclu que dans ce sol peu perméable, la conduction est le mode dominant du transfert de chaleur. Thomas et al. (2003) ont simulé le comportement de resaturation isotherme d'une argile très compactée à grande échelle et *in situ* dans le laboratoire souterrain d'énergie atomique de Canada, AECL. L'argile a été entourée par la roche hôte saturée. Ils ont observé qu'une grande partie de l'argile n'a pas été saturée malgré la longue durée de cette expérimentation (sept ans). La saturation d'une bentonite très compactée entraîne le gonflement. Dans le cas

où la variation de volume est empêchée, le gonflement peut diminuer les macro-vides d'argile, par conséquent, la conductivité hydraulique peut être diminuée.

Dans le chapitre suivant, on simulera quelques exemples de stockage de déchets nucléaires avec le modèle THM de CERMES dans le Code_ ASTER (Gatmiri 2000 ; Gatmiri et Seyed, 2001 ; Gatmiri et Hemmati, 2002 ; Gatmiri et Ghasemzadeh, 2003). Comme il est mentionné précédemment, dans plusieurs problèmes reliés à l'environnement dont le stockage de déchets nucléaires, il est nécessaire d'envisager les phénomènes THCM couplés. Dans ce qui suit, on s'intéresse au transfert de polluant dans les sols afin d'établir une formulation THCM couplée.

2.3 Transfert de polluant en phase aqueuse

De point de vue du transfert, les polluants peuvent migrer dans les sols suivant les formes suivantes:

- Transfert de polluant dissous ou miscible
- Transfert de polluant immiscible
- Transfert en phase vapeur

Les travaux réalisés dans cette thèse sont concentrés sur le transfert de polluant dissous dans la phase aqueuse. Dans ce paragraphe on expliquera le transfert de polluant en phase aqueuse dans un but d'intégration au comportement thermo-hydro-mécanique existant. On explique tout d'abord les différentes formes de la pollution afin de clarifier les applications de la formulation finale et leur limites. Ensuite, on expliquera les formulations mathématiques de la modélisation de transfert de polluant qui aura été une partie de la formulation THMC couplé.

2.3.1 Différentes formes de la pollution

Le sol, l'eau et l'air et de notre environnement sont pollués par les différentes activités humaines. La pollution des sols et leur protection fait l'objet de la part de la société d'une attention moindre que celle portée à la pollution de l'air et de l'eau du fait du caractère invisible de la pollution des sols (Delage et Schrefler, 2005). Dans la plupart des cas, les sources de polluants sont communes pour le sol et l'eau.

D'après BRGM (2000) les polluants de sols sont classés en trois catégories : métalliques, minéraux, et organiques. Basé sur le guide méthodologique britannique (BSI DD, 1988), Bouazza et Delage (2005) ont rappelé la classification suivante :

- *Les polluants chimiques solubles* : acides, bases, nitrites (engrais), sulfates, fluorures (industrie chimique et de l'aluminium), chlorures, cyanures (usines à gaz, pétrochimie, traitement de surface, traitements de minerais), détergents et tensio-actifs (nettoyages domestiques et industriels), pesticides, herbicides... ;

- *Les métaux lourds* : cadmium, manganèse, cobalt, chrome, cuivre, plombe, mercure, nickel et zinc auxquels on associe également l'arsenic. Ils proviennent essentiellement des fuites de centres de stockage de déchet industriels et urbains et de retombées atmosphériques de fumées industrielles et d'incinération des déchets ; le ruissellement et l'infiltration localisée et chronique d'eau de pluie sur un toit de bâtiment en zinc peut aussi être la source d'une telle pollution ;

- *Les composés hydrocarbonés* : dérivés du pétrole brut et qui comprennent l'ensemble des carburants utilisés dans l'industrie, la production d'énergie et les transports comme l'essence, le kérosène, les gazoles légers et lourds, les huiles...

Par ailleurs, les différentes formes de la pollution d'eau consistent en : la pollution solide (en suspension), la pollution inorganique et la pollution organique (Chebbo, 1992; Chocat, 1997; Dechesne, 2002). Les matières en suspension regroupent toutes les matières insolubles : matières minérales ; matières organiques issues de la décomposition de matières animales et végétales ; les micro-organismes. Les pollutions inorganiques sont principalement les métaux, les nutriments et les sels. Les pollutions organiques sont constituées de l'ensemble des molécules à base de carbone, d'hydrogène, et dans une moindre mesure d'oxygène et d'azote. Elle comprend donc aussi les micro-organismes tels que les virus, les bactéries ou tout autre parasite peuvent parfois représenter un risque de contamination leur transport dans les sols devient important.

La migration des composés hydrocarbonés dans les aquifères impliquent des processus multiphasiques. L'étude des couplages dans les milieux poreux multiphasiques a été initialement axée sur les phénomènes de transfert se produisant dans le domaine de l'ingénierie pétrolière, pour être ensuite reprise dans le génie civil. Plusieurs modèles multiphasiques (à deux et trois fluides) ont été publiés pour les systèmes de deux et trois dimensions (Guarnaccia et al., 1997; Miller et al., 1998). Quelques modèles multiphasiques sont présentés dans le Tableau 2-1. La plupart de ces modèles supposent l'équilibre local, des

relations pression- saturation- perméabilité (p-S-k) non hystérétiques et une condition isotherme avec des grandeurs typiques de simulation à l'ordre de 10^2 à 10^4 de points (Miller et al., 1998). Le but de ce travail est la modélisation du transport de polluants solubles dans les sols non saturés.

Tableau 2-1. Modèles Multiphasiques (Guarnaccia et al., 1997; Miller et al., 1998)

Référence	Phases Mob./Imob.	n_s	Constituant	Dim.	Relation de constitutive		
					Compr.	p-S-k	TTM
Abriola 1985	a,n1,n2/g,s	1	a,g,n1	1	a,n1,n2	Co	EL
Faust 1985, Faust et al. 1989	a,n	2	a,n	2,3	a,n,s	BC	EL
Kueper1991	a,n	2	a,n	3	a,n,s	BC	EL
Huyakorn1994	a,g,n	3	a,g,n	3	a,g,n,s	VG /S,tS-k	EL
Young 1983	a,g,n	17	a,g,n	1	a,g,n	Autre	EL
Parker et Lenhard 1987	a,g ,n,s	1	a,g,n,s	1	a,n	Autre	EL
Baehr, Cor. 1987	a/g,n,s	8	a,g,n,s	1	None	Autre	EL
Forsyth 1988	a,n/g	1	a,g,n	2	s	Autre/tS-k	EL
Sleep 1989	a,g/n	1	a,g	2	g	VG/BC	EL
Kaluarachchi1990	a,n/g,s	2	a,g,n,s	2	a,g,n	P	EL
Falta 1992	a,g,n/s	3	a,g,n,s	1	a,g,n	VG /R,C	EL
Guarnaccia 1992	a,n	2	a,n	2	None	h-VG/KP,L	PO
Mayer 1992	a,n	1	a,n	2	a,n	VG/P	PO
Adenekan 1993	a,g,n/s	ns	a,g,n,s	3	a,g,n,s	C/P	EL
Sleep 1993	a,g,n	3	a,g,n	3	a,g,n	BC,VG/BC,P	EL
Reeves 1994	Chaque 2	3	a,g,n	2	a,g,n	VG/P	EL
van Geel 1994	a,g,n	1	a,g,n	2	a,g,n	h-VG/LP	EL
Sleep1995	a,n1,n2	3	a,n1,n2	1	None	tp-S/E	EL
White 1995,lenhard95	a,n/g,s	1	a,g,n,s	3	n,s	h-VG,LP	EL
Guarnaccia et al. 1997a,b	a,n,g	1	a,g,n	3	a,g,n	GPF	PO
Lewis 1998	a,g,n,s	3	a,g,n,s	3	a,g,n,s	Autre	EL

a = aqueuses, n=NAPL /oléique, g=gazeux et s=solide, Compr.= compressibilité, p-S-k : relation de pression- saturation- perméabilité, slash ça veut dire p-S/S-k, TTM : Type de transfert de masse, EL= équilibre local, et PO=Premier Ordre; tp-S(ou tS-k)= p-S(ou S-k) tabulé ;ns=non spécifié ; BC= relation p-S-k de Brooks-Corey (1966), C=Corey(1956,1994), Co= relation p-S-k de Coats (1980), E= relation S-k de Eckberg, Brooks-Corey (1966), KP=relations p-S-k de Kool et Parker (1987), LP= relations p-S-k de Lenhard et Parker (1988,1987), L=relations p-S-k de Luckner, van Genuchten et Nielsen (1989), P=relations p-S-k de Parker (1987) et Camilleri (1987), PLH=relations p-S-k de Pope, Lake et Hirasaki, Camilleri (1987), GPF=relations p-S-k de Guarnaccia, Pinder et Fishman (1987a), R=Echelle de Roche(stone scale) pour relation perméabilité triphasiques, S=relations p-S-k de Stone (1970), VG=Relation p-S de van Genuchten (1980).

2.3.2 Les modèles géochimiques et transfert

Les modèles de transport d'une espèce chimique dans un milieu poreux peuvent être classés en trois grandes catégories : les modèles déterministes, les modèles déterministes fonctionnels et les modèles stochastiques (Vauclin, 1994). On peut appliquer cette classification à la plupart des modèles de transports réactifs, qualifiés également de modèles hydro-(géo)-chimiques, c'est à dire à des modèles couplant les phénomènes de transport de masses aux réactions géochimiques (Condom, 2000).

Les modèles déterministes mécanistes permettent la prise en compte du couplage de plusieurs phénomènes bien que le nombre de paramètres et la détermination de conditions initiales et aux limites rendent plus difficile leur validation. Les modèles déterministes fonctionnels sont de type capacitif et ils utilisent un nombre plus réduit de paramètres mais ne peuvent être utilisés avec un objectif d'étude des processus. Enfin, les modèles stochastiques sont très spécifiques aux conditions d'étude et difficilement transférables, sans caractérisation supplémentaire, à un milieu différent.

Quelques modèles de transfert et géochimie pour milieux naturels sont présentés dans le Tableau 2-2 (Condom, 2000). A propos de ces modèles, on note que :

- plusieurs modèles de transfert et géochimie ont été publiés pour des milieux naturels ;
- la plupart de ces modèles sont déterministes ;
- le couplage entre le transfert d'une espèce chimique et les phénomènes géochimiques a été considéré ;
- la plupart de ces modèles n'ont pas de couplages thermiques et le milieu a été considéré toujours rigide et sans déformation.

L'équation de convection-dispersion, est un exemple très largement répandu des modèles déterministes mécanistes. L'équation de transport des solutés peut intégrer des termes traduisant les réactions homogènes et hétérogènes ayant un impact sur la concentration des éléments en solution. On expliquera cette équation qui sera intégrée dans le modèle thermo-hydro-chimio-mécanique.

Tableau 2-2. Caractéristiques des principaux modèles pour l'étude des processus de transfert et de géochimie (Condom, 2000).

Nom	Référence	Transport	Echanges cationiques	Préc./Diss. minéraux	couplage
GYPSOL	Vallés & Bourgeat (1988)	aucun	statique	statique	aucun
GEOCHEM	Sposito & Mattigod (1979)	aucun	statique	statique	aucun
KINDIS	Madé et al. (1994)	aucun	aucun	dynamique	aucun
EQ3/6	Wolery et al. (1990)	aucun	aucun	dynamique	aucun
PASTIS	Lafolie (1991)	déterministe	aucun	aucun	aucun
SWAP93	Feddes et al. (1988), Van den broek et al. (1994)	déterministe	aucun	aucun	aucun
KIRMAT	Gérad et al. (1998)	déterministe	aucun	dynamique	itératif
X	Bjerg et al., (1993)	déterministe	statique	aucun	itératif
X	Fabriol et al., (1993)	déterministe	aucun	statique	à deux pas
X	Marlet et al., (1998)	capacitif	statique	statique	à deux pas
HYDRO-GEOCHEM	Yeh et Tripathi, (1998)	déterministe	statique	statique	à deux pas
X	Warfvinge et Sverdrup, (1998)	capacitif	dynamique	dynamique	itératif
X	Sauty et al., (1989)	déterministe	statique	statique	itératif
LEACHM	Hutson et Wagener, (1998)	déterministe	statique	statique	à deux pas
X	Marlet et al., (1996)	déterministe	statique	statique	à deux pas
UNSATCHEM-2D	Simunek et Suarez, (1998)	déterministe	statique	dynamique	itératif

D'une part, le soluté dissous est transporté par l'écoulement de l'eau dans le milieu poreux. Ce processus s'appelle transport par advection ou convection. La quantité de soluté transporté est proportionnelle à sa concentration dans l'eau et le flux d'eau. Le débit du soluté dû à la convection (q_c) peut être obtenu par la relation suivante :

$$q_c = \theta v C \quad \text{Eq. 2-2}$$

où C est la concentration (mole/m^3), v est la vitesse de l'eau dans les pores et θ est la teneur en eau.

D'autre part, un soluté dans l'eau migre d'une zone de concentration forte vers une zone de concentration plus faible. Ce processus s'appelle diffusion moléculaire ou diffusion. La diffusion existera tant qu'un gradient de concentration existe, même si le fluide ne s'écoule pas. La masse de fluide diffusée est proportionnelle au gradient de concentration qui peut s'exprimer par la loi de Fick. Le flux diffusif du soluté (q_{diff}) peut s'écrire :

$$q_{diff} = -\theta D \nabla C \quad \text{Eq. 2-3}$$

où D est le coefficient de diffusion. Dans les milieux poreux, il y a un flux dû à la dispersion en plus du flux diffusif. La dispersion est liée aux variations de vitesses dans les milieux poreux. Ceci est dû au profil parabolique des vitesses dans les pores, à la dimension variable des pores et aux fluctuations des lignes de courant à cause des obstacles. La dispersion peut être prise en compte en utilisant le coefficient de dispersion hydrodynamique (\mathbf{D}) qui sera défini ultérieurement (Bear 1979) :

$$q_{disp} = -\theta \mathbf{D} \nabla C \quad \text{Eq. 2-4}$$

Pour écrire l'équation de conservation de la masse de soluté non réactif on considère un volume élémentaire représentatif de sol (Figure 2-2). La variation totale de la masse de soluté dans le volume élémentaire est égale à la variation de flux convectif et dispersif ($q_{tot} = q_c + q_{disp}$) :

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = -div(q_{tot}) \quad \text{Eq. 2-5}$$

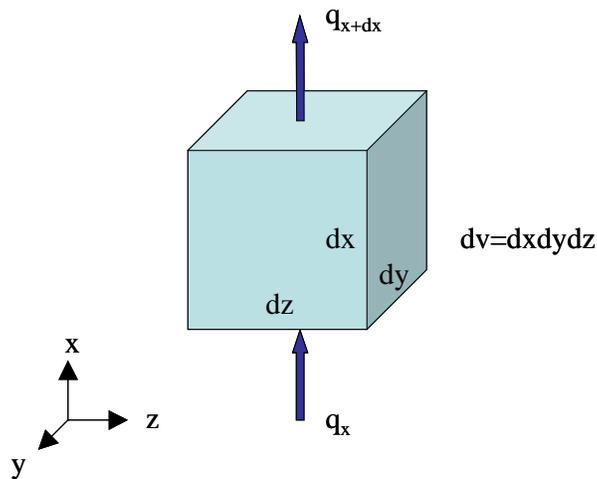


Figure 2-1 Volume élémentaire représentatif

Cette équation est l'équation de convection-dispersion qui exprime le transport conservatif d'un soluté non réactif dans un sol homogène et dans des conditions d'écoulement transitoire. C'est le modèle le plus utilisé (Bear, 1972 ; Fetter, 1999):

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = \nabla \cdot (\theta \mathbf{D} \nabla C) - \nabla \cdot (\theta v C) \quad \text{Eq. 2-6}$$

Ce modèle est non réactif. Il n'existe donc pas d'effets de sorption qui peuvent fixer ou libérer des ions par suite d'échange avec la matrice poreuse. Le modèle ne tient pas compte de l'existence d'une phase d'eau immobile susceptible d'influencer la migration du soluté. Le terme de gauche est la variation du stock de soluté ; le terme de droite est la somme du terme dispersif et du terme convectif. \mathbf{D} est le coefficient de dispersion hydrodynamique qui est la somme algébrique du coefficient de dispersion mécanique dû à la variation de vitesse (D_{disp}) et du coefficient de diffusion moléculaire du milieu (D^*).

Dans le cas tridimensionnel le coefficient de dispersion hydrodynamique, \mathbf{D} , est remplacé par le tenseur de dispersion hydrodynamique :

$$\mathbf{D} = D_{disp} + D^* \quad \text{Eq. 2-7}$$

D_{disp} est le tenseur de dispersion mécanique et D^* est le tenseur de diffusion moléculaire effective qui peut s'exprimer (Bear, 1972) :

$$D_{ij}^* = D_m T_{ij}^* \quad \text{Eq. 2-8}$$

où :

T_{ij}^* , une fonction de tortuosité du milieu poreux qui dépend de la teneur en eau (θ) et de la porosité du milieu (n). Dans le cas du sol isotrope, Millington et Quirk (1961) ont proposé :

$$D^* = D_m \frac{\theta^{10/3}}{n^2} \quad \text{Eq. 2-9}$$

Greenkorn et Kessler (1972) ont proposé quant à eux la relation suivante :

$$D^* = D_m \frac{\theta}{\tau} \quad \text{Eq. 2-10}$$

où

τ , la tortuosité de milieu poreux.

D_m , le coefficient de diffusion moléculaire dans l'eau libre. Ce coefficient peut être obtenu par la relation d'Einstein ou formule de fluctuation-dissipation:

$$D_m = \frac{K_b T}{6\pi\eta r} \quad \text{Eq. 2-11}$$

où :

- K_b , la constante de Boltzmann ($1.3805 \cdot 10^{-23}$ J/K)
- T , la température absolue (°K)
- η , le coefficient de viscosité dynamique (cP)
- r , le rayon des agrégats moléculaires (m).

Les valeurs du coefficient de diffusion moléculaire dans l'eau libre se trouvent aussi dans les ouvrages de physique et de chimie. Le Tableau 2-3 montre quelques exemples de ce coefficient pour certaines espèces chimiques. Le coefficient de diffusion moléculaire dans l'eau libre pour les sels (D_{msel}) peut être calculé à partir de ceux de ses composants (Lide 2003):

$$D_{msel} = \frac{(z_+ + |z_-|)D_{m+}D_{m-}}{z_+D_{m+} + |z_-|D_{m-}} \quad \text{Eq. 2-12}$$

où D_{m+} , D_{m-} sont les coefficient de diffusion d'anion et de cation et z_+ , z_- sont les charges d'anion et de cation .

Tableau 2-3. *coefficient de diffusion moléculaire dans l'eau libre en solutions diluées à 25°C (Lide 2003)*

Espèces chimiques	Coefficient de diffusion dans l'eau libre (10^{-9} m ² /s)
H ⁺	9.311
OH ⁻	5.273
Na ⁺	1.334
K ⁺	1.957
Ca ²⁺	0.792
Pb ²⁺	0.945
Cl ⁻	2.032
Mg ²⁺	0.706

Si on considère un tenseur pour la dispersion mécanique de la forme suivante :

$$D_{disp} = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix} \quad \text{Eq. 2-13}$$

Burnett et Friend (1987) ont proposé des composants du coefficient de dispersion avec deux dispersivités transversales (a_{TH} , a_{TV}) sous la forme suivante :

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_{TH} \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_{TV} \frac{v_z^2}{|v|} \quad \text{Eq. 2-15}$$

$$D_{yy} = \alpha_L \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_{TH} \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_{TV} \frac{v_z^2}{|v|} \quad \text{Eq. 2-16}$$

$$D_{zz} = \alpha_L \frac{v_z^2}{|v|} + \alpha_{TV} \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_{TV} \frac{v_y^2}{|v|} \quad \text{Eq. 2-17}$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_{TH}) \frac{v_x v_y}{|v|} \quad \text{Eq. 2-18}$$

$$D_{xz} = D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_{TV}) \frac{v_x v_z}{|v|} \quad \text{Eq. 2-19}$$

$$D_{yz} = D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_{TV}) \frac{v_y v_z}{|v|} \quad \text{Eq. 2-20}$$

$$|v| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2} \quad \text{Eq. 2-21}$$

où :

α_L , le coefficient de dispersion intrinsèque – longitudinal ;

v_x , la vitesse dans la direction x ;

v_y , la vitesse dans la direction y.

v_z , la vitesse dans la direction z.

Avec un seul coefficient de dispersion transversal dans les différentes directions ($a_{TH}=a_{TV}=a_T$), on trouve les expressions proposées par Bear (1972,1979).

Le régime du transport peut être distingué par le Nombre de Péclet (P_e) qui détermine la participation de la diffusion et de la convection en processus du transport du soluté:

$$P_e = \frac{vd}{D^*} \quad \text{Eq. 2-22}$$

où v est la vitesse de l'eau dans les pores et d est le longueur caractéristique ou diamètre efficace des grains (Kutílek et Nielsen, 1994). Basé sur un modèle capillaire cylindrique équivalent, d peut être défini comme (Or et Wraith, 2002 ; Nobuo et al., 2003) :

$$d = \frac{0,1484}{|h|} \quad \text{Eq. 2-23}$$

où h est la pression d'eau (cm). Les valeurs $P_e \ll 1$ montrent que le transport est dominé par la dispersion et les valeurs $P_e \gg 1$ montrent un régime convectif (Bear et Bachmat, 1979). Conformément à la valeur du nombre de Péclet, Phannkuch (1963) a défini cinq régimes d'écoulement : la diffusion pure, la superposition de la diffusion et dispersion hydrodynamique, la dispersion hydrodynamique prédominante, la dispersion hydrodynamique pure et la dispersion hydrodynamique hors du domaine de validité de la loi de Darcy.

Les polluants dissous dans l'eau souterraine sont soumis à un certain nombre de processus différents par lesquels ils peuvent quitter leur état dissous. Ils peuvent être absorbés sur la surface minérale du sol, être absorbés par le carbone organique existant dans l'aquifère, subir une précipitation chimique, être soumis à des réactions abiotiques en plus de la biodégradation, et prendre part aux réactions d'oxydation/réduction. En outre, l'élément radioactif peut se décomposer. A cause du processus de sorption, quelques solutés se déplacent beaucoup plus lentement à travers l'aquifère que l'eau souterraine qui les transporte ; cet effet est appelé retardation. La biodégradation, la décomposition radioactive, et la précipitation diminuent la concentration de soluté dans l'eau contaminée mais ne diminuent pas nécessairement la vitesse de migration du polluant. Les réactions chimiques peuvent entrer dans l'équation de convection-dispersion comme la source ou le puits du constituant chimique (Bear, 1979 ; Zheng et Bennett, 1995) :

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = \nabla \cdot (\theta \mathbf{D} \nabla C) - \nabla \cdot (\theta v C) + \Sigma R_n \quad \text{Eq. 2-24}$$

avec :

$$\Sigma R_n = -\frac{\partial(\rho_b C_s)}{\partial t} - \left(\frac{\partial \theta C}{\partial t} \right)_{rbc} \quad \text{Eq. 2-25}$$

où

ΣR_n , les réactions chimiques

ρ_b , la densité apparente de l'aquifère (*bulk density* en anglais) ;

θ , le teneur en liquide volumique;

C_s , la concentration de soluté adsorbé par unité de poids de la phase solide ;

rbc , l'indice inférieur se rapporte à réaction biologique ou chimique de soluté autre que la sorption.

Le terme de gauche est la variation du stock de soluté ; le premier terme de droite représente la dispersion du soluté, le deuxième terme de droite est l'advection du soluté, le troisième terme désigne les réactions chimiques. Les réactions chimiques peuvent être considérées par deux termes dont le premier terme est le transfert du soluté de la phase liquide à la phase solide par sorption et le deuxième terme indique la variation de la concentration du soluté dans le temps à cause de la réaction biologique ou chimique ou de la désintégration radioactive. Nous allons maintenant détailler les modèles empiriques et semi-empiriques souvent utilisés dans les termes de la concentration de soluté adsorbé par unité de poids de la phase solide (C_s).

2.3.3 Modèles empiriques et semi-empiriques

2.3.3.1 Hypothèse d'équilibre instantané, les isothermes d'adsorption

L'hypothèse de l'équilibre instantané traduit une sorption instantanée par rapport aux temps de transfert du soluté. Elle est réversible et en théorie, la concentration C_s ne prend en compte que l'élément adsorbé. Toutefois, dans un milieu complexe où la rétention de polluants résulte de plusieurs phénomènes, l'isotherme d'adsorption ne peut être le témoin du seul phénomène d'adsorption. A l'échelle macroscopique, la sorption est considérée dans son ensemble (adsorption + précipitation + complexation). L'isotherme d'adsorption définit la relation entre la concentration C en phase liquide et la concentration C_s en phase solide par l'intermédiaire d'un coefficient de partage K . Trois isothermes d'adsorptions différentes sont proposées (Figure 2-2).

Isotherme linéaire

Hypothèses : le nombre de sites de sorption est illimité; tous les sites de sorption ont la même affinité chimique. Cet isotherme est représenté par une relation linéaire :

$$C_s = K_d \cdot C \quad \text{Eq. 2-26}$$

où

C , la concentration du soluté en solution en équilibre avec la masse de soluté adsorbé en phase solide (mole/m^3);

C_s , la concentration de soluté adsorbé par unité poids de phase solide (mole/kg);

K_d , le coefficient de distribution de soluté entre la phase liquide et la phase solide (m^3/kg).

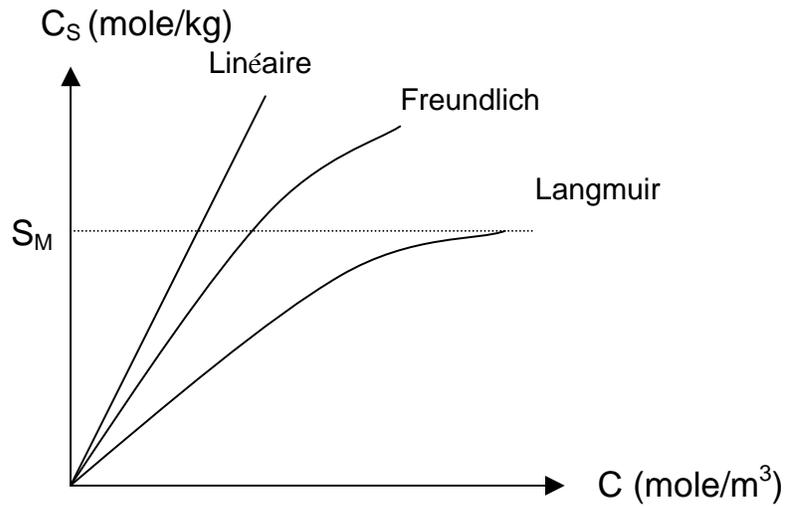


Figure 2-2 Allures de différentes isothermes d'adsorption

Isotherme de Freundlich

Hypothèses: le nombre de sites de sorption est illimité; les affinités chimiques des sites diminuent quand la quantité adsorbée augmente. C'est le modèle d'adsorption non linéaire le plus largement utilisé :

$$C_s = K_F \cdot C^n \quad \text{Eq. 2-27}$$

où

K_F , le coefficient de distribution de soluté de Freundlich ;

n , l'intensité d'adsorption, $n \in [0,1]$.

Isotherme de Langmuir

Hypothèses: le nombre de sites de sorption est limité; tous les sites d'adsorption ont la même affinité chimique. Ce modèle est principalement utilisé pour les systèmes dans lesquels les molécules sorbées s'organisent en une simple couche à l'interface solide-liquide :

$$C_s = S_M \cdot \frac{K_L \cdot C}{1 + K_L \cdot C} \quad \text{Eq. 2-28}$$

où

K_L , le coefficient de distribution de soluté de Langmuir (L/kg) ;

S_M , la concentration maximale adsorbée en phase solide.

Isotherme de Langmuir avec deux surfaces

Hypothèses: le nombre de sites de sorption est limité; il y a deux sortes de sites d'adsorption qui ont différentes affinités chimiques. Dans les études sur la sorption du phosphore dans les sols, il a été montré que la relation C/C_s versus C présente une courbe avec deux segments de droite (Fetter, 1997 ; Munns et Fox 1976). Ceci signifie qu'il y a deux types de sites de sorption, qui diffèrent dans leur énergie de liaison :

$$C_s = S_{M1} \cdot \frac{K_{L1} \cdot C}{1 + K_{L1} \cdot C} + S_{M2} \cdot \frac{K_{L2} \cdot C}{1 + K_{L2} \cdot C} \quad \text{Eq. 2-29}$$

Où

K_{L1} , la résistance de liaison pour le site 1 ;

K_{L2} , la résistance de liaison pour le site 2 ;

S_{M1} , la concentration maximale adsorbée sur le site 1 ;

S_{M2} , la concentration maximale adsorbée sur le site 2.

2.3.3.2 *Hypothèse de non équilibre instantané : les formulations cinétiques*

L'hypothèse d'équilibre local ne permet pas de représenter les phénomènes dépendant du temps. Pour les prendre en compte, il faut envisager des lois cinétiques de la sorption. Quatre modèles sont fréquemment utilisés :

Irréversible premier-ordre

Hypothèses: tous les sites d'adsorption ont la même affinité chimique. Le taux de sorption est fonction de la concentration de solution, il n'y a pas désorption :

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = K_0 \cdot C \quad \text{Eq. 2-30}$$

où K_0 , la constante du première ordre du taux de dégradation.

Relation linéaire réversible

Hypothèses: tous les sites d'adsorption ont la même affinité chimique. Le taux de sorption est fonction de la concentration de la solution et de la concentration adsorbée, la réaction est réversible :

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = K_1 \cdot C - K_2 \cdot C_s \quad \text{Eq. 2-31}$$

Où K_1 et K_2 sont respectivement les constantes en-avant et en-arrière de sorption. On rencontre aussi la formulation suivante :

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = \gamma(K_3 \cdot C - C_s) \quad \text{Eq. 2-32}$$

Où γ est le coefficient cinétique premier ordre de la réaction et K_3 une constante égale K_d (Eq. 2-26).

Relation nonlinéaire réversible

Hypothèses : tous les sites d'adsorption ont la même affinité chimique. Le taux de sorption est une fonction non linéaire de la concentration de la solution et une fonction linéaire de concentration adsorbée, la réaction est réversible :

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = K_4 \cdot C^N - K_5 \cdot C_s \quad \text{Eq. 2-33}$$

Où K_4 , K_5 et N sont des constantes. Ceci a été utilisé avec N inférieur à 1 pour décrire la sorption de la pollution (Fiskell et al, 1979) et d'herbicides (Enfield et Bledsoe, 1975).

Relation bilinéaire adsorption

Hypothèses : version cinétique de l'isotherme de sorption de Langmuir.

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = K_6 C \cdot (\beta - C_s) - K_7 C_s \quad \text{Eq. 2-34}$$

où K_6 et K_7 sont respectivement les constantes en-avant et en-arrière de sorption et β la concentration maximale adsorbée en phase solide.

2.3.4 Résolution de l'équation de convection-dispersion

L'équation de convection-dispersion peut être résolue soit par des méthodes analytiques voire quasi-analytiques, soit par des méthodes numériques. Les méthodes analytiques sont limitées à des systèmes géométriques simples et généralement à un milieu homogène et saturé.

L'équation de convection-dispersion d'un soluté dans une colonne unidimensionnelle de sol saturé avec une vitesse de l'eau (v_x) est obtenue de l'équation Eq. 2-6 comme :

$$\frac{\partial(C)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D_L \frac{\partial C}{\partial x} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad \text{Eq. 2-35}$$

où

D_L , le coefficient de dispersion longitudinal .

Ogata et Banks, 1961 ont proposé la solution analytique de cette équation pour les sols saturés et homogènes et la condition d'écoulement permanent avec des conditions aux limites de Dirichlet ($C(0, t) = C_0$) et les conditions initiales $C(x, 0) = 0$:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) + \exp \left(\frac{v_x x}{D_L} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x + v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) \right]. \quad \text{Eq. 2-36}$$

$C(x, t)$, la concentration du soluté dans le temps t ;

x , la distance de source du soluté.

$\operatorname{erfc}(B)$ est une fonction complémentaire d'erreur qui est définie par la fonction d'erreur $\operatorname{erf}(B)$ comme :

$$\operatorname{erfc}(B) = 1 - \operatorname{erf}(B) \quad \text{Eq. 2-37}$$

La fonction d'erreur de la variable B est définie par :

$$\operatorname{erf}(B) = \sqrt{1 - \exp(-4B^2 / \pi)} \quad \text{Eq. 2-38}$$

Cette équation s'écrit sous une forme adimensionnelle comme (Fetter, 1999) :

$$C_R(P_e, t_R) = 0,5 \left[\operatorname{erfc} \left((1 - t_R) \sqrt{\frac{P_e}{4t_R}} \right) + \exp(P_e) \operatorname{erfc} \left((1 + t_R) \sqrt{\frac{P_e}{4t_R}} \right) \right]. \quad \text{Eq. 2-39}$$

avec :

$$\begin{aligned} C_R(P_e, t_R) &= C/C_0 \\ t_R &= v_x t / L \\ P_e &= v_x L / D_L \end{aligned} \quad \text{Eq. 2-40}$$

où L est la taille moyenne des particules de sol ou un autre long caractéristique du sol (Kutilek et Nielsen, 1994). P_e , est *nombre de Peclet*. La valeur plus élevée de ce paramètre nous indique que le transport est fortement relié à la convection (Fetter, 1999, Zienkiewicz et Taylor 2000).

Sauty (1980), van Genuchten (1981) et van Genuchten et Alves (1982) entre autres, ont fourni des solutions analytiques pour des transports unidimensionnels avec différentes conditions aux limites. Pour le cas bidimensionnel De Josselin de Jong (1958), Bear (1972), Fried (1975), Wilson (1978), Batu (1989,1993) ont présenté des solutions analytiques. Bear (1972), Domenico et al. (1985) se sont intéressés au transport tridimensionnel. Dans certains cas, il peut s'avérer utile d'utiliser une méthode semi-analytique. Le problème est d'abord résolu analytiquement dans les domaines des transformées de Fourier ou de Laplace et la transformée inverse est ensuite calculée analytiquement ou numériquement. Dans le cas plus compliqué des sols non saturés où le transfert est couplé avec les autres phénomènes, la résolution numérique de l'équation d'advection-dispersion semble être mieux adaptée.

2.4 Paramètres influents sur le transfert couplé

Dans le cas où il n'y aurait pas d'interaction entre le soluté et la matrice du milieu poreux, le transfert du soluté peut être estimé par la résolution de l'équation de convection-dispersion. Les effets de la matrice sur le transfert de soluté peuvent être considérés par différents modèles d'adsorption qu'on a déjà présentés dans les paragraphes précédemment. Dans les sols comme les argiles, les effets du soluté sur le comportement mécanique de la matrice sont importants ; parmi d'autres, on cite la *consolidation osmotique* et la *consolidation chimique*. Certaines argiles se comportent comme des membranes semi-imperméables en face du transfert d'une solution, ce qui engendre une pression osmotique. La pression osmotique peut s'obtenir théoriquement de la relation Van't Hoff ($P_{os} = RTC$, R : la constante universelle ; T : la température ; C : la concentration du soluté). La fuite d'eau due à cette pression osmotique peut entraîner une consolidation osmotique (Figure 2-3) dans l'argile. Les phénomènes de substitution isomorphe, de défaut réseau, d'hydrolyse, et d'adsorption ionique donnent une charge négative aux argiles, ce qui entraîne le fait que les cations sont attirés par l'argile. Cette interaction affecte le transfert du constituant chimique ; d'autre part, la concentration chimique peut diminuer l'épaisseur de la double couche, ce qui entraîne une consolidation chimique dans l'argile (Figure 2-3). Quelques évidences expérimentales de ce type d'interactions sont présentées dans ce paragraphe.

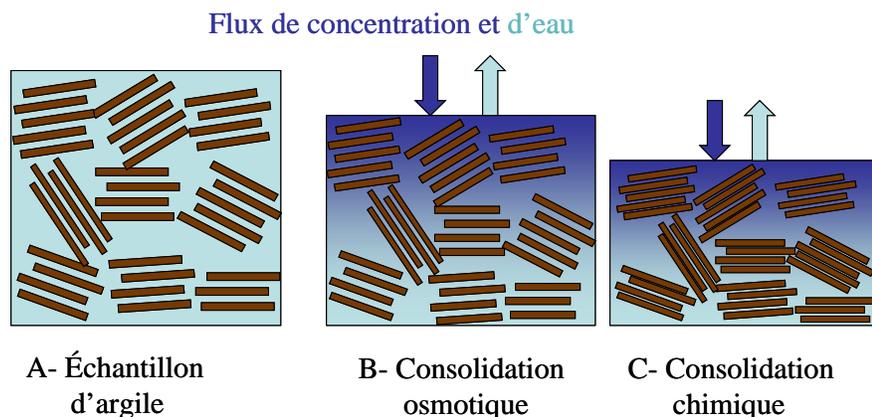


Figure 2-3 Consolidation osmotique et chimique

2.4.1 Les travaux expérimentaux

Des données présentées par Winterkorn (1948) montrent que l'indice de gonflement de la bentonite du Wyoming est réduit quand le cation échangeable passe du sodium (Na^+) au calcium (Ca^{2+}). L'effet du cation sur la compressibilité a été étudié par Bolt (1956). Il a conduit des essais de compressibilité, entre 0,01 et 2 MPa de contrainte verticale, sur des suspensions de bentonite du Wyoming, en la rendant homoionique avec différents cations, à une concentration molaire $M = 10^{-3}$. Ses résultats montrent que l'indice des vides initial et la compressibilité sont considérablement réduits en remplaçant le Na^+ par le Ca^{2+} .

La concentration des éléments chimiques peut affecter le comportement mécanique des argiles. Greenberg et al. (1973) ont considéré la consolidation mécanique et la consolidation chimique couplé. Ils ont utilisé l'approche d'Onsager (1931) pour étudier le transfert couplé d'eau et de sel dans une couche d'argile semi-imperméable et déformable. Leurs résultats montrent que les effets couplés sont faibles. Sridharan & Jayadeva (1982) ont mis en évidence l'effet de la concentration de l'électrolyte sur la compressibilité des argiles et ont proposé un modèle de double couche donnant lieu à des prévisions satisfaisantes pour des indices des vides élevés. Dans ce modèle l'indice des vides diminue augmentant la concentration molaire de la solution.

Barbour et Fredlund (1989) ont fait des essais de transfert d'eau et de sel dans certaines argiles. Dans l'analyse théorique, ils ont utilisé la notion de consolidation chimique et

d'écoulement osmotique pour expliquer leurs résultats. Par ailleurs, Santamarina et Fam (1995) ont utilisé la notion de consolidation chimique pour expliquer leurs résultats expérimentaux. Hueckel (1997) a proposé une relation exponentielle entre la pression de préconsolidation et la concentration chimique de telle sorte que la résistance diminue en augmentant la concentration chimique. Kaczmarek et Hueckel (1998) ont utilisé un modèle linéaire pour expliquer les résultats de Barbour et Fredlund (1989). Les travaux expérimentaux de Di Maio (1996) sur une bentonite exposée à une solution saline saturée montrent une réduction volumique importante (consolidation osmotique). Une réversibilité importante a été observée après changement de la solution saline (NaCl) par l'eau distillée. Loret et al. (2002) ont proposé une modélisation théorique pour comportement chimio-mécanique des argiles. Ils ont introduit un comportement chimio-mécanique élastique pour expliquer les résultats expérimentaux de Di Maio et Onorati (1999). Dans ce travail, ils ont utilisé une Na-Montmorillonite saturée et ils n'ont pas considéré la présence d'autres cations.

Yong & Mohamed (1992) ont réalisé des essais de consolidation à hautes pressions sur une smectite sodique. Ils ont trouvé que les prévisions faites à partir des modèles de double couches sont peu satisfaisantes, pour des distances interlamellaires inférieures à 30 Å, bien qu'il reste discutable (Marcial et al., 2002). Ninham (1999) a présenté une synthèse très intéressante sur la théorie de la double couche. Il a indiqué que la théorie fonctionne bien pour des solutions de NaCl et KCl à des concentrations molaires entre 10^{-3} et 10^{-1} . Cependant, elle n'est plus satisfaisante pour d'autres sels, pour des concentrations élevées ou pour des applications dont la longueur caractéristique (Debye-Huckel *screening length*) est du même ordre de grandeur que celle des ions hydratés. Les travaux existants montrent un phénomène complexe entre la solution et l'argile ; les modèles microscopiques présents ne sont pas assez satisfaisants. C'est pourquoi, dans les formulations de couplages, on utilisera une approche macroscopique.

Le rôle du constituant chimique sur le changement de la porosité par la dissolution et la précipitation des minéraux a été étudié pour les roches (Steeffel et Lasaga, 1989 ; Carnahan, 1990). Fernandez et Quigley (1985, 1991) ont fait des essais sur la variation de perméabilité en fonction de la concentration chimique pour l'argile de Sarina. Leurs résultats expérimentaux montrent une augmentation considérable de perméabilité relative pour une concentration élevée de dioxane (fraction massique du polluant supérieure à 0.7). Kaczmarek et al. (1997) ont proposé un modèle pour ce comportement. Il y a aussi des modèles chimio-mécanique qui considèrent la dégradation et la cimentation des sols. Par exemple, basé sur le

modèle de *Cam-Clay*, Nova et al. (2003, 2005) ont proposé un modèle constitutif pour le comportement des sols cimentés et des roches tendres soumis à une dégradation mécanique et /ou chimique. Ces effets de soluté sur les sols ne font pas d'objet de ce mémoire.

2.4.2 Le couplage THMC

Dans le paragraphe 2.2, des références sur le couplage thermo-hydro-mécanique et les différentes modélisations multiphasiques ont été citées. Dans le paragraphe 2.3, on a expliqué le phénomène de transfert du soluté et les modélisations géochimiques existantes. Malgré les différentes évidences de l'existence de phénomènes complètement couplés Thermo-hydro-chimio-mécaniques, il y a peu de recherche sur ce sujet du fait de sa complexité (Thomas et al., 2001, 2004 ; Gens et al., 2000, 2001 ; Schrefler, 2001, 2002).

Dans ce travail, on utilise tout d'abord la modélisation thermo-hydro-mécanique dans les sols non saturés de Gatmiri (1997) dans le chapitre suivant. On aborde ensuite le couplage thermo-hydro-chimio-mécanique en développant le modèle THM existant. Les équations de modèle développé seront résolues dans un programme aux éléments finis.

2.5 Conclusion

Dans ce chapitre, des modèles de couplage thermo-hydro-mécanique (THM) dans les milieux poreux ont été présentés. Les travaux couplés dans les sols ont commencé avec la théorie de la consolidation unidimensionnelle d'un sol de Terzaghi (1925) qui est un phénomène HM. Dans des conditions saturées, la plupart des travaux sont basés sur la théorie de Biot (1941,1956,1972,1973). Dans les sols non saturés, la notion de contrainte effective et aussi un jeu de deux variables de contraintes indépendantes ont été utilisés. Dans ce contexte, la majorité des auteurs a adopté la loi de Darcy pour le transfert de l'eau, la loi de Fick pour le transfert de l'air et la théorie de Philipe et de Vries (1957) pour le transfert de la vapeur d'eau.

Les polluants dans les sols sont classés comme miscibles ou immiscibles. Ces polluants peuvent avoir des réactions géochimiques avec les sols. Dans ce chapitre, les équations gouvernant le transfert de polluants miscibles et aussi les équations pour la simulation de réaction sol/soluté sont résumées. Le transfert de polluant a été modélisé souvent avec

l'équation de dispersion-convection. Ce transfert entraîne des effets sur les sols surtout dans le cas de l'argile.

Parmi les différentes sortes des sols, les sols argileux sont en effet les plus sensibles aux effets du transfert d'eau, de la chaleur et des constituants chimiques. Certaines argiles peuvent adsorber des espèces chimiques ou se comporter comme une membrane semi-imperméable. Ces phénomènes entraînent le changement de concentration des espèces chimiques dans l'eau et le sol et peut aussi engendrer des effets mécaniques, comme la consolidation osmotique et la consolidation chimique. Les travaux existants montrent un phénomène complexe entre la solution et l'argile, pour lequel les modèles microscopiques présentés ne sont pas assez satisfaisants.

On va établir les formulations pour la simulation du transfert d'un soluté dans les sols non saturés et l'interaction sol-soluté (THMC) en développant un modèle THM. Quant à la modélisation du comportement thermo-hydro-mécanique dans les sols non saturés, une formulation couplée a été proposée et implantée dans le Code_Aster par Gatmiri (1997, 2000). Dans le chapitre suivant, on va expliquer cette formulation ; quelques applications dans le but de vérification du modèle THM dans le Code_Aster seront présentées.

CHAPITRE TROIS: APPLICATION DE MODELE THM

3.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'application et à la vérification du modèle thermo-hydro-mécanique proposé pour étudier le stockage des déchets nucléaires au cours du temps. Tout d'abord on va présenter les formulations THM utilisées pour ce travail. Ensuite les exemples traités et leurs données caractéristiques seront décrits. Enfin les résultats obtenus par la simulation numérique de ces exemples seront présentés et discutés.

3.2 Formulation thermo-hydro-mécanique

Une formulation thermo-hydro-mécanique pour les sols non saturés est proposée par Gatmiri (1997). Cette formulation a été implantée dans le code θ -STOCK et puis dans le Code_Aster en tant que modèle THM-GATMIRI (Gatmiri 2000) à la suite d'un programme de recherche mis en œuvre au CERMES pour le compte de CIH-EDF. Les formulations proposées pour le comportement élastique non linéaire des milieux poreux saturés ainsi que les milieux multiphasiques non saturés sont décrits dans Gatmiri (1999, 2000). Ce qui suit est une brève explication de la formulation mentionnée.

3.2.1 Equation d'équilibre

En utilisant la définition du tenseur des contraintes nettes et en faisant l'hypothèse des petites perturbations, l'équilibre mécanique pour les conditions non saturées s'écrit:

$$(\sigma_{ij} - \delta_{ij} P_g)_{,j} + P_{g,i} + b_i = 0 \quad \text{Eq. 3-1}$$

sur un volume géométrique Ω avec la frontière Γ soumise aux forces volumiques, b_i , appliquées sur Ω . σ_{ij} étant le tenseur des contraintes totales et P_g est la pression du gaz.

3.2.2 Loi de comportement

Dans le cadre de l'approche en variables indépendantes, les variables d'état d'un problème isotherme sont la contrainte nette $(\sigma - P_g)$ et la succion $(P_g - P_w)$. Dans les conditions non isothermes, en tenant compte de la température, Gatmiri (1995-1997) a proposé la relation suivante :

$$d(\sigma - mP_g) = Dde - Fd(P_g - P_w) - C_T dT \quad \text{Eq. 3-2}$$

où :

$$F = DD_s^{-1}, D_s^{-1} = \beta_s m, \beta_s = \frac{1}{1+e} \frac{\partial e}{\partial (p_g - p_w)} \quad \text{Eq. 3-3}$$

$$C_T = DD_T^{-1}, D_T^{-1} = \beta_T m, \beta_T = \frac{1}{1+e} \frac{\partial e}{\partial T} \quad \text{Eq. 3-4}$$

$$m^T = \{ 1, 1, 0 \} \quad \text{Eq. 3-5}$$

où σ est le tenseur des contraintes, ϵ est le tenseur des déformations du milieu poreux, P_g et P_w sont la pression du gaz et la pression de l'eau respectivement et D est la matrice de rigidité élastique non linéaire. Dans les conditions élastiques isotropes D s'écrit :

$$D = \frac{3B}{9B - E} \begin{bmatrix} 3B + E & 3B - E & 0 \\ 3B - E & 3B + E & 0 \\ 0 & 0 & E \end{bmatrix} \quad \text{Eq. 3-6}$$

E et B étant respectivement les modules de Young et de compressibilité volumique. Selon le modèle de *Kondner-Duncan*, le module d'élasticité non linéaire isotherme se calcule avec l'hypothèse d'un comportement élastique non linéaire. Du fait de la non linéarité de la réponse du milieu, deux conditions de chargement et de déchargement ont été intégrées dans le code éléments finis (Gatmiri 95). Pour les conditions non isothermes les modules utilisés sont:

$$E_L = (E_t + E_r)(1 - R_f s_r)^2 \quad \text{Eq. 3-7}$$

$$E_U = E_u + E_t, \quad \text{Eq. 3-8}$$

où :

$$E_1 = K_L P_{atm} \left(\frac{\sigma_3}{P_{atm}} \right)^n \quad \text{Eq. 3-9}$$

$$E_u = K_u P_{atm} \left(\frac{\sigma_3}{P_{atm}} \right)^n, \quad \text{Eq. 3-10}$$

$$E_t = m_1 T \quad \text{Eq. 3-11}$$

avec :

E_L , le module d'élasticité d'Young en chargement ;

E_u , le module d'élasticité d'Young en déchargement ;

s_r , le rapport de contraintes, $s_r = \frac{\sigma_1 - \sigma_3}{(\sigma_1 - \sigma_3)_{ult}}$;

R_f , le rapport de rupture (constante selon Kondner et Duncan) ;

σ_1 , la contrainte principale majeure;

σ_3 , la contrainte principale mineure;

P_{atm} , la pression atmosphérique;

T , la température dans le milieu;

n & m_1 , les constantes;

K_L et K_u , les coefficients adimensionnels.

Dans les conditions non saturées non isothermes d'un sol déformable, la succion varie avec la déformation, la température et le degré de saturation du milieu. Pour prendre en compte différents couplages au sein du milieu, on peut utiliser les surfaces d'état qui donnent les valeurs de l'indice des vides et du degré de saturation du sol en fonction de la contrainte nette et de la succion, pour des variations monotones et croissantes du degré de saturation (Matyas et Radhakrishna, 1968). Le comportement mécanique fonctionne avec ces surfaces d'état. On présentera quelques expressions existant dans la littérature et les formulations de ces surfaces d'état retenues dans le modèle THM dans les paragraphes suivants.

- *Surface d'état de l'indice des vides*

Fredlund (1979) a donné les premières expressions de surfaces d'état en indice des vides :

$$e = a - b \log(\sigma - P_g) - c \log(P_g - P_w), \quad \text{Eq. 3-12}$$

Lloret et Alonso (1985) ont été les premiers à étudier les différentes formes mathématiques de la surface d'état de l'indice des vides. Ils ont conclu que le choix de cette surface dépend du niveau des contraintes appliquées sur le sol. Ils ont proposé les expressions suivantes :

pour une gamme limitée de variations de contraintes :

$$e = a + b(\sigma - P_g) + c \log(P_g - P_w) + d(\sigma - P_g) \log(P_g - P_w), \quad \text{Eq. 3-13}$$

et pour une gamme plus importante de contraintes appliquées :

$$e = a + b \log(\sigma - P_g) + c \log(P_g - P_w) + d \log(\sigma - P_g) \log(P_g - P_w), \quad \text{Eq. 3-14}$$

où a, b et c sont des constantes.

L'effet de la température sur la variation de volume des sols non saturés à été étudié par plusieurs auteurs (Plum et Esrig, 1969 ; Baldi et al. 1988, Sultan et al., 1997, Cekerevac et Laloui, 2004). Les résultats de ces recherches montrent qu'une augmentation de température entraîne une dilatation thermique pour les argiles surconsolidées et une contraction thermique pour les sols normalement consolidés sous l'effet d'une sollicitation thermique.

Pour considérer les effets thermiques dans une surface d'état de l'indice des vides, Gatmiri (1997) a proposé la surface suivante :

$$e = \frac{1 + e_0}{\exp \left[\left[a_e \left(\frac{s - P_g}{P_{atm}} \right) + b_e \left(1 - \frac{s - P_g}{s_c} \right) \left(\frac{P_g - P_w}{P_{atm}} \right) \right]^{1-m} / K_b (1 - m) \right] \exp [c_e (T - T_0)]} - 1 \quad \text{Eq. 3-15}$$

où a_e , b_e et c_e sont des constantes et σ_c est la pression de gonflement.

On note que cette relation dérive des équations concernant le module d'Young et le module de compressibilité volumique du modèle non linéaire (Gatmiri et Delage, 1995). De cette manière, on arrive à assurer la compatibilité entre le modèle élastique non linéaire et la surface d'état de l'indice des vides. Un exemple de cette surface est présenté sur la Figure 3-1 avec une valeur de $\sigma - P_g = 1,1$ MPa. Les valeurs des paramètres introduits seront présentées lors de l'application du modèle par le Code_Aster.

- *Surface d'état du degré de saturation*

La relation entre la pression et la teneur en eau caractérise le comportement hydrique des sols non saturés. Cette relation s'appelle la courbe de rétention. Différentes équations de courbes de rétention d'eau sont présentées dans le tableau Tableau 3-1. Ces courbes sont, en général, caractérisées par deux, trois ou quatre paramètres (Leong et Rahadjo, 1997).

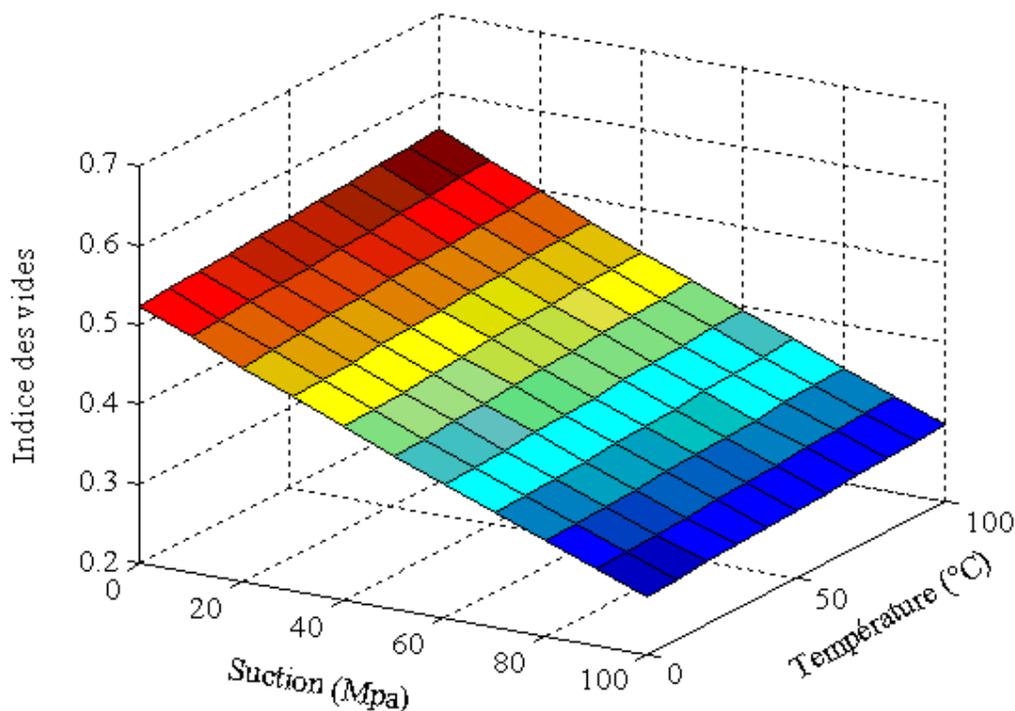


Figure 3-1: Surfaces d'état de l'indice des vides pour $\sigma_c - P_g = 1,1$ MPa (Gatmiri 1997)

On peut décrire le comportement hydrique des sols non saturés par la surface d'état du degré de saturation. Quelques formes mathématiques des surfaces d'état de degré de saturation sont résumées dans le Tableau 3-2. Thomas et He (1995) et Gens et al. (1997) ont proposé des surfaces du degré de saturation avec deux paramètres. Lloret et Alonso (1985) ont proposé des surfaces du degré de saturation avec quatre paramètres qui tient aussi en compte l'état de contrainte dans le sol.

Pour considérer l'influence de la température, Gatmiri (1997) a proposé la surface d'état du degré de saturation suivante :

$$S_r = 1 - \left[a_s + b_s (\sigma - p_g) \right] \left[1 - \exp(c_s (p_g - p_w)) \right] \exp(d_s (T - T_0)) \quad \text{Eq. 3-16}$$

où a_s , b_s , c_s , d_s , f_s sont des constantes et T_0 est la température de référence. La Figure 3-2 présente un exemple de surface d'état du degré de saturation avec une valeur de $\sigma - P_g = 1,1$

MPa. Les paramètres seront présentés dans les applications numériques du modèle dans ce chapitre.

Tableau 3-1 : Les formules mathématiques des Courbes de rétention

Référence	Courbe de rétention	Les paramètres
Williams et al. 1983	$\ln \psi = a + b \ln \theta_w$	a, b
Gardner 1958	$\theta_w = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{1 + a \psi^b}$	a, b, θ_r
Brooks et Corey 1964	$\theta_w = \theta_r + (\theta_s - \theta_r)(a/\psi)^b$	a, b, θ_r
McKee et Bumb 1984	$\theta_w = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) \exp((a - \psi)/b)$	a, b, θ_r
McKee et Bumb 1987	$\theta_w = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{1 + \exp((\psi - a)/b)}$	a, b, θ_r
Fredlund et Xing 1994	$\theta_w = \frac{\theta_s}{[\ln(e + (\psi/a)^b)]^c}$	a, b, c
Van Genuchten 1980	$\theta_w = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + a \psi^b]^c}$	a, b, c, θ_r
Fredlund et Xing 1994	$\theta_w = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[\ln(e + (\psi/a)^b)]^c}$	a, b, c, θ_r

Où θ_w est la teneur en eau, ψ est la succion, a, b, c sont les paramètres liés aux propriétés du matériau, θ_r est la teneur en eau résiduelle et θ_s est la teneur en eau en état saturé.

Tableau 3-2 : Les formules mathématiques des Surfaces d'état du degré de saturation

Référence	Surface d'état de degré de saturation	Les paramètres
Thomas et He . 1995	$S_r = a \text{Th}(b(P_g - P_w))$	a, b
Gens et al. 1997	$S_r = \frac{1}{[1 + ((P_g - P_w)/P_0)^{1/(1-a)}]^a}$	a, P_0
Thomas et He . 1997	$S_r = \frac{a((P_w - P_g)/P_w + b)}{n}$	a, b
Lloret et Alonso 1985	$S_r = a - [1 - \exp(-b(P_g - P_w))] [c + d(\sigma - P_g)]$	a, b, c, d
Lloret et Alonso 1985	$S_r = a - \tanh(b(P_g - P_w))(c + d(\sigma - P_g))$	a, b, c, d

Où S_r est le degré de saturation, P_g est la pression de gaz, P_z est la pression d'eau, σ est la contrainte, a, b, c, d sont les paramètres liés aux propriétés du matériau, T est la température et T_0 est la température de référence.

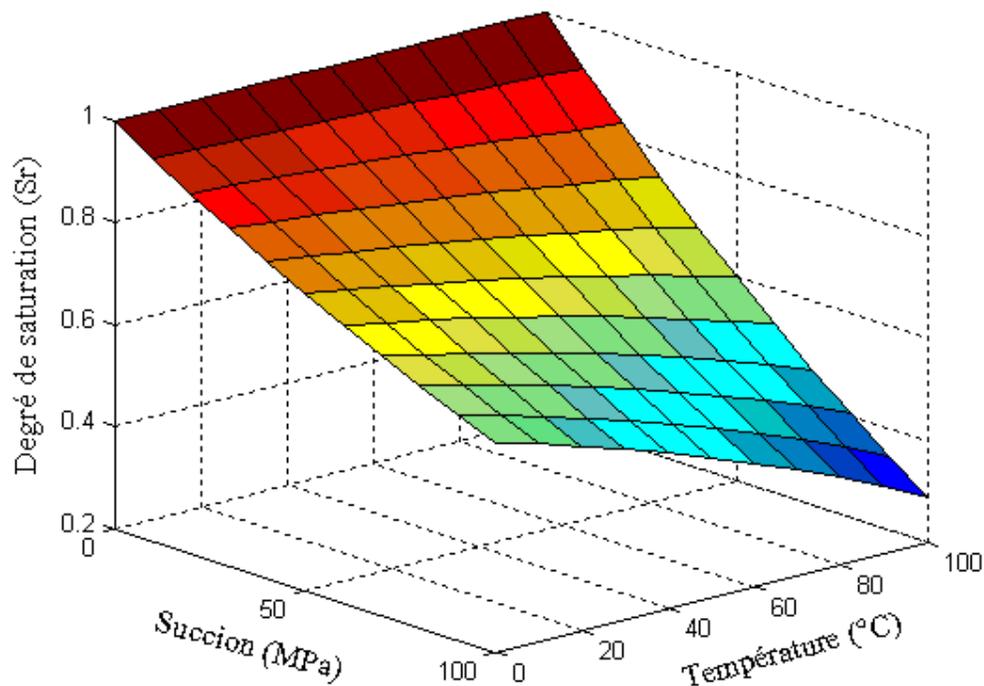


Figure 3-2: Surfaces d'état du degré de saturation ($\sigma\text{-}P_g = 1,19 \text{ MPa}$)

3.2.3 Conservation de la masse d'eau

Dans un milieu poreux non saturé, l'eau s'écoule dans les deux phases, liquide et gazeuse. L'équation de conservation de la masse pour l'eau liquide, dans le cas où il n'y aurait pas de source extérieure, peut s'écrire :

$$\frac{\partial(\rho_w \theta_w)}{\partial t} = -\text{div}(\rho_w U) - Q_w \quad \text{Eq. 3-17}$$

et l'équation de conservation de la masse pour la vapeur est :

$$\frac{\partial(\rho_v \theta_v)}{\partial t} = -\text{div}(\rho_v V_v) + Q_w = -\text{div}(\rho_w V) + Q_w \quad \text{Eq. 3-18}$$

avec

$$\theta_w = nS_r \quad \text{Eq. 3-19}$$

$$\theta_v = n - \theta_{vw} = n(1 - S_r) \quad \text{Eq. 3-20}$$

où Q_w représente la quantité de transfert d'eau en liquide et vapeur. L'équation de conservation de la masse d'eau peut être obtenue par addition de ces équations (Gatmiri 1995-1997) :

$$\frac{\partial(\rho_w \theta_w + \rho_v \theta_v)}{\partial t} = -\text{div}(\rho_w (U + V)) \quad \text{Eq. 3-21}$$

U, V sont la vitesse d'écoulement de l'eau et de la vapeur d'eau qui seront présentés dans les paragraphes suivants.

3.2.3.1 Transfert de vapeur

Le flux de densité de vapeur dans le sol non saturé sous le gradient de la pression de vapeur s'écrit (Penman, 1940 ; Rollins et al. 1954 ; Philip et De Vries 1957) :

$$q_{vap} = -D_0 \cdot \nu \cdot \alpha \cdot a \cdot \nabla \rho_v \quad \text{Eq. 3-22}$$

avec

q_{vap} , le flux de densité de la vapeur en kgm/m^2s ,

D_0 , la diffusivité moléculaire de la vapeur d'eau dans l'air en m^2/s ,

ν , le facteur de flux de masse introduit afin de prendre en compte le transfert de masse dans le milieu provenant de la différence des conditions aux limites du gaz et de la vapeur d'eau. Cela se traduit par le rapport $P_g / (P_g - P_v)$ où P_v est la pression partielle de la vapeur d'eau et P_g est la pression de gaz. Dans des conditions thermiques normales des sols, cette valeur est souvent proche de un,

α , la tortuosité, ce paramètre fait intervenir l'effet du ralentissement du flux de vapeur passant au travers du réseau capillaire tortueux qui se forme entre les grains du sol dans le milieu poreux non saturé,

a , la teneur volumique en air du sol, $a = \theta_v = n(1 - S_r)$, où n est la porosité du milieu et S_r est le degré de saturation en eau,

ρ_v le poids spécifique de la vapeur d'eau en Mg/m^3 , où en faisant l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique, peut s'écrire :

$$\rho_v = \rho_0 h \quad \text{Eq. 3-23}$$

où ρ_0 est la densité de la vapeur d'eau saturée exprimée en Mg/m^3 et h est l'humidité relative du milieu.

Tableau 3-3 : Propriétés thermiques de la vapeur (Van Wijk, 1963).

Température (°C)	D_0 (cm ² /s)	ρ_0 (Mg/m ³)
-20	0,197	1,074
-10	0,211	2,36
0	0,226	4,85
10	0,241	9,4
20	0,257	17,30
30	0,273	30,38
40	0,289	51,1

Van Wijk (1963) a proposé les valeurs expérimentales figurantes dans le Tableau 3-3 pour la diffusivité moléculaire et la densité de la vapeur d'eau saturée et aussi Geraminezad et Saxena (1986) ont proposé les relations suivantes :

$$D_0 = \frac{229 \cdot 10^{-7}}{P_g} \left(\frac{T}{273} \right)^{1,75}, \quad \text{Eq. 3-24}$$

$$\rho_0 = 10^{-6} \cdot \exp\left(19,819 - \frac{4975,9}{T}\right), \quad \text{Eq. 3-25}$$

P_g étant la pression en *bar*, T étant la température absolue en °K et D_0 est en m^2/s . Comme on peut l'examiner facilement, il y a une bonne concordance entre les formules proposées par Geraminezad et Saxena et les valeurs expérimentales de Van Wijk .

L'humidité relative h peut être exprimée en fonction du potentiel thermodynamique du milieu (Ψ) par la relation de *Kelvin* :

$$h = \exp\left(\frac{\Psi_g}{R_f T}\right), \quad \text{Eq. 3-26}$$

R_f est la constante du fluide considéré se déterminant par :

$$R_f = R / M_f, \quad \text{Eq. 3-27}$$

R est la constante universelle des gaz parfaits ($R= 8,314 \text{ J}^\circ\text{k/mole}$) et M_f est la masse molaire du fluide.

Le potentiel thermodynamique total du milieu (Ψ) peut engendrer le transfert de l'eau dans les sols non saturés. Ψ est la quantité de travail qu'il faut fournir par quantité unitaire d'eau pure pour transporter de façon réversible et isotherme une quantité infinitésimale d'eau d'un bassin d'eau pure, d'une élévation donnée et à la pression atmosphérique, jusqu'à l'eau du sol située au point à l'étude. Le potentiel total est la somme des potentiels suivants (Review Panel, 1965) :

$$\Psi = \Psi_o + \Psi_g + \Psi_m + \Psi_p \quad \text{Eq. 3-28}$$

où

Ψ_o , le potentiel osmotique (*osmotic potential*), est la quantité de travail qu'il faut fournir par quantité unitaire d'eau pure pour transporter de façon réversible et isotherme une quantité infinitésimale d'eau d'un bassin d'eau pure, d'une élévation donnée et à la pression atmosphérique, à un bassin d'eau de composition identique à l'eau du sol située au point à l'étude, mais en toute autre qualité identique à l'eau du bassin de référence ;

Ψ_g , le potentiel gravité (*gravitational potential*), est la quantité de travail qu'il faut fournir pour transporter de façon réversible et isotherme une quantité infinitésimale d'eau, de composition identique à l'eau du sol, d'un bassin d'une élévation donnée et à la pression atmosphérique, à un bassin semblable de même élévation que le point à l'étude ;

Ψ_m le potentiel capillaire ou matriciel, (*matric potential* ou *capillary potential*), est la quantité de travail qu'il faut fournir par quantité unitaire d'eau pure pour transporter de façon réversible et isotherme une quantité infinitésimale d'eau, de composition identique à l'eau du sol, d'un bassin d'une élévation et à une pression extérieure des gaz égales à celles du point à l'étude jusqu'à l'eau du sol ;

Ψ_p , le potentiel à la pression des gaz (*gas pressure potential*), il n'est tenu compte de cette composante du potentiel total que lorsque la pression extérieure des gaz diffère de la pression atmosphérique comme, par exemple, dans un tensiomètre à membrane.

On note que dans les sols non saturés, la succion totale est souvent utilisée au lieu du potentiel thermodynamique. La succion matricielle est souvent substituée par pression capillaire (Gens et Olivella, 2001) :

$$s = P_g - P_w \quad \text{Eq. 3-29}$$

où P_g est la pression d'air et où P_w est la pression d'eau.

En dérivant l'équation Eq. 3-23, le gradient de la densité de la vapeur d'eau s'écrit :

$$\nabla \rho_v = h \nabla \rho_0 + \rho_0 \nabla h \quad \text{Eq. 3-30}$$

Philip et De Vries (1957) et Farouki (1986) ont démontré que l'on peut négliger avec une bonne approximation les variations de h en fonction de la température ; l'humidité relative ne dépend donc que du potentiel capillaire ou de la teneur en eau. En faisant ces hypothèses, l'équation Eq. 3-30 peut être réécrite sous la forme de :

$$\nabla \rho_v = h \frac{d\rho_0}{dT} \nabla T + \rho_0 \frac{dh}{d\theta} \nabla \theta \quad \text{Eq. 3-31}$$

en introduisant l'équation Eq. 3-26 dans cette équation, on retrouve :

$$\nabla \rho_v = h \frac{d\rho_0}{dT} \nabla T + \frac{\rho_v g}{RT} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \nabla \theta \quad \text{Eq. 3-32}$$

et en remplaçant cette équation dans l'équation Eq. 3-22, on obtient l'expression de flux de masse de vapeur comme suit :

$$q_{vap} = -D_0 \cdot \nu \cdot \alpha \cdot a \cdot \frac{\rho_v g}{RT} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \nabla \theta - D_0 \cdot \nu \cdot \alpha \cdot a \cdot \frac{d\rho_0}{dT} h \nabla T \quad \text{Eq. 3-33}$$

Il convient de préciser que la vapeur peut traverser tout l'espace rempli d'air, alors qu'en se rapprochant à une teneur en eau du même ordre de grandeur que la porosité (n) du sol, cet espace tend vers zéro. Par ailleurs, Philip et De Vries (1957) et Preece (1975) ont proposé de tenir en compte d'un facteur nommé $(\nabla T)_a$, afin d'introduire les aspects microscopiques de flux de chaleur car les gradients de température à l'échelle microscopique sont plus importants qu'à l'échelle macroscopique. Ces arguments nous mènent à l'équation suivante :

$$V = q_{vap} / \rho_w = -\frac{D_0 \cdot \nu \cdot n \cdot \cdot}{\rho_w} \cdot \frac{\rho_v g}{RT} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \nabla \theta - \frac{D_0 \cdot \nu \cdot n}{\rho_w} \frac{(\nabla T)_a}{(\nabla T)} \frac{d\rho_0}{dT} h \nabla T \quad \text{Eq. 3-34}$$

Soit, en définissant la diffusivité thermique (D_{T_v}) et la diffusivité isothermique (D_{θ_v}) :

$$V = \frac{q_{vap}}{\rho_w} = -D_{\theta_v} \nabla \theta - D_{Tv} \nabla T \quad \text{Eq. 3-35}$$

pour les conditions non saturées ($\theta < n$) :

$$D_{Tv} = \frac{D_0}{\rho_w} \cdot v \cdot n \cdot h \frac{(\nabla T)_a}{(\nabla T)} \cdot \frac{d\rho_0}{dT} \quad \text{Eq. 3-36}$$

$$D_{\theta_v} = \frac{D_0}{\rho_w} \cdot v \cdot n \cdot \frac{\rho_0 h g}{RT} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \quad \text{Eq. 3-37}$$

et pour les conditions saturées ($\theta = n$) :

$$D_{Tv} = D_{\theta_v} = 0 \quad \text{Eq. 3-38}$$

avec (selon Ewen et Thomas, 1989) :

$$\frac{(\nabla T)_a}{(\nabla T)} = \frac{1}{3} \left[\frac{2}{1+BG} + \frac{1}{1+B(1-2G)} \right] \quad \text{Eq. 3-39}$$

$$G = \begin{cases} 0.3333 - 0.325 \frac{(n-\theta)}{n} & 0.09 < \theta < n \\ 0.0033 + 11.11 \left(0.33 - 0.325 \frac{(n-0.09)}{n} \right) \theta & 0 < \theta < 0.09 \end{cases} \quad \text{Eq. 3-40}$$

$$B = \frac{(\lambda_a + \lambda_v)}{\lambda_w} - 1 \quad \text{Eq. 3-41}$$

$$\lambda_v = D_0 v h h_{fg} \cdot \frac{d\rho_0}{dT} \quad \text{Eq. 3-42}$$

où h_{fg} est la chaleur latente de l'évaporation ($h_{fg}=24.10^5 J/kg$), λ_a est la conductivité thermique de l'air (0,0258 W/mK), λ_w est la conductivité thermique de l'eau (0,6 W/mK), λ_v est la conductivité thermique de la vapeur.

On s'intéresse à développer l'équation d'état de transfert de vapeur (Eq. 3-35) en terme de succion. Pour les solutions diluées, en négligeant l'effet de soluté sur le transfert de vapeur, on utilise la relation suivante (Gatmiri, 1997) :

$$\Psi = \Psi(\theta, T) = \frac{\sigma(T)}{\sigma_r} \Psi_r(\theta) \quad \text{Eq. 3-43}$$

où $\sigma(T)$ est la tension surfacique d'eau à la température T et σ_r et $\Psi_r(\theta)$ étant respectivement, la tension surfacique d'eau et le potentiel capillaire à une température référence. $\Psi_r(\theta)$ prend la forme suivante :

$$\Psi_r(\theta) = -\frac{P_g - P_w}{\gamma_w} \quad \text{Eq. 3-44}$$

donc, le premier terme de l'équation (Eq. 3-35) peut s'écrire :

$$D_{\theta} \nabla \theta = \left(\frac{D_0}{\rho_w} \cdot \nu \cdot n \cdot \frac{\rho_0 h g}{RT} \right) \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \nabla \theta = \left(\frac{D_0}{\rho_w} \cdot \nu \cdot n \cdot \frac{\rho_0 h g}{RT} \right) \frac{\sigma(T)}{\gamma_w \sigma_r} \nabla (P_g - P_w) \quad \text{Eq. 3-45}$$

ou :

$$D_{\theta} \nabla \theta = D_{P_v} \nabla (P_g - P_w) \quad \text{avec} \quad D_{P_v} = \frac{D_0}{\rho_w} \cdot \nu \cdot n \cdot \frac{\rho_0 h g}{RT} \frac{\sigma(T)}{\gamma_w \sigma_r} \quad \text{Eq. 3-46}$$

En substituant cette équation dans l'équation (Eq. 3-35), l'équation d'état de transfert de vapeur s'écrit :

$$V = \frac{q_{vap}}{\rho_w} = -D_{P_v} \nabla (P_g - P_w) - D_{T_v} \nabla T \quad \text{Eq. 3-47}$$

3.2.3.2 Transfert de l'eau liquide

Le transfert de l'eau dans le milieu poreux basée sur la loi de Darcy peut s'écrire:

$$U = \frac{q_w}{\rho_w} = -K_w \nabla (P) = -K_w \nabla (\Psi_m + z) \quad \text{Eq. 3-48}$$

avec

U , la vitesse d'écoulement de l'eau ;

$\nabla(P)$, le gradient de pression. il a été remplacé par le gradient du potentiel capillaire (Ψ_m) et le terme de gravitation (z) ;

K_w , la perméabilité à l'eau du milieu. Dans l'étude des sols non saturés, on suppose que la perméabilité du milieu s'écrit sous la forme générale suivante :

$$K_w = K_{rw}(S_r) \cdot K(n) / \mu_w \quad \text{Eq. 3-49}$$

où

$K(n)$, la perméabilité géométrique ou intrinsèque du milieu ;

μ_w , viscosité de l'eau (Ns/m^2) qui diminue avec l'augmentation de la température. Kaye et Laby (1973) ont proposé la relation suivante :

$$\mu_w = 0,06612.(T - 229)^{-1,562} \quad \text{Eq. 3-50}$$

où T est la température absolue en °K.

$K_{rw}(S_r)$, la perméabilité relative du sol qui dépend du degré de saturation en eau ; Quelques formules de la perméabilité à l'eau pour les sols non saturés sont résumées dans le Tableau 3-4.

Tableau 3-4 : Les formules des perméabilités à l'eau dans milieu non saturé.

Référence	Perméabilité à l'eau	Les paramètres
Irmay 1954	$K_w = K_{w0} \left(\frac{S_r - S_{ru}}{[1 - S_{ru}]} \right)^d$	$S_{ru}, d=3$
Corey 1957	$K_w = K_{w0} \left(\frac{S_r - S_{ru}}{[1 - S_{ru}]} \right)^d$	$S_{ru}, d=4$
Gardner 1958	$K_w = \left[\frac{K_{w0}}{1 + a \left (P_w - P_g) / \rho_w \right ^b} \right]$	a, b
Scott 1963	$K_w = K_{w0} [1 - n(1 - S_r)]$	
Richards et Chan 1969	$K_w = E + \frac{D}{A + B(P_g - P_w)^m + C(P_g - P_w)^n}$	A, B, C, D, E, m, n
Kovacs 1981	$K_w = K_{w0} \left(\frac{S_r - S_{ru}}{[1 - S_{ru}]} \right)^d$	$S_{ru}, d=3,5$
Gens et al 1997	$K_w = \frac{K_{w0}}{\mu_w} \cdot K_{rw}(S_r) \left(\frac{n^3}{(1-n)^2} \right) \left(\frac{(1-n_0)^2}{n_0^3} \right)$	n_0
Gatmiri 1997	$K_w = K_{w0} \cdot 10^{ae} \left(\frac{S_r - S_{ru}}{[1 - S_{ru}]} \right)^d \left(\frac{\mu_w(T_r)}{\mu_w(T)} \right)$	a, S_{ru}, d

Où S_r est le degré de saturation, S_{ru} est le degré de saturation résiduelle, P_g est la pression de gaz, P_w est la pression d'eau, $a, b, d, m, n, A, B, C, D, E$ sont les paramètres liés aux propriétés du matériau, n_0 est la porosité de référence, T est la température et T_r est la température de référence.

3.2.4 Conservation de la masse d'air

La loi de Darcy a été utilisée en géotechnique par plusieurs auteurs afin d'examiner l'écoulement de l'air à travers les sols (Barden, 1965 ; Matyas, 1967; Langfelder et al., 1968). Schneebeli (1968) affirme à partir de considérations théoriques, que la loi de Darcy peut s'appliquer de façon satisfaisante à l'étude de l'écoulement des gaz. En se basant sur la loi de Darcy pour décrire l'écoulement de l'air dans les problèmes thermo-hydro-chimio-mécanique, la vitesse de l'air dans le sol non saturé en eau prend la forme suivante :

$$V_g = \frac{q_g}{\rho_g} = -K_g \left(\nabla \left(\frac{P_g}{\gamma_g} \right) + \nabla Z \right) \quad \text{Eq. 3-51}$$

avec

- q_g , le vecteur de flux de l'air,
- ρ_g , le poids spécifique du gaz,
- P_g , la pression de l'air,
- Z , la cote du point considéré,
- K_g , la perméabilité à l'air du milieu

Concernant la perméabilité à l'air du milieu, Brooks et Corey (1964) proposent une expression en fonction du degré de saturation (S_r) :

$$K_g = 0 \quad \text{pour } (P_g - P_w) > (P_g - P_w)_d$$

$$K_g = K_d \left(1 - \frac{S_r - S_{ru}}{1 - S_{ru}} \right)^2 \left(1 - \left(\frac{S_r - S_{ru}}{1 - S_{ru}} \right)^{(2+\lambda)/\lambda} \right) \quad \text{pour } (P_g - P_w) > (P_g - P_w)_d \quad \text{Eq. 3-52}$$

où K_d est la perméabilité à l'air du sol à degré de saturation égale à zéro, S_{ru} est le degré de saturation résiduel, $(P_g - P_w)_d$, correspond au point d'entrée d'air et λ est l'indice de distribution des pores et aussi l'indice de l'influence de la taille des grains. Ici on utilisera la relation suivante (EDF, 2000a ; Olchitzky, 2002) :

$$K_g = \frac{K_{int}}{\mu_g} (1 - S_r)^2 * \left(1 - S_r^{\frac{5}{3}} \right) \quad \text{Eq. 3-53}$$

où K_{int} est la perméabilité intrinsèque.

L'équation de conservation de la masse d'air peut s'écrire:

$$\frac{\partial}{\partial t} [n\rho_a(1 - S_r + HS_r)] = -\text{div}(\rho_a V_g) - \text{div}(\rho_a HU) \quad \text{Eq. 3-54}$$

où H est le coefficient de solubilité du gaz dans l'eau ou coefficient d'Henry. De cette manière, $-\text{div}(\rho_a V_g)$ représente l'écoulement du gaz sous l'influence du gradient de pression et $-\text{div}(\rho_a HU)$ signifie le mouvement de l'air dissous dans l'eau.

3.2.5 L'équation d'équilibre de l'énergie

Dans un milieu poreux non saturé, le transfert de chaleur se fait non seulement par la diffusion mais aussi par la convection via l'eau et la vapeur d'eau. La loi de diffusion de la chaleur ou la loi de Fourier se déduit de l'écriture du potentiel de dissipation lors des processus dissipatifs de la thermodynamique des milieux continus comme :

$$q_\lambda = -\lambda \text{ grad}(T) \quad \text{Eq. 3-55}$$

où q_λ est le flux de chaleur dû à la diffusion, λ est la conductivité thermique et T est la température. Concernant λ , de nombreux travaux de recherche ont été cités par Farouki (1986). Ces études sont souvent expérimentales. D'une façon générale, on suppose que la conductivité thermique d'un sol avec l'augmentation de la teneur en eau, puisque la conductivité thermique de l'eau est plus importante que celle des grains solides (Fredlund et Rahadjo, 1993 ; Gens et al., 1998). Par exemple, Thomas et al. (1994) ont utilisé la relation suivante pour une montmorillonite :

$$\lambda = 0,62 + 3,976S_r + 2,687Ln(S_r) - 3,313(S_r)^2 \quad \lambda \text{ en W/m}^\circ\text{K} \quad \text{Eq. 3-56}$$

Il a aussi été démontré que la conductivité thermique du milieu croît avec l'augmentation de la densité sèche car à une densité sèche plus importante, il y a plus de contacts entre les grains solides (Farouki, 1986 ; Mitchell, 1993).

Dans une approche théorique, la conductivité thermique du milieu peut être calculée par la conductivité thermique de chacun des constituants du milieu. Dans le cas présent, on suppose que les flux de chaleur en constituant solide et en humidité sont parallèles donc on obtient :

$$\lambda = (1-n)\lambda_s + \theta\lambda_w + (n-\theta)\lambda_v \quad \lambda \text{ en W/m}^\circ\text{K} \quad \text{Eq. 3-57}$$

où λ_s est la conductivité thermique du squelette solide qui peut être obtenue en fonction de la densité sèche, λ_w est la conductivité thermique de l'eau et λ_v est la conductivité thermique de la vapeur d'eau.

En considérant la convection de chaleur due aux différents constituants du milieu et aussi le phénomène d'évaporation, le flux de chaleur s'écrit :

$$\underline{Q} = -\lambda \text{grad}T + [C_{pw}\rho_w U + C_{pv}\rho_w V + C_{pg}\rho_g V_g](T - T_0) + \rho_w h_{fg} V + \rho_v V_g h_{fg} \quad \text{Eq. 3-58}$$

où ρ_w , ρ_v , ρ_g sont les poids spécifiques de l'eau, de la vapeur et du gaz, et C_{pw} , C_{pv} , C_{pg} sont les chaleurs spécifiques de l'eau, de la vapeur et du gaz, T_0 est une température de référence et h_{fg} est la chaleur latente d'évaporation qui dépend de la température et de la pression comme par exemple (Formule de Regnault) :

$$h_{fg} = 335 - 2,91T \quad h_{fg} \text{ en kJ/kg} \quad \text{Eq. 3-59}$$

Toutefois, nous supposerons dans notre modèle que la chaleur de vaporisation reste constante car sa variation est faible dans les problèmes abordés.

L'équation d'équilibre de l'énergie peut s'écrire pour le mélange de phases sous l'hypothèse d'équilibre thermique locale entre les phases comme :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \text{div}Q = 0 \quad \text{Eq. 3-60}$$

où φ est la quantité volumique de chaleur du sol.

3.3 Application par le Code_Aster

La formulation thermo-hydro-mécanique mentionnée a été implantée dans le Code_Aster en tant que modèle THM-CERMES (Gatmiri 2000) à la suite d'un programme de recherche mis en œuvre au CERMES pour le compte de CIH-EDF. Dans le cadre de ce programme des différentes étapes des calculs unidimensionnels et bidimensionnels pour les sols saturés et sols non saturés ont été définies, dont la modélisation axisymétrique d'une tranche bi-matériau du sol représentant la barrière ouvragée et la barrière géologique. Ce cas test a représenté une étude de faisabilité numérique de calcul THM. Ce calcul n'a pas reproduit tous les aspects physiques du concept de stockage envisagé (concept Grande Caverne et Puits de Petit Diamètre (GCV-PPD)), mais néanmoins il montre que l'allure générale de la réponse du massif au chargement thermique a été correcte. Le choix des conditions aux limites

hydrauliques et thermiques autour de PPD n'est pas immédiat. Ce calcul a été effectué aussi pour déterminer les pressions et les températures à imposer comme conditions aux limites au bord du puits de stockage.

Dans le cadre de cette étude, la modélisation axisymétrique du puits a été effectuée dans laquelle le puits est considéré comme une tranche horizontale bi-matériau du sol non saturé représentant la barrière ouvragée (BO) et la barrière géologique (BG). Les modélisations effectuées sont :

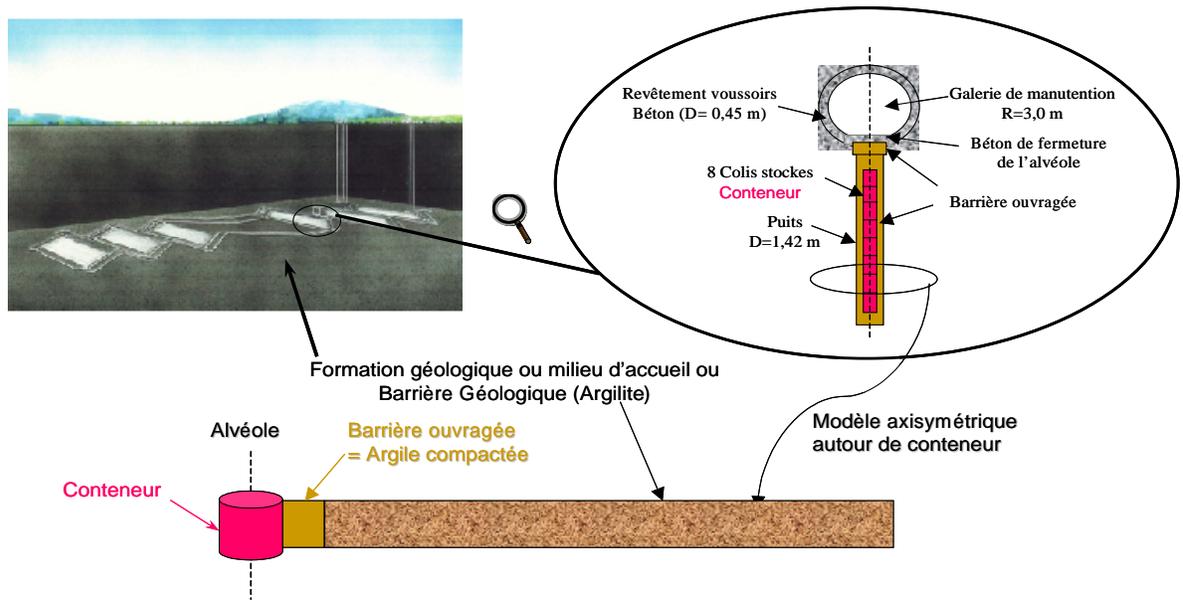


Figure 3-3 : Schéma de site de stockage des déchets nucléaires et de modèle axisymétrique

Modélisation 1 : Dans ce calcul la modélisation consiste à appliquer, sur la paroi interne de la BO, un flux thermique décroissant en fonction du temps qui est le flux produit par la chaleur dégagée par le colis. L'effet de ce flux thermique sur le comportement thermohydromécanique de l'ouvrage est étudié sur une période de 3000 ans. Dans cette modélisation l'excavation n'est pas modélisée.

Lors de l'excavation d'une galerie, l'évolution des conditions aux limites mécaniques est relativement bien connue. En revanche les conditions hydriques ne sont pas maîtrisées et on est souvent réduit à supposer que le sol demeure saturé avec une pression interstitielle nulle à la paroi. Avec les modèles non saturés, la condition hydrique est reportée du sol à l'hygrométrie de la galerie. Cette modélisation unidimensionnelle simplifiée a pour objectif la détermination de l'évolution de la succion et de la température au cours du temps sur

l'interface BO-BG, qui sera utilisé comme conditions aux limites pour la modélisation 2.

Modélisation 2 : Cette modélisation correspond aux calculs axisymétriques unidimensionnels d'une tranche horizontale du sol non saturé en modélisant l'excavation du puits, l'échauffement de la BG seule dans un cas et l'échauffement de la BG+BO dans un autre cas. Après la mise en place de la BO, la resaturation de la BO peut engendrer une importante chute de la pression effective moyenne et un risque de mise en traction de la BO est envisageable. L'emploi d'un modèle non saturé non linéaire pourrait permettre d'apporter des éclairages sur cette question et le risque de désaturation de la BG. De plus, la comparaison de la réponse de la BG sous le chargement thermique sans et avec la BO peut éclaircir le rôle de la BO. Les calculs effectués dans cette modélisation sont:

- Calcul 1D THM non saturé avec échauffement de la BG seule (suite du calcul décrit ci-dessus).
- Calcul 1D THM non saturé avec échauffement du milieu (BG+BO) après mise en place de la BO.

Dans le premier calcul, la barrière ouvragée (BO) ne sera pas présentée mais on mettra des conditions aux limites « équivalentes », issues de la modélisation 1, à l'interface BO-BG, qui est une frontière pour ce calcul. L'effet de l'excavation du puits et les déplacements induits sur le comportement thermohydromécanique par rapport à la modélisation 1, la quantification de la désaturation du terrain (BG) suite au déconfinement mécanique, la variation du degré de saturation et l'évolution de la zone non saturée sont les objectifs principaux de ce calcul.

L'emploi d'un modèle non saturé non linéaire dans les calculs de cette modélisation pourrait permettre d'apporter des éclairages sur la resaturation de la BO et le risque de mise en traction de la BO et de désaturation de la BG. La comparaison de la réponse de la BG sous le chargement thermique sans et avec la BO peut éclaircir le rôle de la BO.

Au cours de la réalisation des calculs envisagés, quelques modifications sur la source de quelques sous-routines du modèle de THM non saturé du CERMES ont été effectuées.

3.3.1 Description générale d'une coupe horizontale du sol non saturé soumise à un chargement thermique

Dans ces modélisations, une tranche de sol horizontale située à 500 mètres de profondeur a été considérée. Cette coupe horizontale de terrain est constituée d'une barrière ouvragée avec la largeur de 30 cm et de la barrière géologique avec une largeur de 200 mètres. Dans ce cas test une modélisation axisymétrique unidimensionnelle avec les matériaux non saturés

pour BO et BG a été choisie afin d'éclaircir un certain nombre de points. L'axe de symétrie est l'axe vertical de l'alvéole de stockage.

Les spécifications de ce problème ainsi que les caractéristiques de la barrière ouvragée et de la barrière géologique ont été données dans les documents de EDF (2000a, 2000b) et dans les différentes réunions avec l'EDF et l'ANDRA. Le projet a été défini sur le site de l'Est avec un milieu d'accueil d'argilite (BO). La barrière ouvragée est constituée d'un mélange compacté d'argile, de sable et de graphite.

3.3.1.1 Géométrie

Les dimensions retenues sont les suivantes (Figure 3-4) :

Rayon extérieur du modèle :	$R_{ext}=200$ m
Rayon interne à l'intrados de la barrière ouvragée :	$R_{int}=0,41$ m
Épaisseur de la barrière ouvragée :	$e=0,30$ m
Rayon excavé du PPD :	$R_{excavé}=0,71$ m

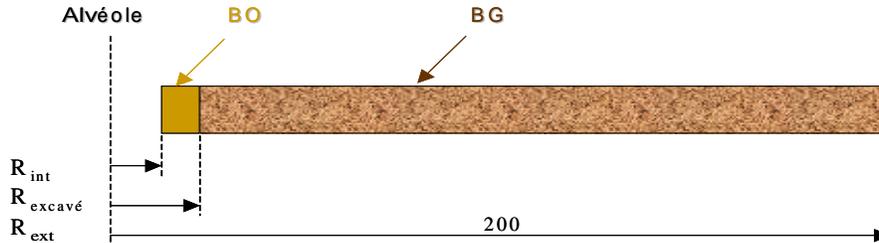


Figure 3-4 : Géométrie du problème

3.3.1.2 Conditions aux limites

Les conditions aux limites hydrauliques et thermiques considérées sont présentées dans le Tableau 3-5. Les conditions aux limites mécaniques sont choisies de la manière suivante :

- les déplacements verticaux sont bloqués sur les bords du milieu et
- les déplacements horizontaux sont nuls sur les parties gauche et droite du maillage pour la modélisation 1 et ils sont nuls sur la partie droite du maillage pour la modélisation 2.

Le côté gauche de BO (paroi du puits) est soumis à un flux thermique F en fonction du temps produit par les colis de déchets nucléaires (

Figure 3-5). L'évolution décroissante du flux thermique dans le temps est présentée dans le Tableau 3-6.

Tableau 3-5 Conditions aux limites hydrauliques et thermiques

Aux limites extérieures du modèle : $R=R_{ext}$	
Pression d'eau imposée	$P_w = -5,0$ MPa
Pression d'air imposée	$P_g = 0,1$ MPa
Température imposée	$T = 28$ °C
A l'intrados de la barrière ouvragée (BO) : $R=R_{int}$	
Flux d'eau	$\phi_w = 0$
Flux d'air	$\phi_g = 0$
Flux de chaleur	$\phi_{1t} = \phi_{1t}$ décroissant
Aux limites extérieures horizontales du modèle	
Flux d'eau	$\phi_w = 0$
Flux d'air	$\phi_g = 0$
Flux de chaleur	$\phi_{1t} = 0$

Tableau 3-6 Evolution décroissante du flux thermique produit par les colis de déchets nucléaires

Instant (seconds)	Flux thermique F
0.	150,0
31536.E4	121,0
63072.E4	95,0
94608.E4	79,0
126144.E4	66,0
157680.E4	51,5
220752.E4	33,5
283824.E4	24,0
378432.E4	16,0
473040.E4	11,0

630720.E4	8,0
946080.E4	5,0

Dans le premier calcul de la modélisation 2, les pressions d'eau et d'air et la température calculées dans la modélisation 1 sur l'interface de BO-BG sont imposées sur la frontière interne de la barrière géologique.

3.3.1.3 Conditions initiales

La succion initiale dans la barrière ouvragée est de 70 MPa. On considère qu'initialement la barrière géologique est non saturée et une succion de 5 MPa a été introduite. Les pressions de gaz sont initialisées à 0,1 MPa. La température initiale au niveau des ouvrages est prise égale à 28°C. En retenant une densité de 23,7 KN/m³, à 500 m de profondeur, la contrainte initiale isotrope au niveau des ouvrages (galerie et alvéole), atteint la valeur de 11,9 MPa environ. L'ensemble des conditions initiales et aux limites est présenté sur la

Figure 3-5.

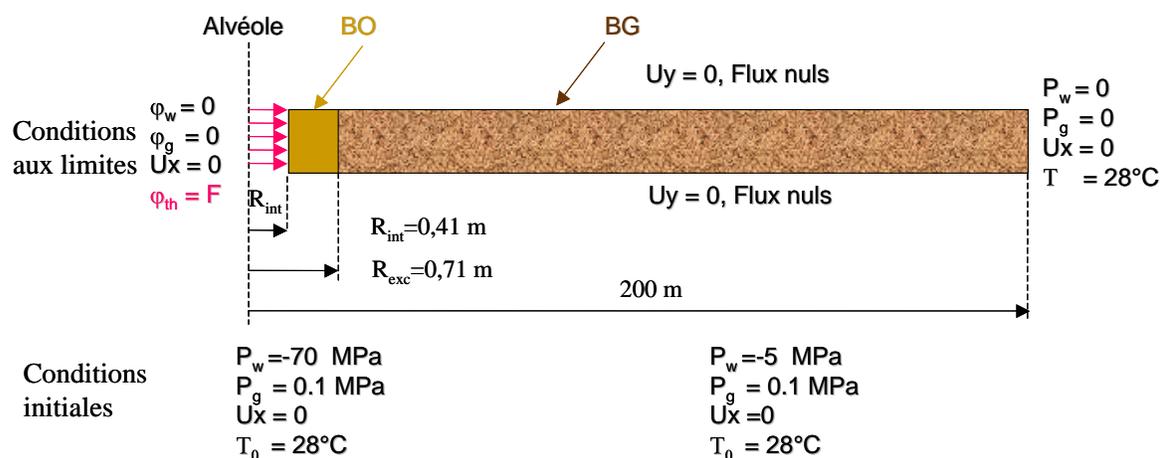


Figure 3-5 : Conditions initiales et aux limites

3.3.1.4 Propriétés hydrauliques, thermiques et mécaniques des matériaux

Dans le cadre de ce calcul, les modèles et les paramètres mécaniques, hydrauliques et thermiques suivants sont adoptés.

3.3.1.4.1 Paramètres mécaniques

L'argilite du site de l'Est est susceptible, en particulier au voisinage des ouvrages souterrains, de présenter un comportement radoucissant. Ce radoucissement est important pour l'évaluation des conditions de stabilité des ouvrages en phase d'excavation, et pour une estimation correcte des déplacements. Par contre, l'utilisation d'un modèle de comportement peut engendrer, dans certaines conditions et en fonction des algorithmes numériques utilisés, des difficultés de convergence et de calcul. Il est envisagé d'utiliser, dans un premier temps, les deux comportements suivantes :

- comportement linéaire,
- comportement non linéaire hyperbolique.

Les paramètres utilisés pour le modèle linéaire sont présentés dans le Tableau 3-7 et ceux de modèle non linéaire sont présentés dans le Tableau 3-8. Les paramètres utilisés ont été données dans les documents de EDF (2000a, 2000b). Les paramètres utilisés pour le modèle hyperbolique du comportement non linéaire sont calculés pour avoir un point de départ identique à celui du modèle linéaire. Il faut noter que les paramètres utilisés dans ce calcul pour le modèle hyperbolique du comportement non linéaire ne sont pas des paramètres réels issus des tests effectués sur le site ou sur les échantillons prélevés du site, donc les résultats représenteront seulement la tendance générale et témoignent du bon fonctionnement du modèle et de son intégration dans le Code_Aster.

Tableau 3-7 paramètres mécaniques du modèle linéaire

Barrière Ouvragée		
E	Module d'élasticité	515 MPa
K	Module de déformation volumique	286 MPa
ν	Coefficient de Poisson	0,2
ρ	Masse volumique	2200 Kg/m ³

n	Porosité	0,35
Barrière Géologique		
E	Module d'élasticité	2166 MPa
K	Module de déformation volumique	1805 MPa
ν	Coefficient de poisson	0,3
ρ	Masse volumique	2410 Kg/m ³
n	Porosité	0,14

Tableau 3-8 paramètres mécaniques du modèle non linéaire

Paramètres Mécaniques			
Paramètre	Désignation	BO	BG
K_l	Coefficient du module de chargement	399	1678
K_u	Coefficient du module de déchargement	399	1678
K_b	Coefficient du module de déformation volumique	519	3281
$1/K_s$	Compressibilité des grains	7,1 E -10	7,1 E -10
R_f	Constante	0,75	0,75
n	Exposant de la loi non linéaire	0,6	0,6
m	Exposant de la loi non linéaire	0,4	0,4
$m I$	Variation du module avec la température	0	0
ρ	Masse volumique	2200 Kg/m ³	2410 Kg/m ³
ν	Coefficient de Poisson	0,2	0,3

La surface d'état de l'indice des vides et la surface d'état du degré de saturation sont :

$$e = \frac{1 + e_0}{\left[\left(\frac{\sigma - p_g}{p_{atm}} \right) + 0,1 \left(1 - \frac{\sigma - p_g}{8 \times 10^{-6}} \right) \left(\frac{p_g - p_w}{p_{atm}} \right) \right] \exp \left[-\frac{(\sigma - p_g)}{K_b} \right] \exp \left[-2 \times 10^{-4} (T - T_0) \right]} - 1 \quad \text{Eq. 3-61}$$

$$Sr = 1 - \left[1,0 + (-2,088 \times 10^{-8})(\sigma - p_g) \right] \left[1 - \exp \left((-5 \times 10^{-9})(p_g - p_w) \right) \right] \exp \left(6 \times 10^{-3} (T - T_0) \right) \quad \text{Eq. 3-62}$$

Les Figure 3-1 et Figure 3-2 ont présenté ces surfaces.

3.3.1.4.2 Paramètres hydrauliques

Les perméabilités du massif (barrière géologique) et de la barrière ouvragée sont considérées comme fonctions de la porosité et de la saturation. Les valeurs initiales des paramètres hydrauliques à la saturation sont présentées dans le Tableau 3-9.

Tableau 3-9 Paramètres hydrauliques à la saturation

Paramètres Hydrauliques			
Paramètre	Désignation	BO	BG
$1/K_w$	Compressibilité de l'eau	5,0E-10	5,0E-10
K_{int}	Perméabilité intrinsèque	1,0E-20	1,0E-19
μ_g	Viscosité du gaz	1,8E-5	1,8E-5
μ_w	Viscosité de l'eau	1,0E-3	1,0E-3
ρ_w	Masse volumique de l'eau	1000,0	1000,0

- Perméabilités relatives

Les formules donnant les perméabilités relatives sont :

$$K_{rel_w} = \left(1 + 0,25 \left(-1 + S^{-16,66} \right)^{1,88} \right)^{-0,5} \quad \text{pour la perméabilité à l'eau de la BO}$$

$$K_{rel_w} = S^3 \quad \text{pour la perméabilité à l'eau de la BG}$$

Ces perméabilités relatives et la perméabilité à l'air (Eq. 3-53) sont présentées sur la Figure 3-6.

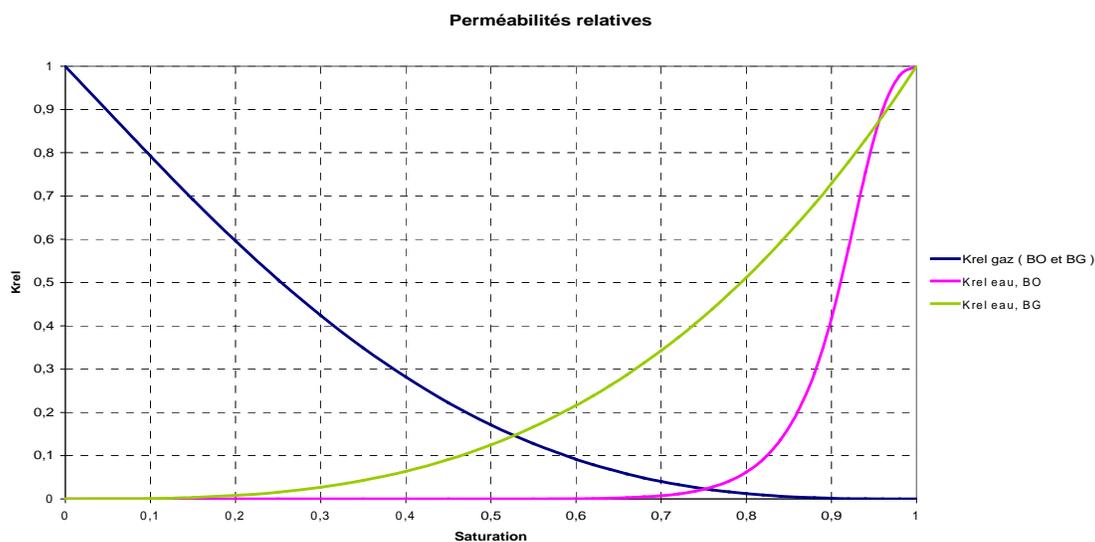


Figure 3-6 : perméabilités relatives de la BG et de la BO

3.3.1.4.3 Paramètres thermiques

Les propriétés thermiques des différents matériaux sont présentées dans le Tableau 3-10.

Tableau 3-10 Paramètres thermiques

Paramètre	Désignation	BO	BG
h_{fg}	Chaleur latente de vaporisation	2,4E6 J/Kg	2,4E6 J/Kg
λ_a	Conductivité thermique d'air	0,0258 J/m/s/°C	0,0258 J/m/s/°C
λ_s	Conductivité thermique du solide	1,77 J/m/s/°C	2,0 J/m/s/°C
λ_w	Conductivité thermique du liquide	0,6 J/m/s/°C	0,6 J/m/s/°C
C_p^s	Capacité calorifique du solide	659,0 J/Kg/°C	575,0 J/Kg/°C
C_p^w	Capacité calorifique du liquide	4180,0 J/Kg/°C	4180,0 J/Kg/°C
C_p^v	Capacité calorifique de la vapeur	1870,0 J/Kg/°C	1870,0 J/Kg/°C
C_p^a	Capacité calorifique du gaz	1000,0 J/Kg/°C	1000,0 J/Kg/°C
α_s	Coefficient de dilatation du solide	2,0E-5/°C	2,0E-5/°C
α_w	Coefficient de dilatation du fluide	1,0E-4/°C	1,0E-4/°C

3.3.1.5 Choix des pas de temps de calcul

Pour assurer la convergence des calculs, on a utilisé dans chacune des deux modélisations selon les différents modèles du comportement, linéaire ou non linéaire, les pas de temps présentés dans les Tableau 3-11 à Tableau 3-14 .

Tableau 3-11 pas de temps utilisés (modélisation 1, linéaire)

Débuts	Fins	Fin (années)	Nombre de pas de temps	Pas de temps (s)
0	3,15E7	1 an	24	1,31E6
3,15E7	3,15E8	10 ans	135	2,10E6
3,15E8	1,58E9	50 ans	50	2,52E7
1,58E9	9,46E9	300 ans	25	3,15E8
9,46E9	3,15E10	1000 ans	21	1,05E9
3,15E10	9,46E10	3000 ans	20	3,15E9

Tableau 3-12 les pas de temps utilisés (modélisation 1, non linéaire)

Débuts	Fins	Fin (années)	Nombre de pas de temps	Pas de temps (s)
0	3,15E7	1 an	20	1,58E6
3,15E7	3,15E8	10 ans	90	3,15E6
3,15E8	1,58E9	50 ans	160	2,52E7
1,58E9	9,46E9	300 ans	25	3,15E8
9,46E9	3,15E10	1000 ans	21	1,05E9
3,15E10	9,46E10	3000 ans	20	3,15E9

Tableau 3-13 Les étapes du calcul de la modélisation 2, calcul 1, cas linéaire

N°	Etapes	Début Sec.	Fin Sec.	Nbre de pas de temps	Durée
1	Condition Initiale, Excavation du puits	-2.0 E5	-1.0 E5	1	1.0E5 Sec
2	La pression de l'eau égal zéro au bord du puits	-1.0 E5	0.0	1	1.0E5 Sec
3	Calcul de la réaction aux nœuds et l'injection au bord de la BG	0.0	1.0	1	1.0 Sec
4	Déconfinement du puits à 50%	1.0	86400.0	10	1 Jour
5	Déconfinement du puits à 100%	86400.0	176400.0	11	1 Jour
6	Chargement thermique	25.92 E6	3,15E7	24	1 an
7	Chargement thermique	3,15E7	3,15E8	115	10 ans
8	Chargement thermique	3,15E8	1,58E9	200	50 ans
9	Chargement thermique	1,58E9	9,46E9	25	300 ans
10	Chargement thermique	9,46E9	3,15E10	21	1000 ans
11	Chargement thermique	3,15E10	9,46E10	20	3000 ans

Tableau 3-14 Les étapes du calcul de la modélisation 2, calcul 1, cas non linéaire

N°	Etape	Début Sec.	Fin Sec.	Nbre de pas de temps	Durée
1	Condition Initiale Excavation du puits	-2.0 E5	-1.0 E5	1	1.0E5 Sec
2	La pression de l'eau égale à zéro au bord du puits	-1.0 E5	0.0	1	1.0E5 Sec
3	Calcul de la réaction aux nœuds et l'injection au bord de la BG	0.0	1.0	1	1.0 Sec
4	Déconfinement du puits à 50%	1.0	86400.0	10	1 Jour

5	Déconfinement du puits à 100%	86400.0	176400.0	11	1 Jour
6	Chargement thermique	25.92 E6	3,15E7	20	1 an
7	Chargement thermique	3,15E7	3,15E8	90	10 ans
8	Chargement thermique	3,15E8	1,58E9	160	50 ans
9	Chargement thermique	1,58E9	9,46E9	25	300 ans
10	Chargement thermique	9,46E9	3,15E10	21	1000 ans
11	Chargement thermique	3,15E10	9,46E10	20	3000 ans

3.3.2 Résultats et Interprétation de modélisation 1

Les résultats de calculs effectués pour les comportements mécaniques linéaire et non linéaire hyperbolique sont présentés dans les paragraphes suivants.

3.3.2.1 Calcul élastique linéaire sur une tranche de 200 mètres de long

Dans la première série de calcul, en supposant les paramètres introduits dans le Tableau 3-7, le modèle du comportement élastique non linéaire [option : SURF_ETAT_NSAT (Gatmiri, 2000)] devient linéaire. Les résultats de ce calcul sont présentés sur les Figure 3-7- Figure 3-16.

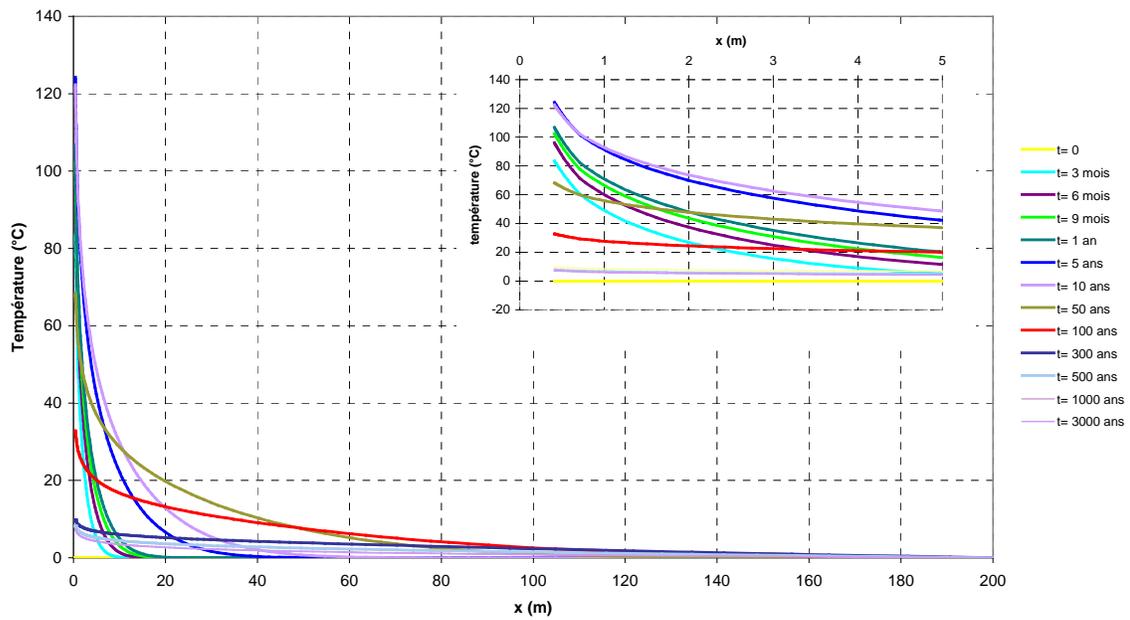
Les profils de température à différents instants sont présentés sur la Figure 3-7. L'écart de température par rapport à 28°, la température ambiante, est présenté sur cette figure. La variation de la température dans le temps pour un point donné est présentée sur la Figure 3-8. Sur les Figure 3-7 et Figure 3-8, on constate que la température au bord de la barrière ouvragée augmente jusqu'à dix ans. La valeur maximale de variation de la température est un peu plus de 120° au bord de la BO et elle diminue dans le massif. Comme on peut voir sur la Figure 3-8, la température maximum et le temps nécessaire pour atteindre cette valeur pour chaque point du massif sont différents selon la distance par rapport à la source de chaleur.

Les profils de pressions interstitielles du liquide et du gaz à différents instants sont présentés sur les Figure 3-9 et Figure 3-10. Les profils de la succion sont donnés sur la Figure 3-11. La variation de la succion pour les différents points du massif est présentée sur la Figure 3-12. Une augmentation de la pression de gaz sous l'effet couplé de l'échauffement et de la déformation jusqu'aux environs de 10 ans est constatée. Elle diminue en se propageant vers l'intérieur du massif de la BG. Le maximum de pression de gaz dans le massif de la BO

est un peu plus de 1,2 MPa. L'augmentation de pression de l'eau et la diminution de la succion jusqu'à dix ans montrent un processus de saturation de la BO.

Les profils de déplacement radial à différents instants sont tracés sur la Figure 3-13 et les profils de variation du déplacement radial dans le temps pour les quatre points situés aux différentes abscisses sont reportés sur la Figure 3-14. Le maximum de déplacement constaté est proche 0,48 mm. On observe que le déplacement horizontal est très faible initialement, sa valeur maximale au bout de trois mois est de 0,05 mm et seul le bord gauche de l'ouvrage subit ce déplacement. Ce déplacement augmente au cours du temps et atteint la valeur de 0,25 mm au bout de 10 ans du fait de la saturation (Figure 3-11). Le déplacement augmente encore au cours du temps et il y a un deuxième pic qui se déplace vers l'intérieur de l'ouvrage du fait de la vague de chaleur (Figure 3-7). Ce déplacement atteint son maximum (0,48 mm) au bout de 50 ans puis son amplitude diminue et tend à s'annuler ($t=3000$ ans).

Les profils des contraintes radiales et verticales totales sont présentés sur les Figure 3-15 et Figure 3-16 respectivement. Une mise en traction de la BO est observable sur ces figures. Ceci peut s'expliquer par le gonflement dû à la saturation et l'augmentation de la pression de gaz.



**Figure 3-7 : Profils de température le long de l'ouvrage à différents instants ;
modélisation 1, modèle linéaire**

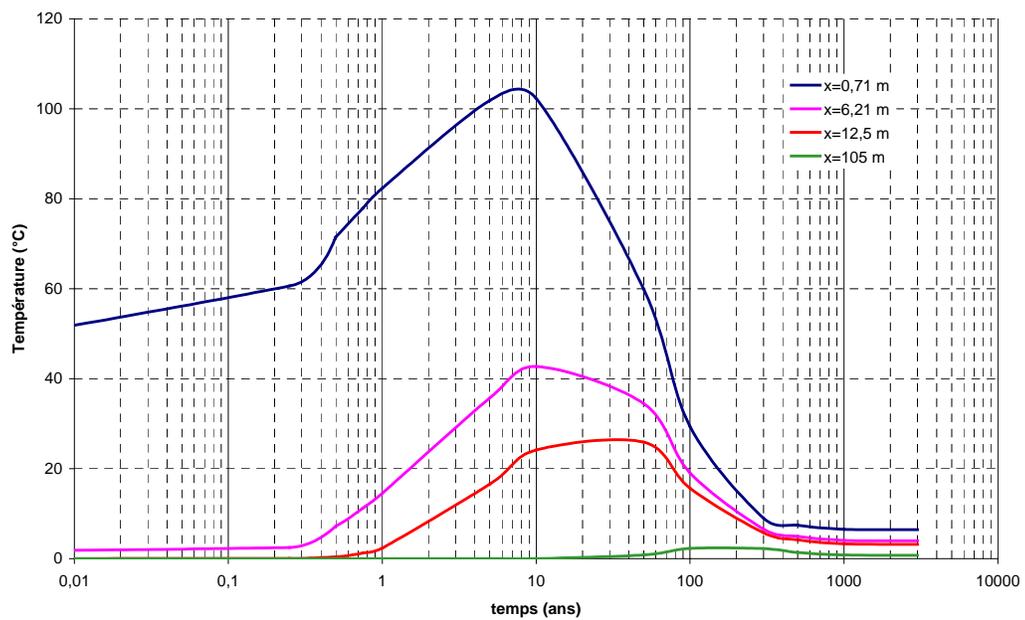


Figure 3-8 : Variation de température dans le temps; modélisation 1, modèle linéaire

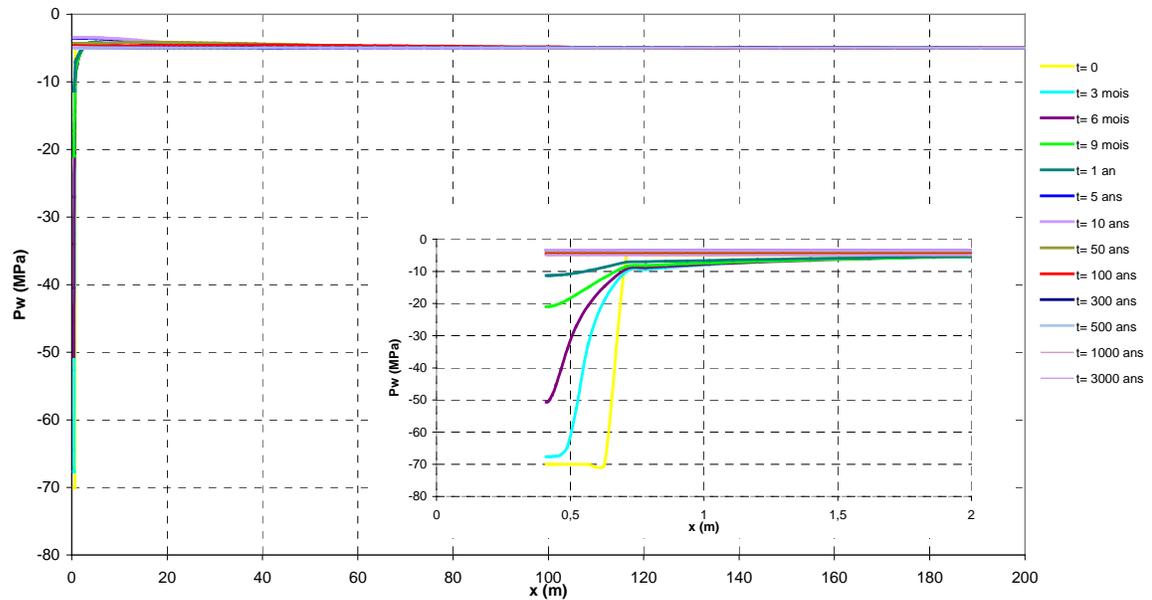


Figure 3-9 : Profils de pression interstitielle du liquide le long de l'ouvrage à différents instants; modélisation 1, modèle linéaire

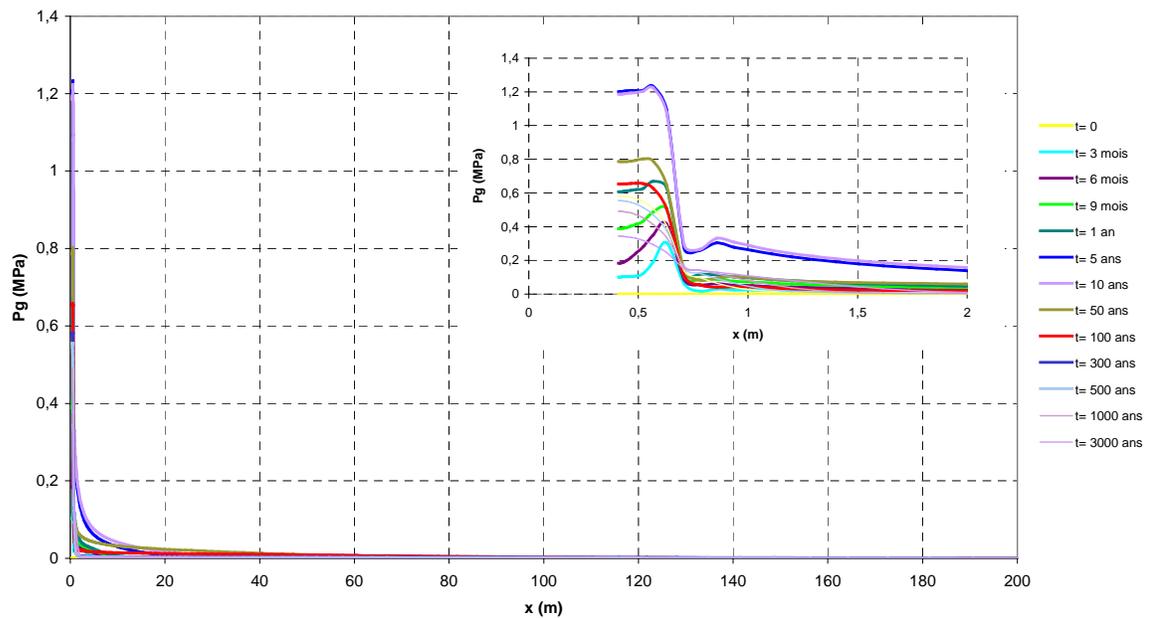


Figure 3-10 : Profils de pression de gaz le long de l'ouvrage à différents instants; modélisation 1, modèle linéaire

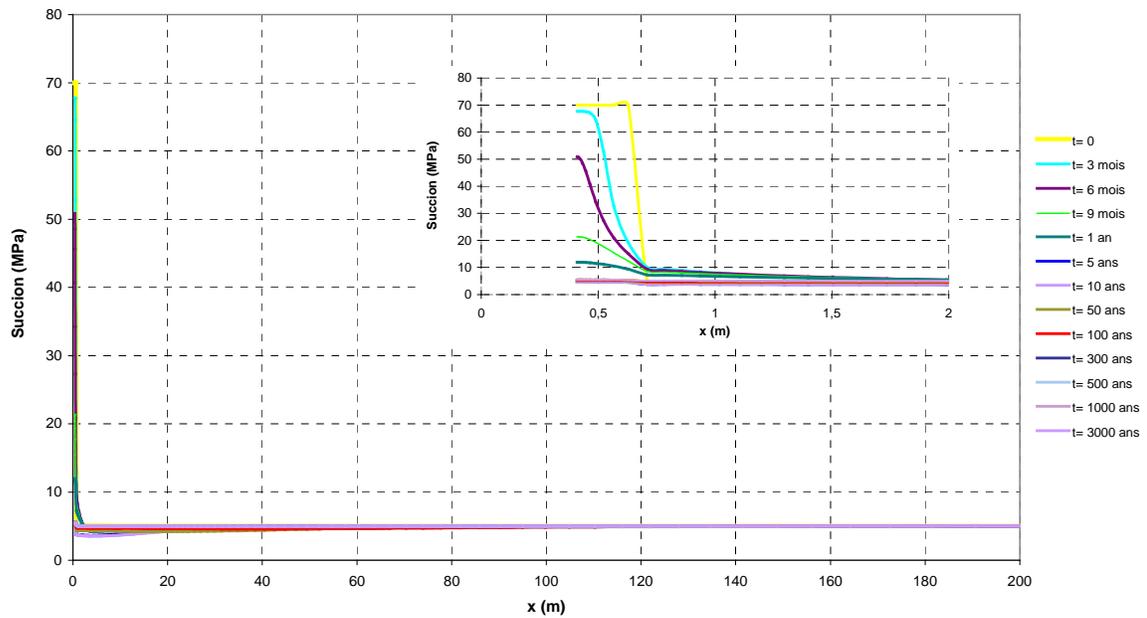


Figure 3-11 : Profils de succion le long de l'ouvrage à différents instants; modélisation 1, modèle linéaire

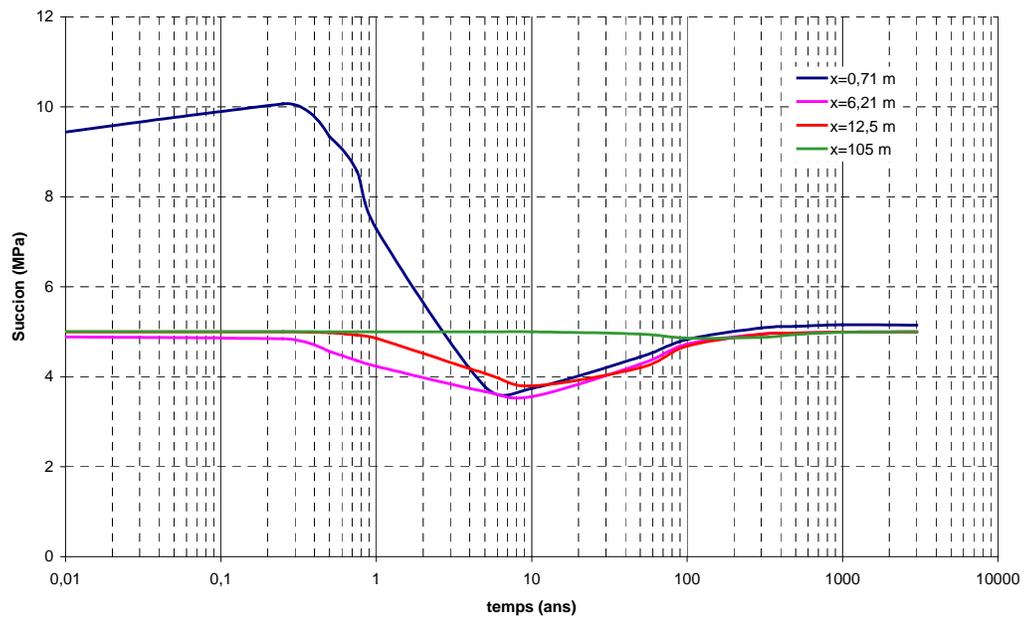
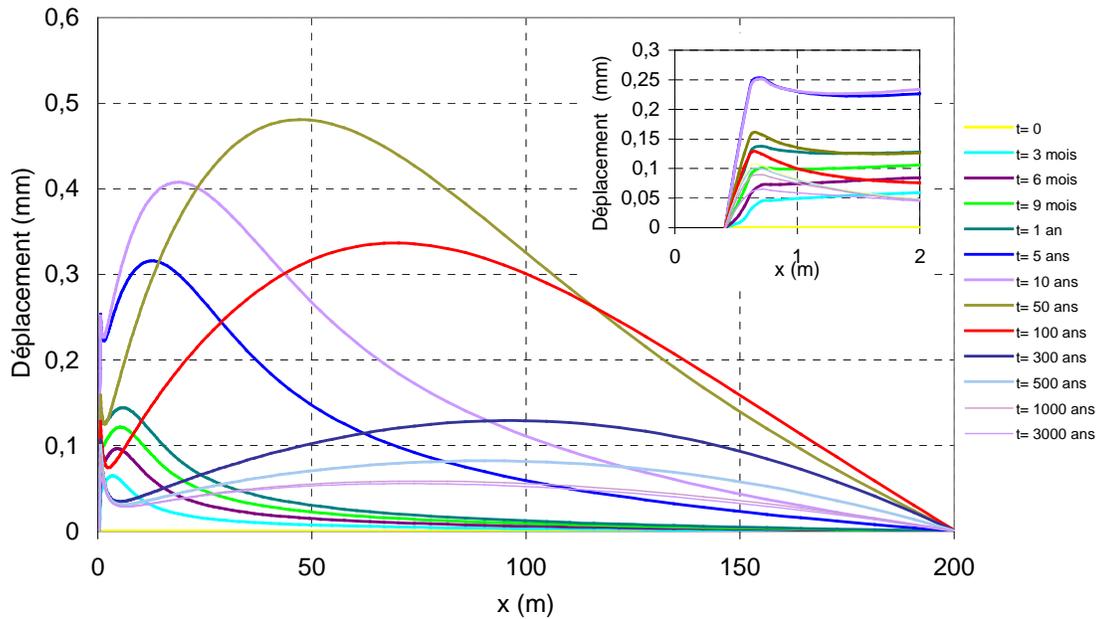
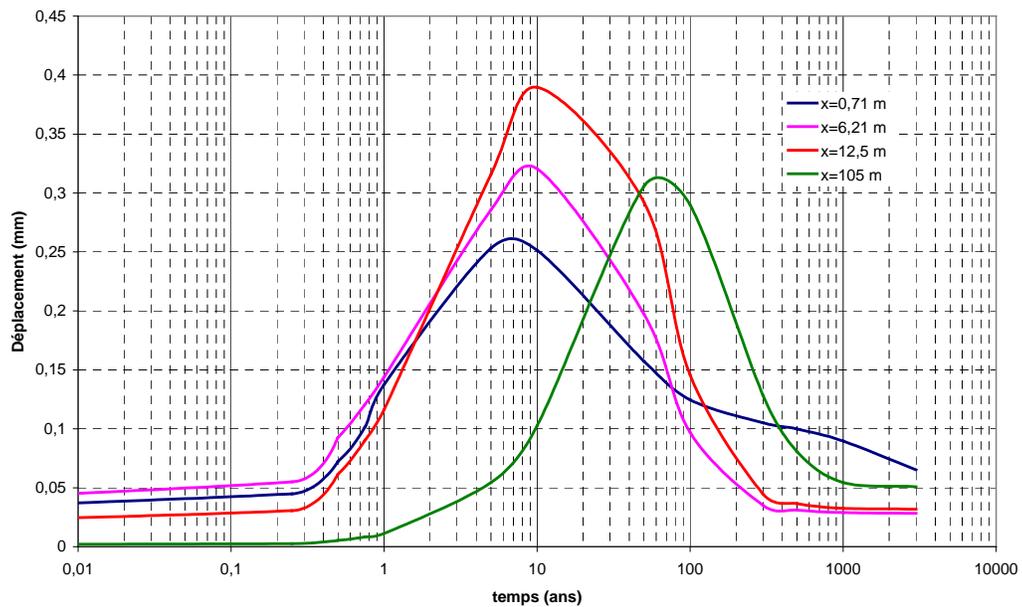


Figure 3-12 : Validation de succion dans le temps; modélisation 1, modèle linéaire



**Figure 3-13 : Profils de déplacement radial le long de l'ouvrage à différents instants ;
modélisation 1, modèle linéaire**



**Figure 3-14 : Variation de déplacement radial dans le temps; modélisation 1, modèle
linéaire**

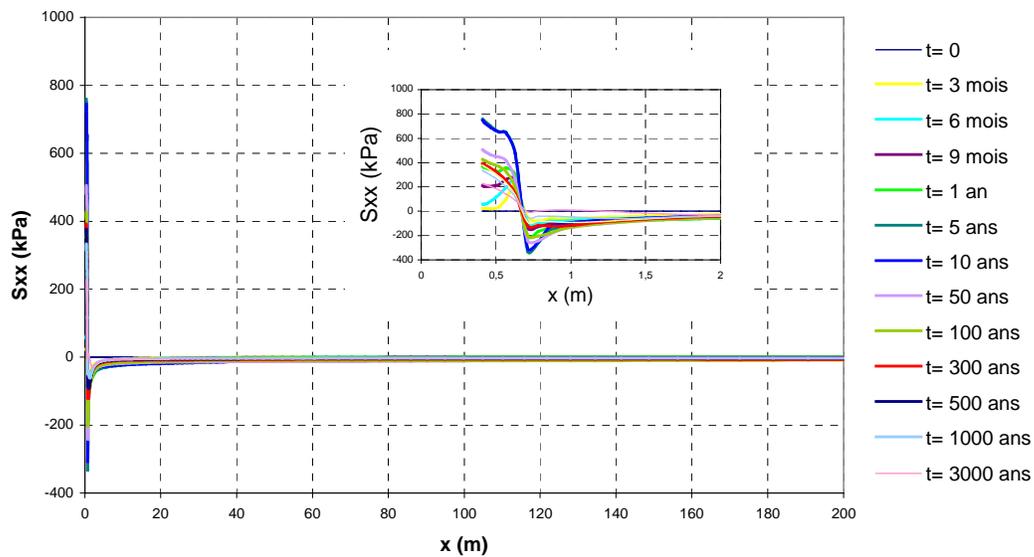


Figure 3-15 : Profils contrainte totale radiale le long de l'ouvrage à différents instants; modélisation 1, modèle linéaire

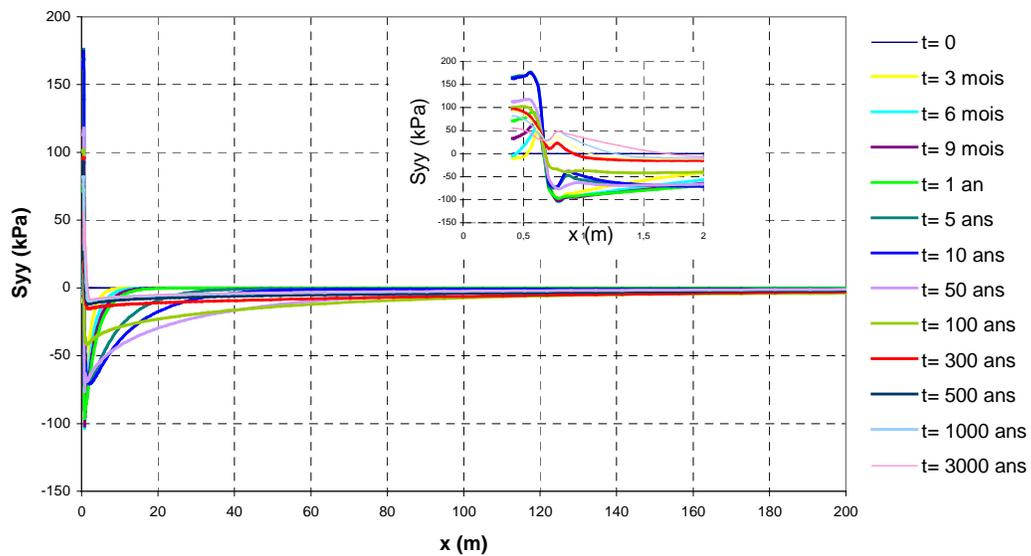


Figure 3-16 : Profils contrainte totale verticale le long de l'ouvrage à différents instants; modélisation 1, modèle linéaire

3.3.2.2 Calcul élastique non linéaire hyperbolique

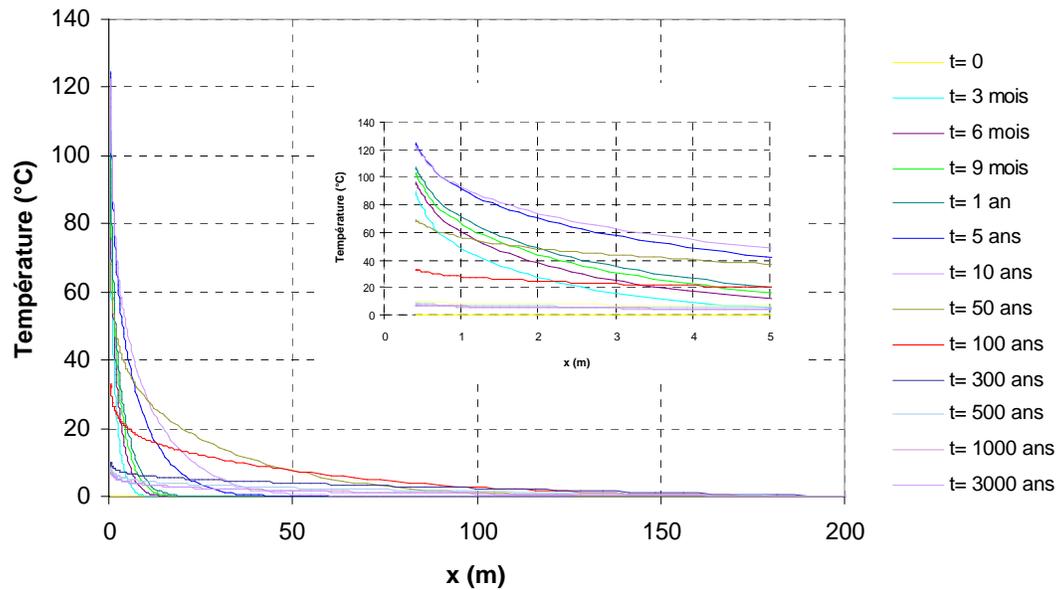
Le deuxième calcul effectué dans cette partie d'étude est un calcul dans lequel on considère le modèle élastique non linéaire hyperbolique avec la surface d'état thermique. Les paramètres utilisés pour les BO et BG sont décrits dans la partie 3.3.1.4. Les résultats du calcul sont présentés sur les Figure 3-17-Figure 3-25.

Les profils de température à différents instants sont présentés sur la Figure 3-17. La variation de la température dans le temps pour un point donné est présentée sur la Figure 3-18. Les profils de température présentés sur les Figure 3-17 et Figure 3-18 ne marquent pas une différence significative par rapport à ceux du calcul linéaire, ce qui confirme que la cinématique du thermique n'est pas trop affectée par le comportement mécanique.

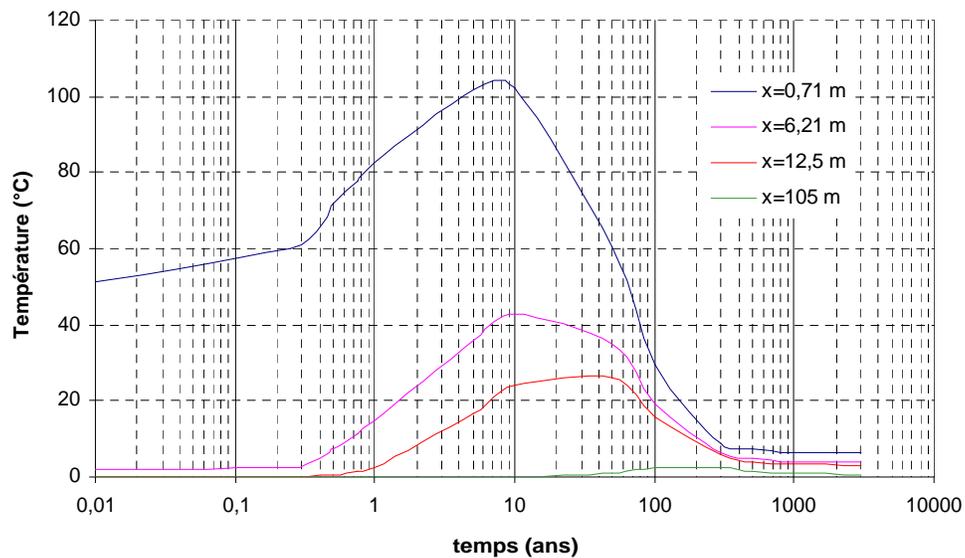
Les profils de pressions interstitielles du liquide et d'air à différents instants sont présentés sur la Figure 3-19 et Figure 3-20. Les profils de la succion sont présentés sur la Figure 3-21. On y observe une différence par rapport à ceux du calcul précédent. Le temps de saturation est plus long dans ce cas qui peut être dû à une pression plus élevée par rapport au cas précédent.

Les variations de déplacement radial à différents instants sont reportées sur la Figure 3-23 et les variations du déplacement dans le temps pour les différents points du massif sont présentées sur la Figure 3-24. Le maximum de déplacement engendré dans le massif est 2,5 mm. Il faut noter qu'on trouve le maximum de déplacement dans la BO (2,5 mm) au bout de dix ans. Le maximum de déplacement dans la BG est du même ordre de grandeur que celui du cas linéaire et il est atteint dans le même temps. Avoir un maximum de déplacement dans la BO au lieu de BG (cas linéaire) semble être plus logique dû au gonflement et à la dilatation thermique bien que pour avoir les valeurs plus réelles, les caractéristiques du sol doivent être déterminés à partir d'expérimentation.

Les profils des contraintes radiales le long de la tranche à différents instants sont présentés sur la Figure 3-25. Les contraintes sont en traction dans la barrière ouvragée avec les valeurs supérieures par rapport au cas linéaire du fait de la déformation plus élevées dans ce cas.



**Figure 3-17 : Profils de température le long de l'ouvrage à différents instants ;
modélisation 1, modèle non linéaire**



**Figure 3-18 : Variation de température dans le temps; modélisation 1, modèle non
linéaire**

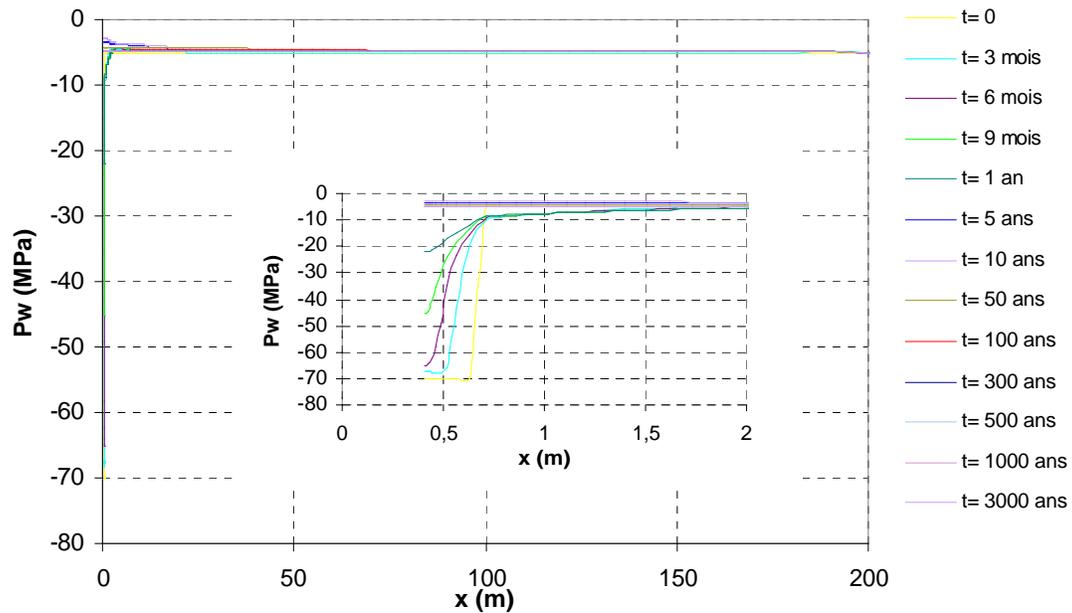


Figure 3-19 : Profils de pression interstitielle du liquide le long de l'ouvrage à différents instants; modélisation 1, modèle non linéaire

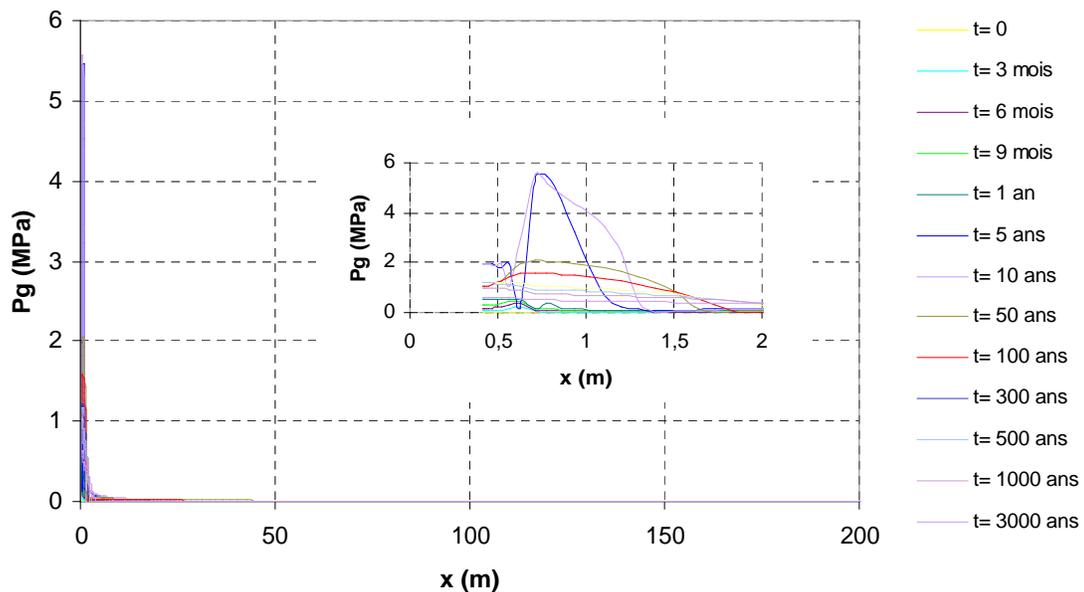


Figure 3-20 : Profils de pression de gaz le long de l'ouvrage à différents instants; modélisation 1, modèle non linéaire

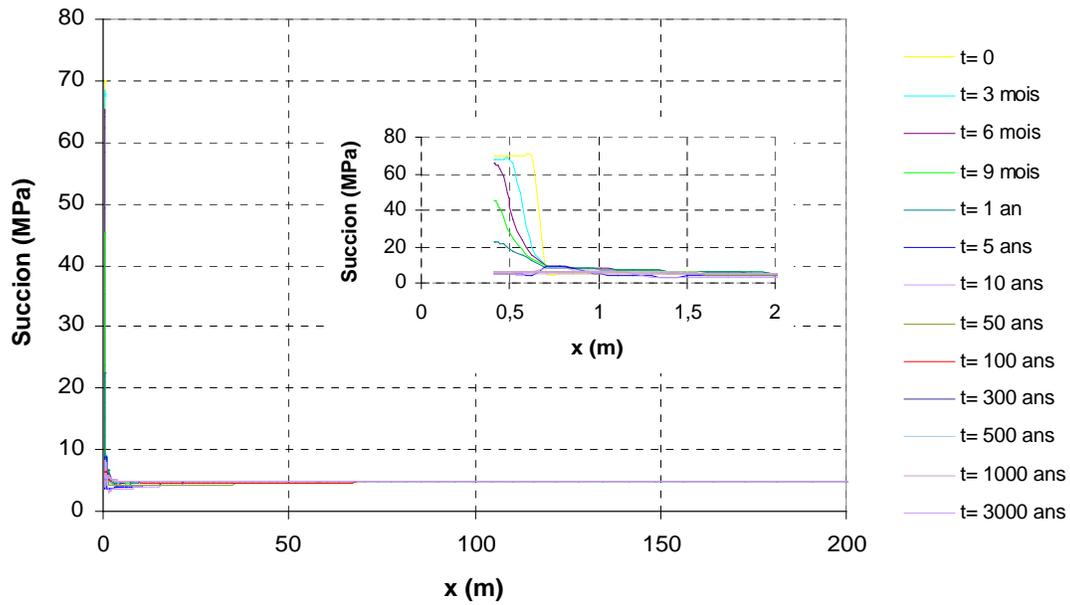


Figure 3-21 : Profils de succion le long de l’ouvrage à différents instants; modélisation 1, modèle non linéaire

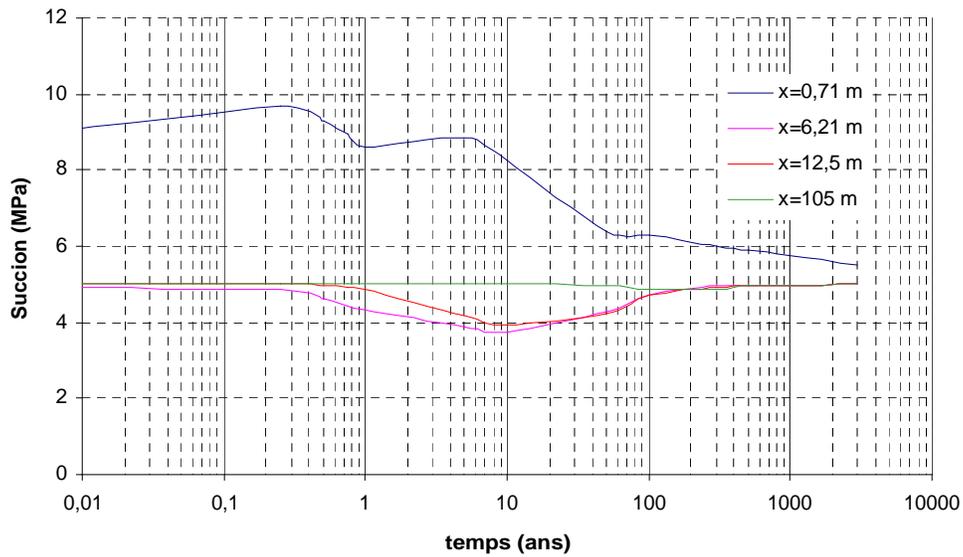


Figure 3-22 : Variation de succion dans le temps; modélisation 1, modèle non linéaire

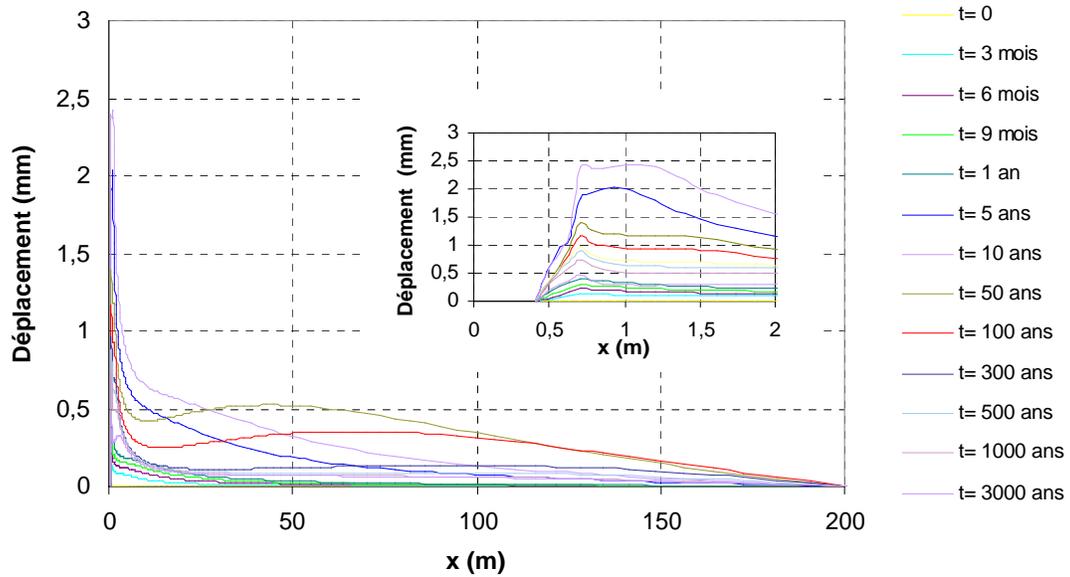


Figure 3-23 : Profils de déplacement horizontal le long de l'ouvrage à différents instants ; modélisation 1, modèle non linéaire

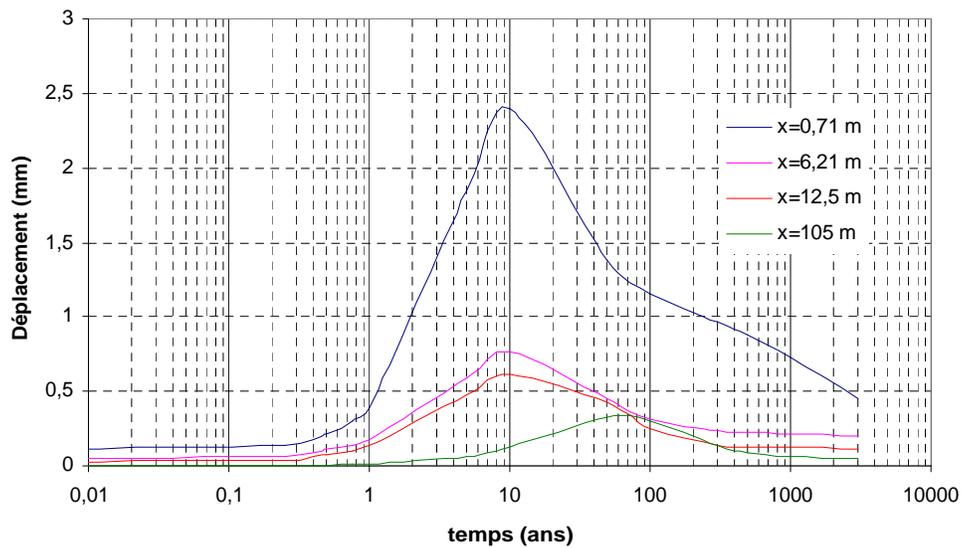


Figure 3-24 : Variation de déplacement radial dans le temps; modélisation 1, modèle non linéaire

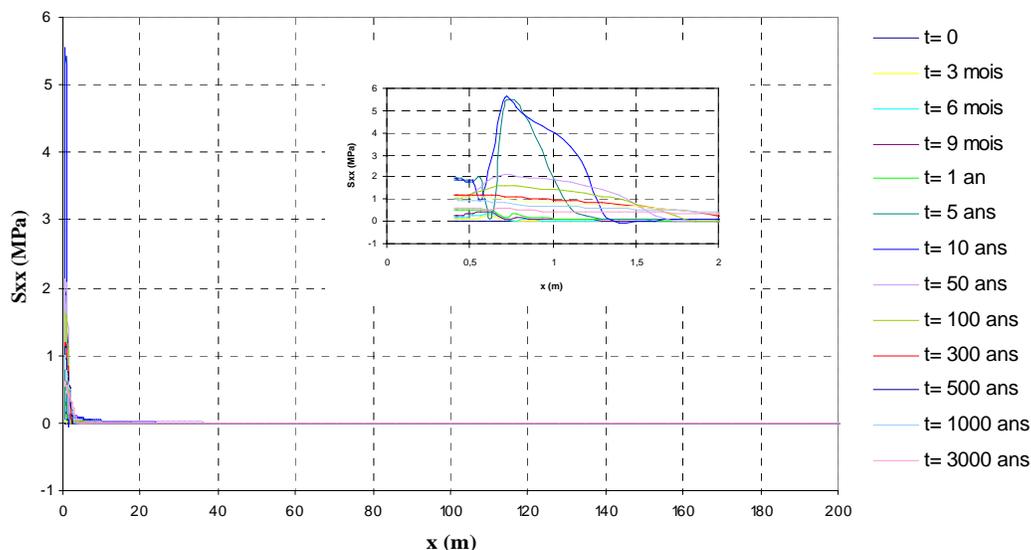


Figure 3-25 : Variation de contrainte totale radiale le long de l'ouvrage à différents instants; modélisation 1, modèle non linéaire

3.3.3 Résultats et Interprétation de la modélisation 2

Cette modélisation correspond aux calculs axisymétriques unidimensionnels d'une tranche horizontale du sol non saturé en modélisant l'excavation du puits, et l'échauffement de la BG seule à la suite de l'excavation et l'échauffement de la BG+BO après mise en place de BO. Les calculs effectués dans cette modélisation sont:

1. Calcul 1

- a. Calcul 1D THM non saturé de l'excavation par un déconfinement progressif du puit pour lequel les conditions aux limites hydriques proviennent de l'équilibre hygrométrique entre le premier élément de terrain et l'intérieur du puit.
- b. Calcul 1D THM non saturé avec échauffement de la BG seule, suite du calcul décrit ci-dessus.

Dans la deuxième partie du calcul 1, la barrière ouvragée (BO) ne sera pas présentée mais on mettra des conditions aux limites « équivalentes », issues de la modélisation 1, à l'interface BO-BG, qui est une frontière pour ce calcul. L'effet de l'excavation du puits et les déplacements induits sur le comportement thermohydromécanique par rapport à la modélisation 1, la quantification de la désaturation du terrain (BG) suite au déconfinement mécanique, la variation du degré de saturation et l'évolution de la zone non saturé sont les objectifs principaux de ce calcul.

2. Calcul 2

Le calcul 2 porte sur la modélisation axisymétrique unidimensionnel d'une tranche horizontale bi-matériau du sol non saturé en modélisant l'excavation du puits dans la barrière géologique et la mise en place de la barrière ouvragée et des colis. Ce calcul peut présenter un cas unidimensionnel simplifié pour éclaircir les effets de l'excavation et de la présence de la barrière ouvragée. Le calcul 2 a été effectué en trois étapes. Le creusement de 71 cm de la barrière géologique a été effectué pendant la première étape. La deuxième étape au cours de laquelle la barrière ouvragée est construite a duré dix mois. Le chargement thermique a été imposé durant la troisième étape. Comme dans le cas de la modélisation 1, un flux thermique décroissant en fonction du temps qui est le flux produit par la chaleur dégagée par les colis, est imposé sur la paroi interne de la BO.

L'emploi d'un modèle non saturé non linéaire dans les calculs 1 et 2 de la modélisation 2 pourrait permettre d'apporter des éclairages sur la resaturation de la BO. Le rôle de la BO, la resaturation et le risque de mise en traction de la BO et de désaturation de la BG sont les aspects intéressants à étudier par la comparaison de la réponse de la BG sous le chargement thermique sans et avec la BO (Calcul 1 et calcul 2).

Pour chaque modélisation deux calculs ont été effectués en utilisant le modèle THM non saturé de CERMES sur une longueur de 200 mètres :

- 1-un calcul élastique linéaire,
- 2-un calcul élastique non linéaire.

3.3.3.1 Calcul 1, modèle élastique linéaire

Dans cette série de calcul, les paramètres introduits dans le Tableau 3-7 sont utilisés. Comme il a été mentionné dans le paragraphe précédent, en utilisant ces paramètres, le

modèle de comportement élastique non linéaire devient linéaire. Les résultats de ce calcul sont présentés sur les Figure 3-26- Figure 3-34. Les étapes de calcul sont indiquées dans le Tableau 3-13.

Les profils de déplacement radial à différents instants sont tracés sur la Figure 3-26 et les profils de variation du déplacement radial dans le temps pour les quatre points situés aux différentes abscisses ($x=0,71$, $x=6,21$, $x=12,5$, $x=125$) sont reportés sur la Figure 3-27. Le maximum de déplacement constaté est autour de $-2,5$ mm qui a été engendré par l'excavation. Le maximum de déplacement dû uniquement au chargement thermique est environ de $0,3$ mm. Ce déplacement est obtenu par la différence entre les profils de déplacement aux instants $t = 2$ jours et $t = 50$ ans.

Les profils de température à différents instants sont présentés sur la Figure 3-28. L'écart de température par rapport à 28° , la température ambiante, est présenté sur cette Figure. La variation de la température dans le temps pour un point donné est présentée sur la Figure 3-29. La valeur maximale de la température, issue de la modélisation 1, imposée au bord de la BG est à peu près 100° et elle diminue dans la BG on peut voir sur la Figure 3-29 ; la température maximum et le temps nécessaire pour atteindre cette valeur pour chaque point du massif sont différents selon la distance par rapport de la source de chaleur. Ces résultats sont extrêmement proches de ceux obtenus dans la modélisation 1. Ces résultats montrent que l'excavation n'affecte pas la cinétique de la température, ce qui n'est pas étonnant.

Les profils de pressions interstitielles du liquide à différents instants sont présentés sur la Figure 3-30. Les profils de la succion sont donnés sur la Figure 3-31. La variation de la succion pour les différents points du massif est présentée sur la Figure 3-32. On observe une zone de désaturation marquée autour de la zone excavée, étendue jusqu'à 50 mètres dans le massif de la BG. Ces résultats ne sont pas semblables à ceux obtenus pour la modélisation 1. L'augmentation de la succion dans cette zone peut être engendrée par le drainage de l'eau par le puits et accentuée par la cinétique de la température.

Les profils des contraintes radiales et verticales totales sont présentés sur les Figure 3-33 et Figure 3-34 respectivement. Les valeurs des contraintes totales verticales sont comprise entre $-11,7$ MPa et $-12,4$ MPa. Les profils de ces contraintes ne changent pas d'une manière significative. Les profils des contraintes radiales ont une allure tout à fait différente par rapport à ceux de la modélisation 1, sous l'effet de l'excavation qui a engendré des déplacements radiaux.

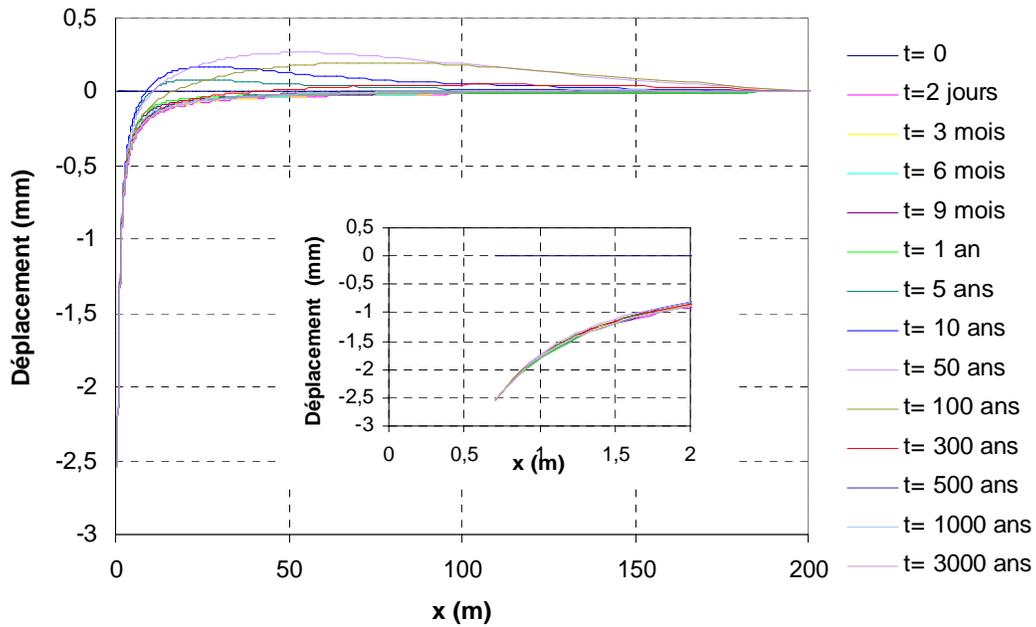


Figure 3-26 : Profils de déplacement horizontal le long de l'ouvrage à différents instants; modélisation 2, modèle linéaire

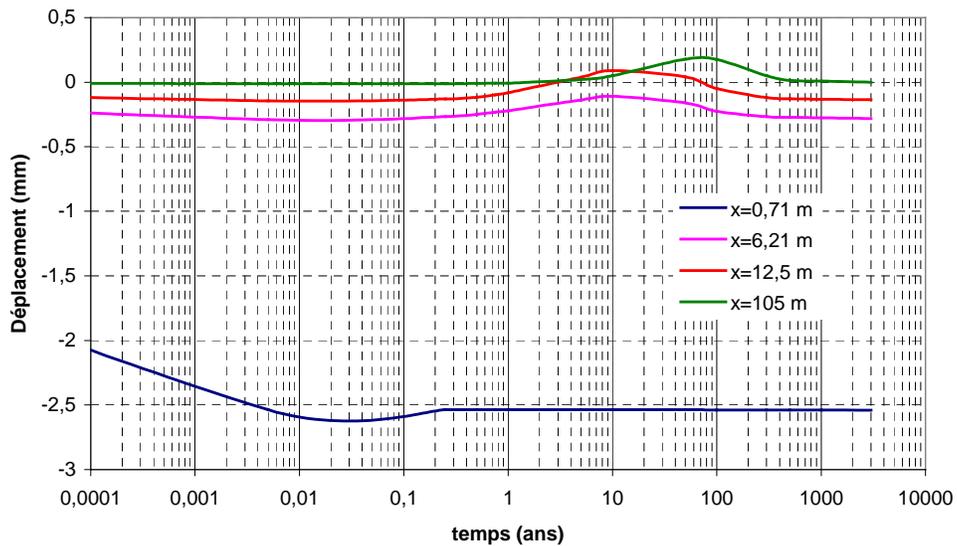
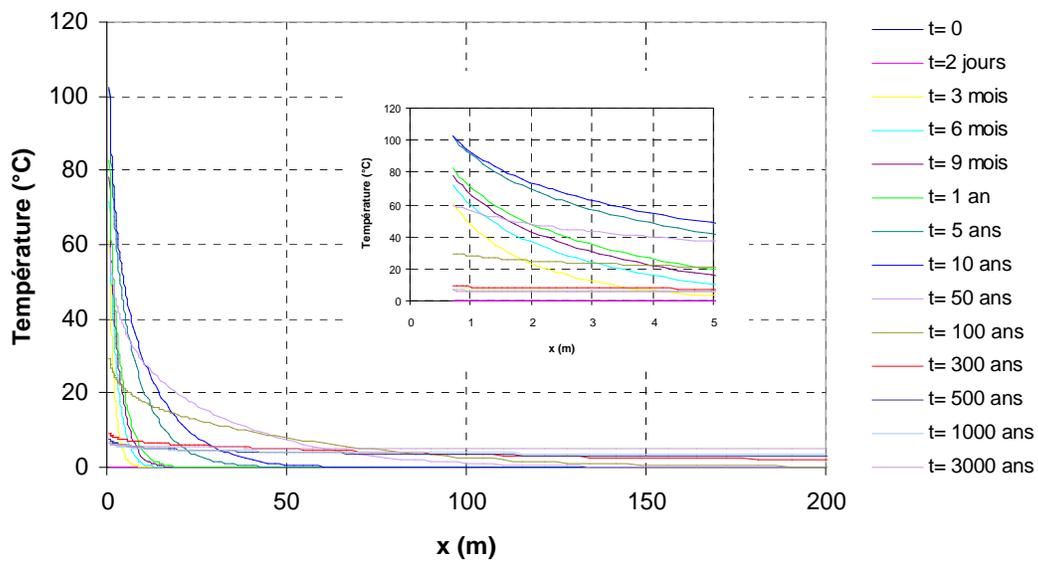


Figure 3-27 : Variation de déplacement radial dans le temps ; modélisation 2, modèle linéaire



**Figure 3-28 : Profils de température le long de l’ouvrage à différents instants ;
modélisation 2, modèle linéaire**

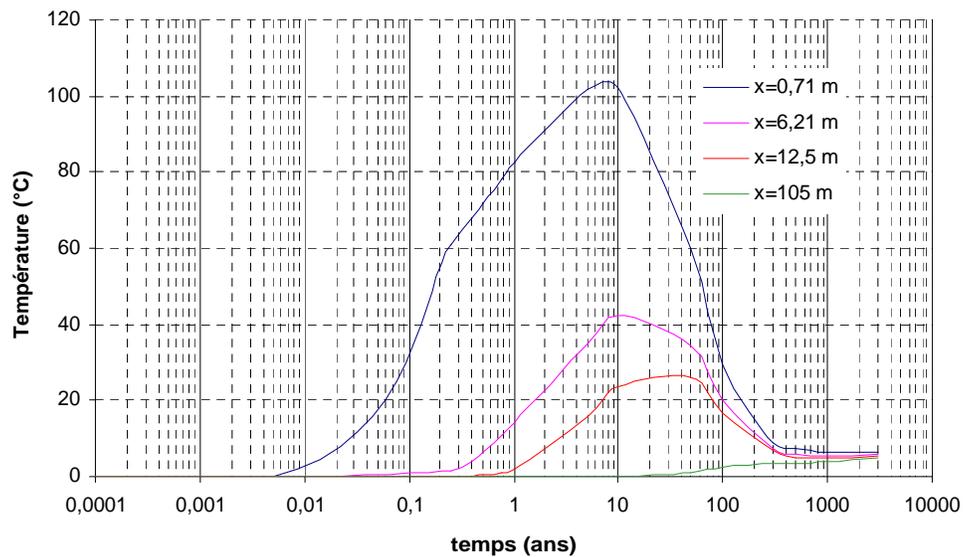


Figure 3-29 : Variation de température dans le temps; modélisation 2, modèle linéaire

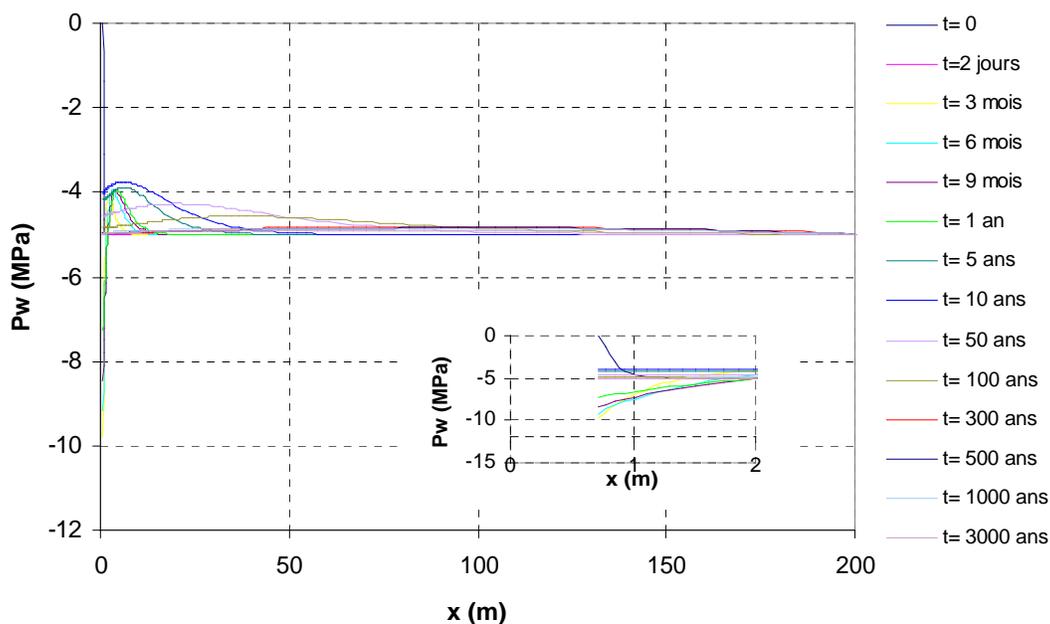


Figure 3-30 : Profils de pression interstitielle du liquide le long de l'ouvrage à différents instants ; modélisation 2, modèle linéaire

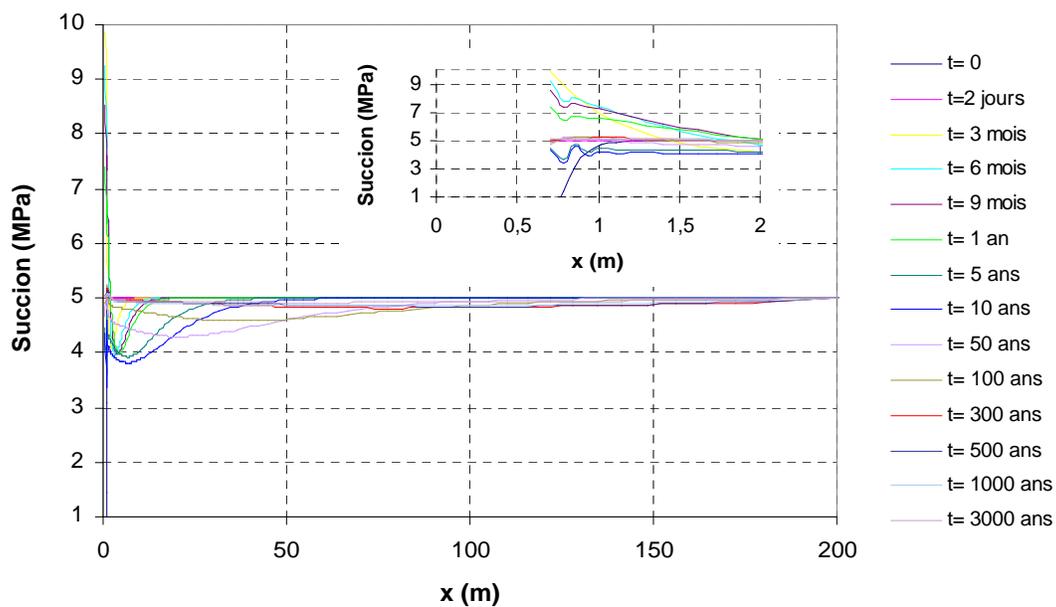


Figure 3-31 : Profils de succion le long de l'ouvrage à différents instants ; modélisation 2, modèle linéaire

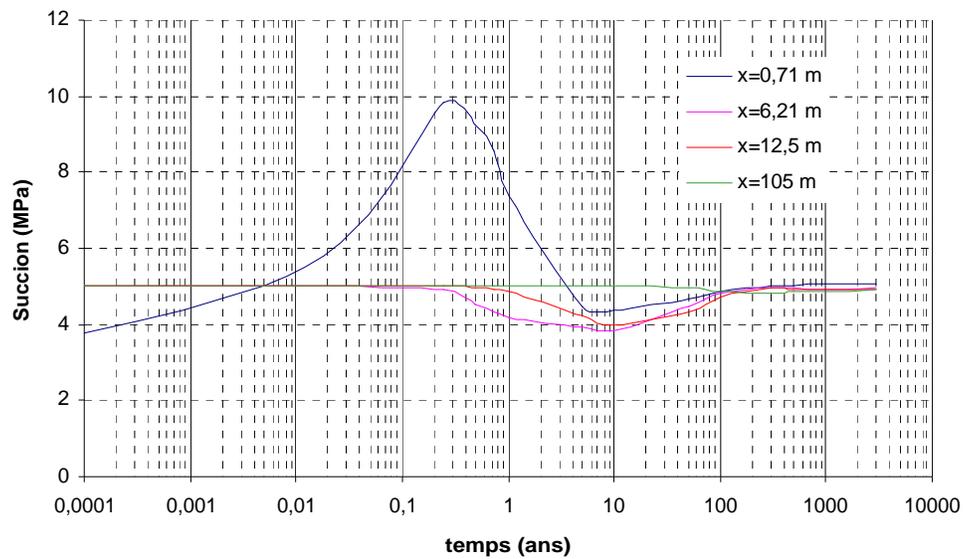


Figure 3-32 : Variation de succion dans le temps; modélisation 2, modèle linéaire

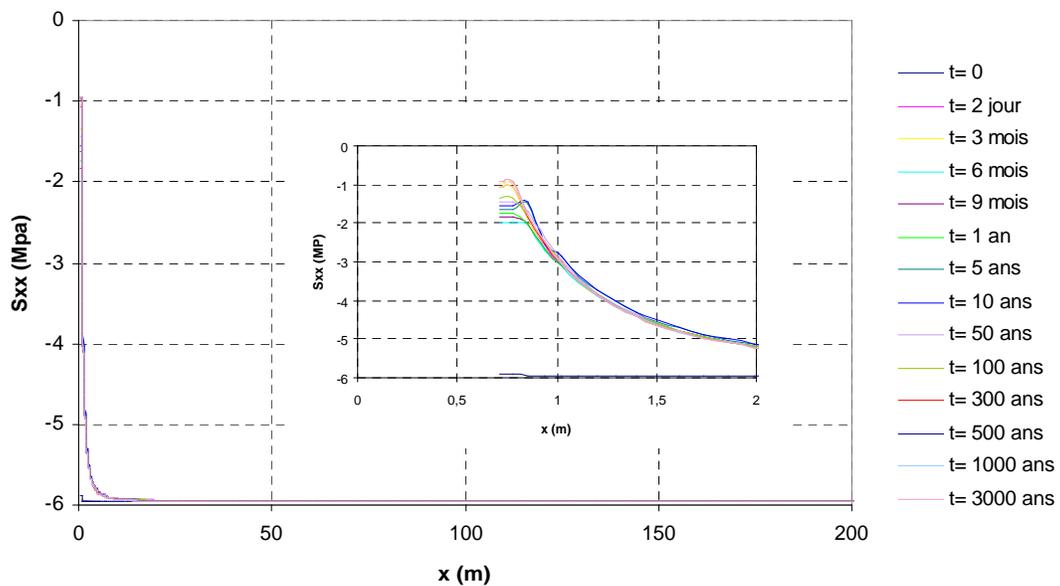


Figure 3-33 : Profils contrainte totale radiale le long de l'ouvrage à différents instants; modélisation 2, modèle linéaire

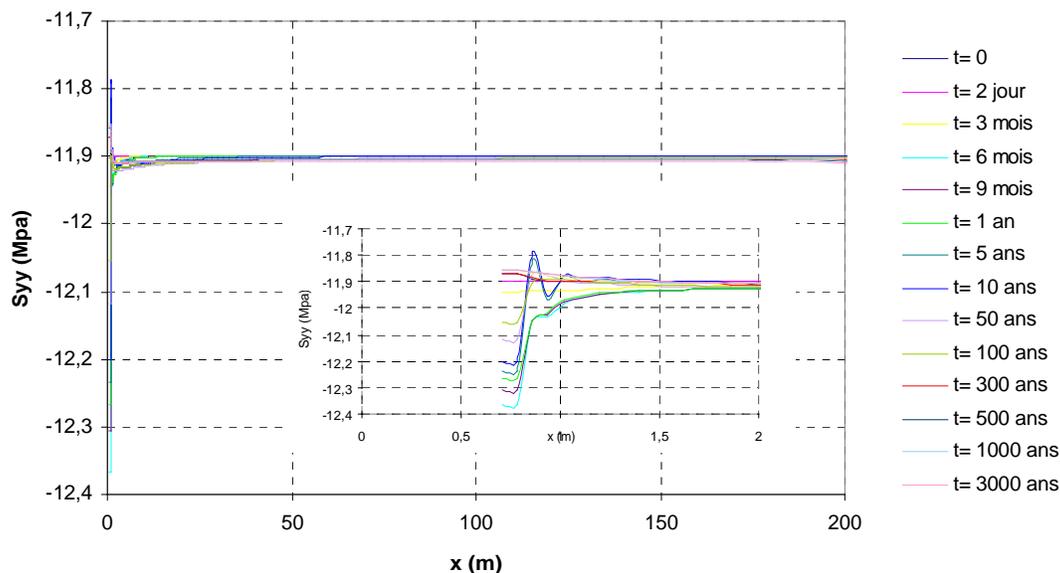


Figure 3-34 : Profils contrainte totale verticale le long de l’ouvrage à différents instants; modélisation 2, modèle linéaire

3.3.3.2 Calcul 1, élastique non linéaire hyperbolique

Comme dans le cas de la modélisation 1, le deuxième calcul effectué dans cette partie d’étude est un calcul avec le modèle élastique non linéaire hyperbolique en passant par la surface d’état thermique. Les paramètres utilisés pour la BG sont décrits dans la partie 3.3.1.4. Les résultats du calcul sont présentés sur les Figure 3-35- Figure 3-43. Les étapes de calcul sont indiquées dans le Tableau 3-14 .

Les variations de déplacement radial à différents instants sont reportées sur la Figure 3-35. Le maximum de déplacement constaté est autour de $-3,0$ mm au cours de l’excavation. Le maximum de déplacement dû uniquement au comportement THM est de $0,5$ mm (différence entre les profils de déplacement aux instant $t = 2$ jours et $t = 50$ ans). Il faut noter qu’on trouve les maximums de déplacements dans la BG dans un temps plus long que ceux du cas linéaire.

Cette tendance a été constatée dans les deux modélisations 1 et 2. Il est évident que les différences observées entre les valeurs maximales des déplacements dans les deux modélisations sont dues aux effets de non linéarité du comportement au cours de l'excavation et à long terme. Le déplacement radial engendré dans le cas non linéaire est plus grand.

Les profils de température sont présentés sur la Figure 3-36. Les profils de pressions interstitielles du liquide à différents instants sont présentés sur la Figure 3-37. Les profils de la succion sont présentés sur la Figure 3-38. Les profils des contraintes radiales et verticales le long de la tranche à différents instants sont présentés sur les Figure 3-39 et Figure 3-40. Les variations du déplacement, de la température et de la succion dans le temps pour les différents points du massif sont présentées sur les Figure 3-41 à Figure 3-43 respectivement.

Les résultats obtenus dans les deux variantes (linéaire et non linéaire) du calcul 1 ne montrent pas beaucoup de différence, cette similitude est due à l'égalité des paramètres à l'état initial et aux paramètres choisis pour le modèle non linéaire qui ne permettent pas une déviation significative par rapport au modèle linéaire. Avec un autre ensemble de données du comportement non linéaire, on pourrait attendre des résultats différents.

Le même phénomène de désaturation et de l'augmentation de la succion dans une zone proche autour de l'excavation est également constaté dans ce cas. L'ampleur de la succion et l'étendue de la zone désaturée sont semblables avec les deux comportements (linéaire et non linéaire).

Comme dans le cas linéaire, les profils de la température ne montrent pas une différence significative entre ces deux modélisations. L'excavation du puits n'a pas d'influence majeure sur le l'évolution de la température dans le massif de la BG.

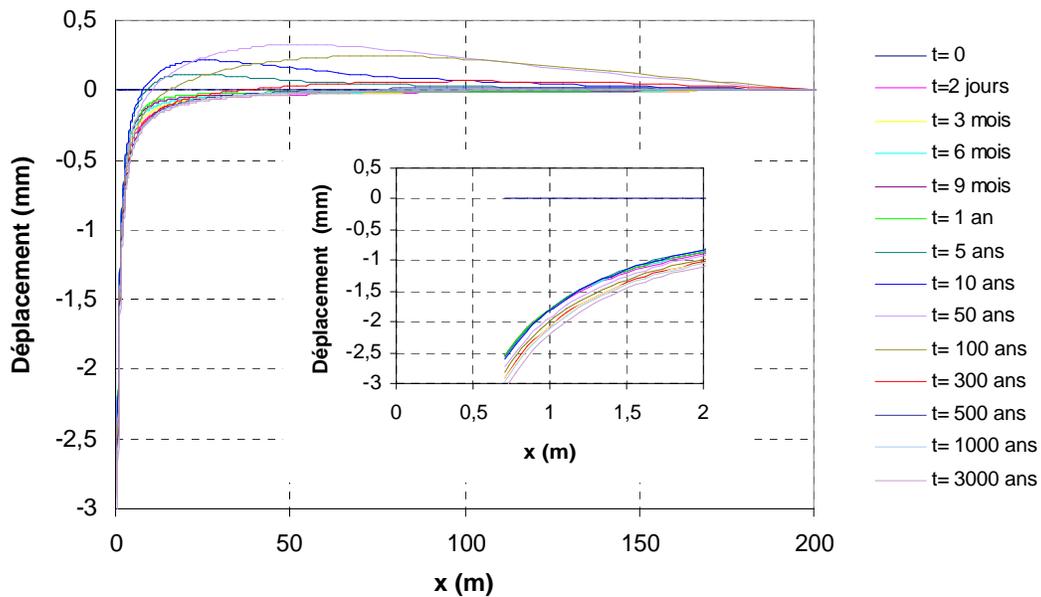


Figure 3-35 : Profils de déplacement horizontal le long de l'ouvrage à différents instants ; modélisation 2, modèle non linéaire

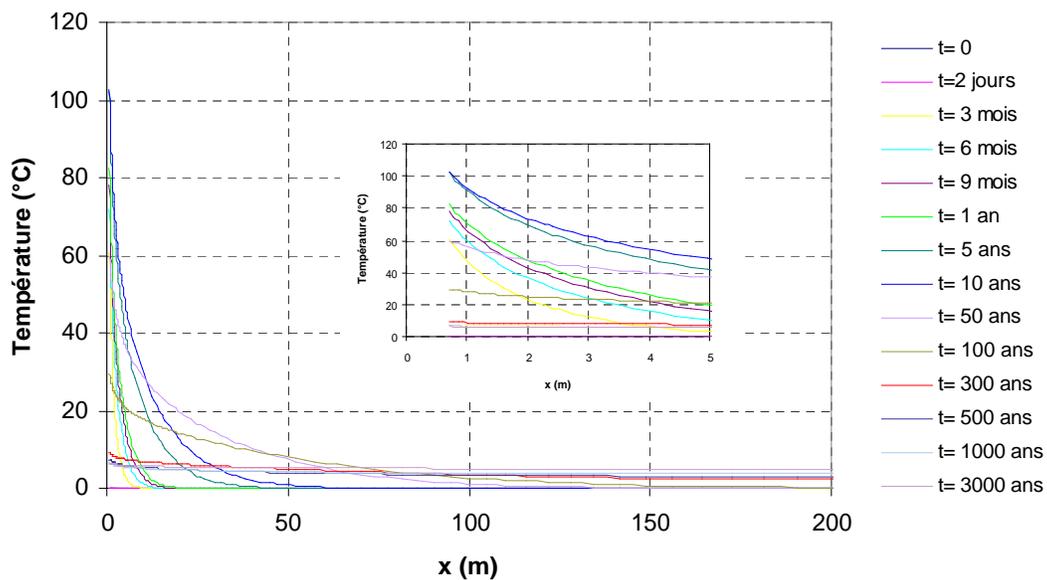


Figure 3-36 : Profils de température le long de l'ouvrage à différents instants ; modélisation 2, modèle non linéaire

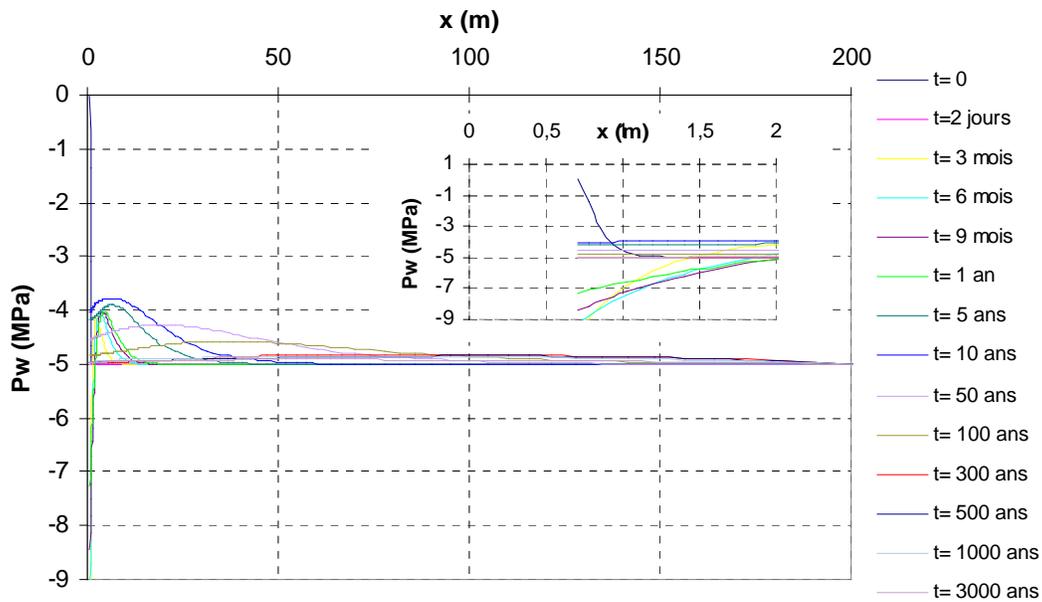


Figure 3-37 : Profils de pression interstitielle du liquide le long de l'ouvrage à différents instants ; modélisation 2, modèle non linéaire

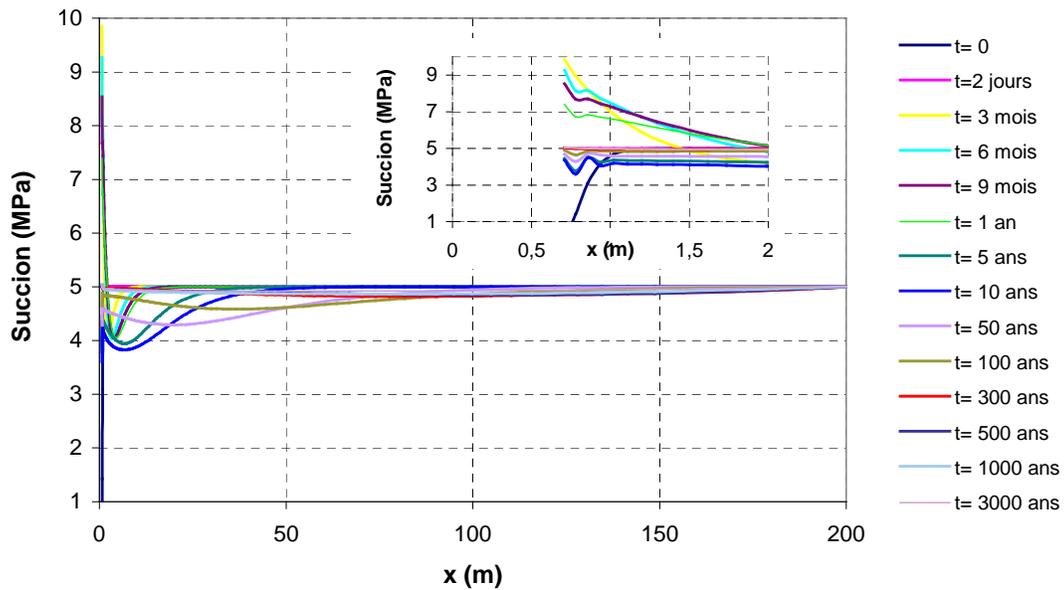


Figure 3-38 : Profils de suction le long de l'ouvrage à différents instants ; modélisation 2, modèle non linéaire

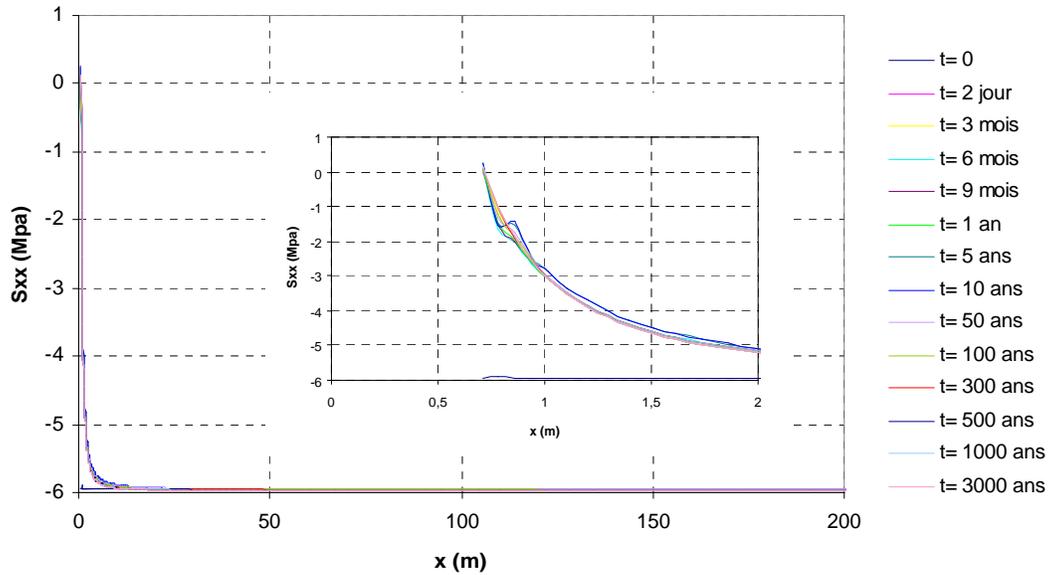


Figure 3-39 : Profils contrainte totale radiale le long de l'ouvrage à différents instants; modélisation 2, modèle non linéaire

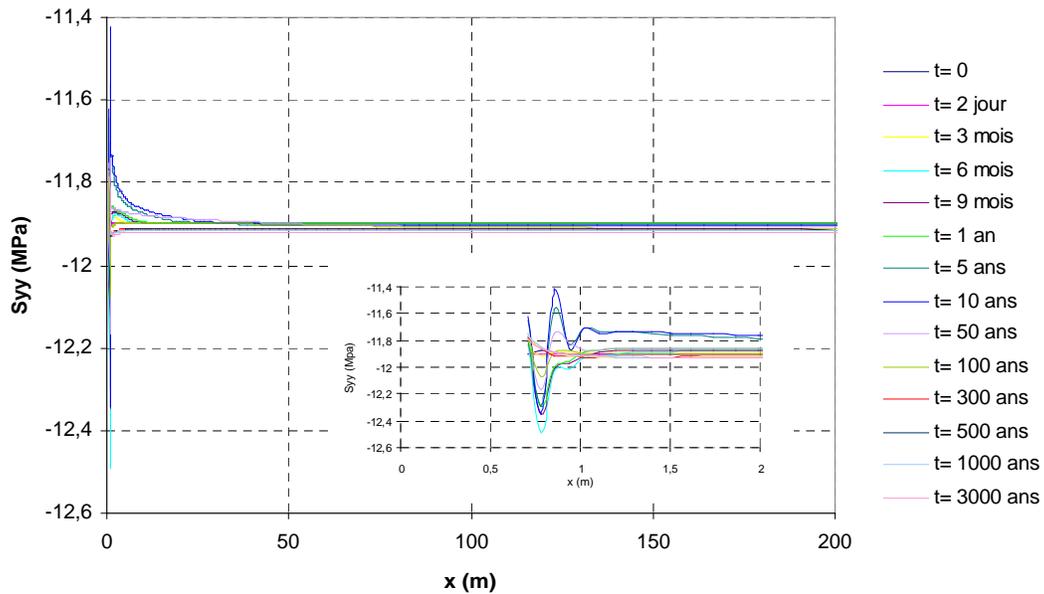


Figure 3-40 : Profils contrainte totale verticale le long de l'ouvrage à différents instants; modélisation 2, modèle non linéaire

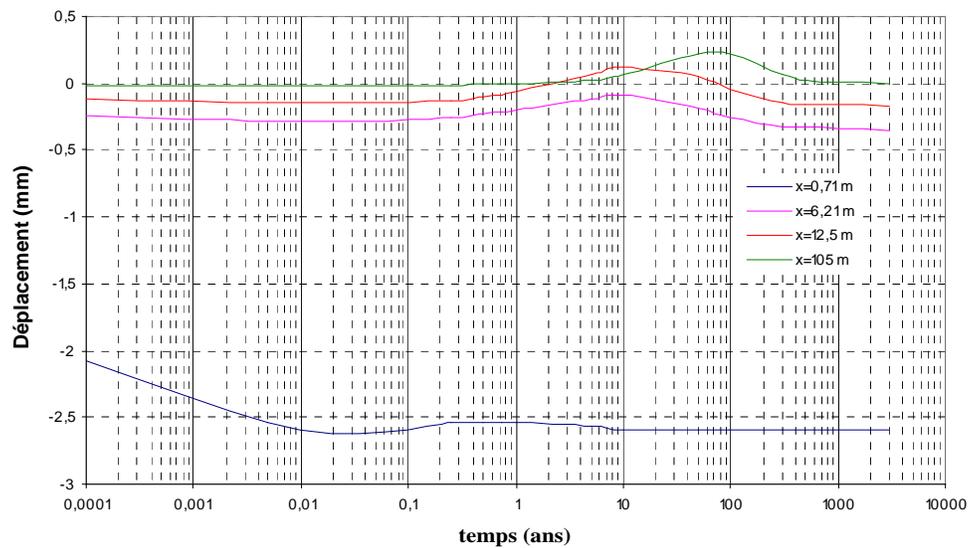


Figure 3-41 : Variation de déplacement radial dans le temps ; modélisation 2, modèle non linéaire

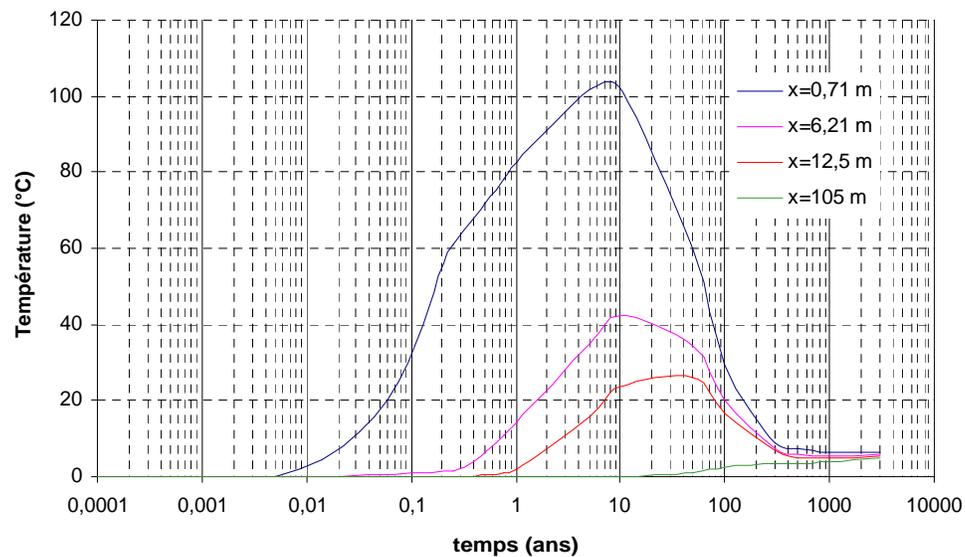


Figure 3-42 : Variation de température dans le temps ; modélisation 2, modèle non linéaire

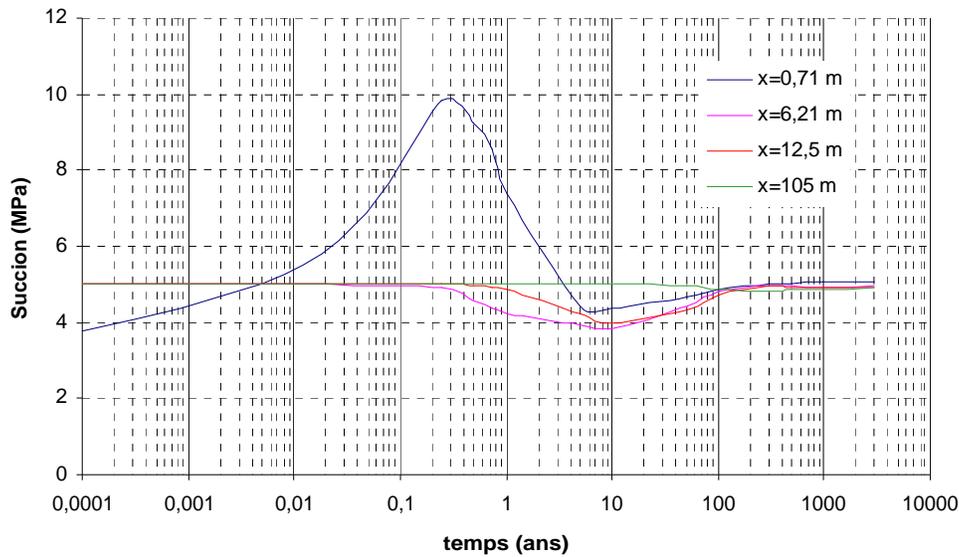


Figure 3-43 : Variation de succion dans le temps ; modélisation 2, modèle non linéaire

3.3.3.3 Calcul 2, élastique linéaire

Dans cette série de calculs, comme la précédente, les paramètres introduits dans le Tableau 3-7 ont été utilisés. Les résultats de ce calcul sont présentés sur les Figure 3-44- Figure 3-49. Les étapes de l'excavation sont semblables à celles utilisées dans la modélisation 2, calcul 1.

Les profils de déplacement radial à différents instants sont tracés sur la Figure 3-44 et les profils de variation du déplacement radial dans le temps pour les quatre points situés aux différentes abscisses sont reportés sur la Figure 3-45. Le maximum de déplacement constaté est autour de -2,5 mm qui a été engendré par l'excavation.

Comme on peut constater sur la Figure 3-44, La BO après sa mise en place gonfle à peu près de 1,5 mm. Ce déplacement radial positif semble être engendré par la saturation de la BO. Sur la Figure 3-45, la variation du déplacement d'un point situé sur la surface de la BO (X=0.71) est donnée. Le gonflement de 1,5 mm, pour ce point, est clairement montré.

Les profils de température à différents instants sont présentés sur la Figure 3-46. L'écart de température par rapport à la température ambiante (28°) est présenté sur cette Figure. La variation de la température dans le temps pour un point donné est présentée sur la Figure 3-47. On peut voir sur la Figure 3-47, la température maximum et le temps nécessaire pour atteindre cette valeur pour chaque point du massif sont différents selon la distance par rapport à la source de chaleur. Ces résultats sont proches de ceux obtenus dans la modélisation 1 et de ceux obtenus dans la modélisation 2, calcul 1. La pente de la variation de la température dans la BO pour atteindre sa valeur maximale en dixième année est plus raide dans ce cas.

Les profils de pressions interstitielles du liquide à différents instants sont présentés sur la Figure 3-48. Les profils de la succion sont donnés sur la Figure 3-49.

Contraire au calcul 1, on n'observe pas une zone de désaturation dans le massif de la BG. La BO empêche la désaturation du massif de la BG. Une diminution de la succion qui correspond à une resaturation de la BO peut être remarquée sur la Figure 3-49.

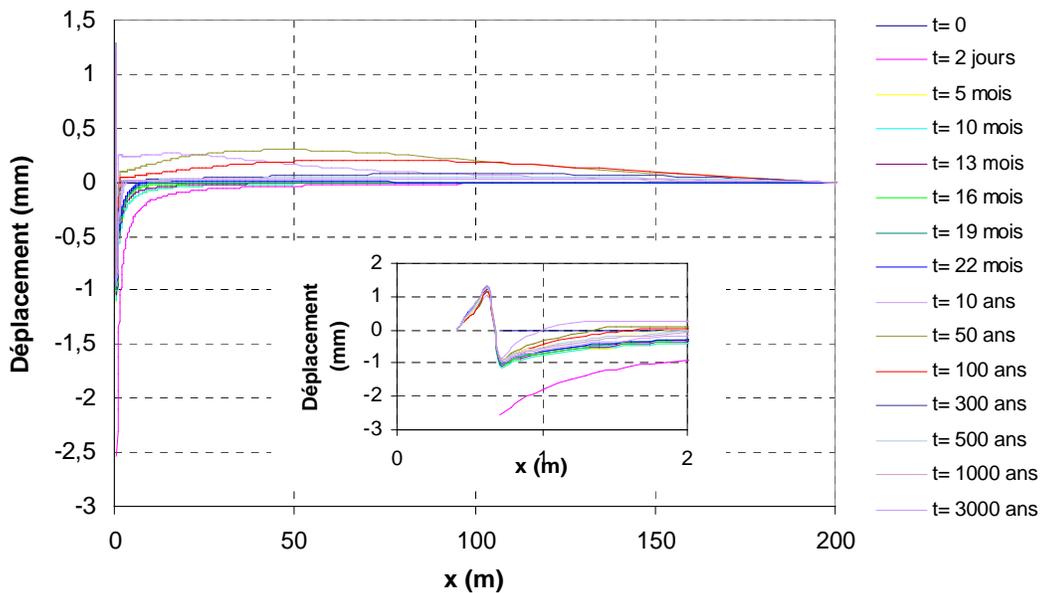


Figure 3-44 : Profils de déplacement horizontal le long de l'ouvrage à différents instants ; modélisation 2, calcul 2, modèle linéaire

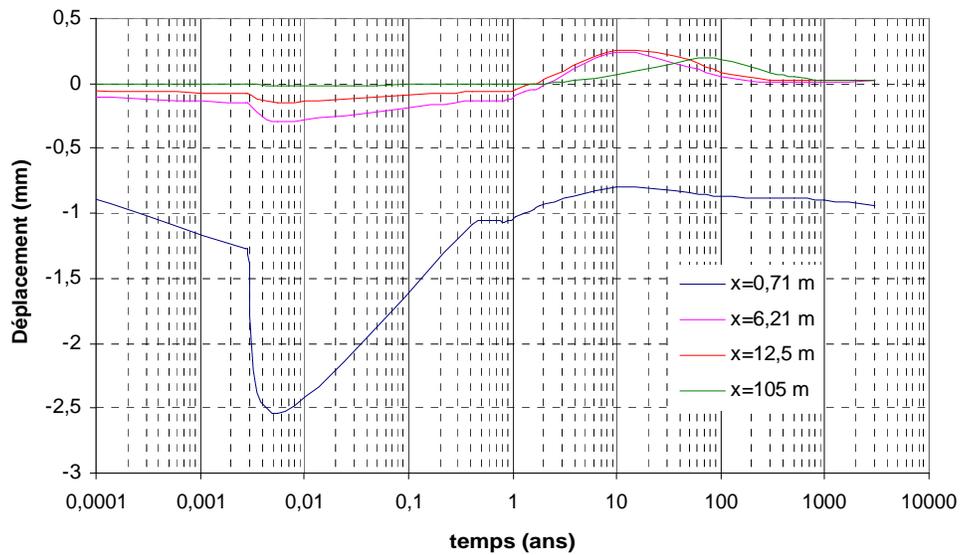


Figure 3-45 : Variation de déplacement radial dans le temps ; modélisation 2, calcul 2, modèle linéaire

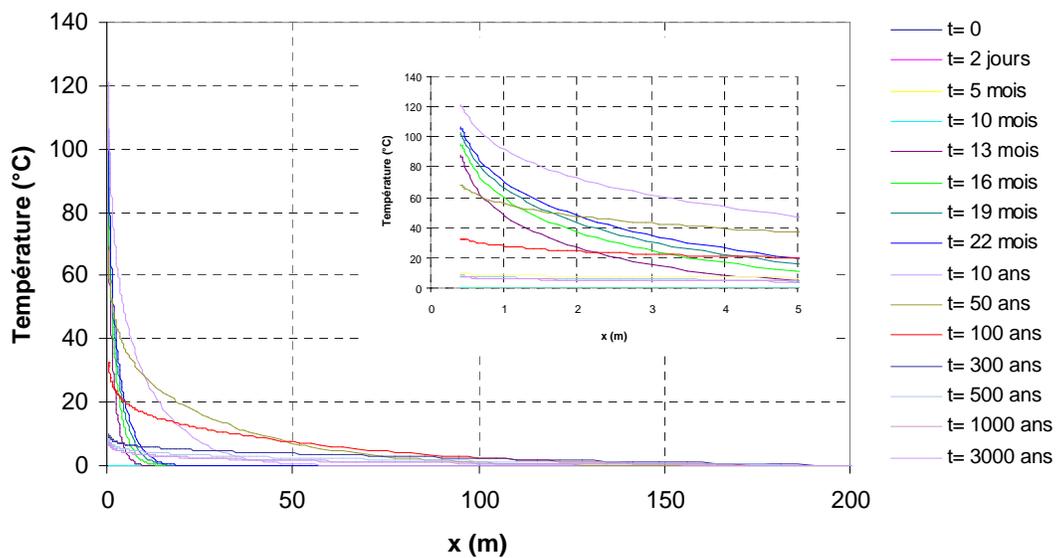


Figure 3-46 : Profils de température le long de l'ouvrage à différents instants ; modélisation 2, calcul 2, modèle linéaire

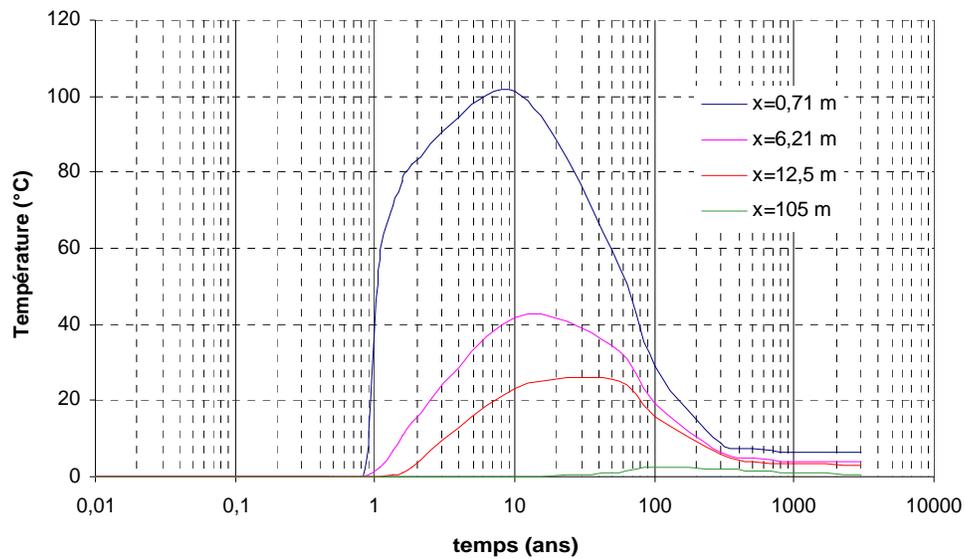


Figure 3-47 : Variation de température dans le temps ; modélisation 2, calcul 2, modèle linéaire

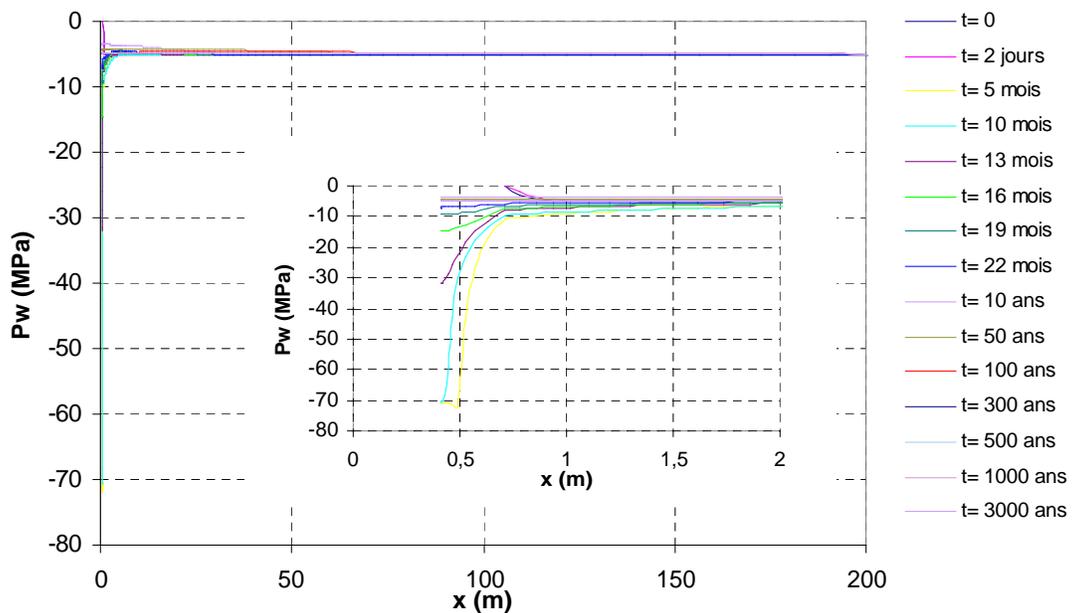


Figure 3-48 : Profils de pression interstitielle du liquide le long de l'ouvrage à différents instants ; modélisation 2, calcul 2, modèle linéaire

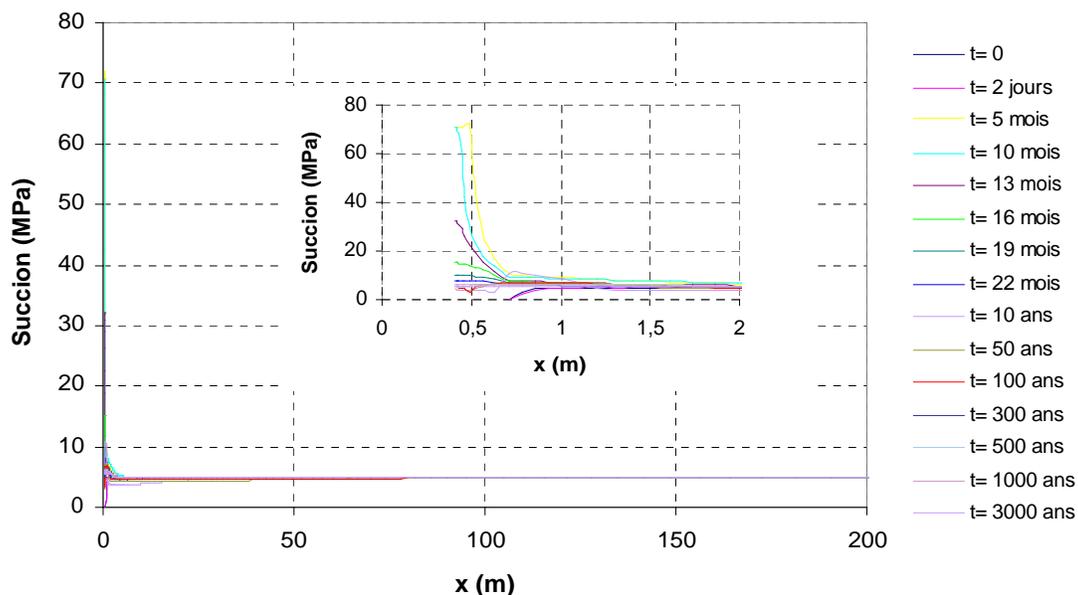


Figure 3-49 : Profils de succion le long de l'ouvrage à différents instants ; modélisation 2, calcul 2, modèle linéaire

3.3.3.4 Calcul 2, élastique non linéaire hyperbolique

Les paramètres utilisés pour les BO et BG sont présentés dans le Tableau 3-8. Les résultats du calcul sont présentés sur les Figure 3-50 - Figure 3-55. Les variations de déplacement radial à différents instants sont reportées sur la Figure 3-50. Les variations du déplacement dans le temps pour les différents points du massif sont présentées sur la Figure 3-51. Le maximum de déplacement constaté est autour de -2.5 mm au cours de l'excavation. Il faut noter qu'on trouve les maximums de déplacements dans la BG dans le même temps que ceux du cas linéaire. Le gonflement de la BO est observé comme dans le cas linéaire. Cette tendance a été constatée dans les deux calculs 1 et 2. Il est évident que les différences observées entre les valeurs maximales des déplacements dans les deux modélisations sont dues aux effets de non linéarité du comportement.

Les profils de température sont présentés sur la Figure 3-52. Les variations de la température dans le temps pour les différents points du massif sont présentées sur la Figure 3-53. Comme dans le cas linéaire, les profils de la température ne montrent pas une différence significative entre ces deux modélisations.

Les profils de pressions interstitielles du liquide à différents instants sont présentés sur la Figure 3-54. Les profils de la succion sont présentés sur La Figure 3-55. Le rôle de la BO qui empêche la désaturation significative de la BG (comme dans le cas du calcul 1) d'une part, et aspire l'eau d'autre part pour être resaturé est clairement visible. La diminution forte de la succion dans la BO (resaturation) et l'évolution lente de la succion dans la BG jusqu'aux quelques mètres montrent l'empêchement de la désaturation significative de la BG par rapport au cas du calcul 1.

Les résultats obtenus pour le comportement linéaire et non linéaire du calcul 2 de la modélisation 2 montrent des différences notables. Le modèle non linéaire a donné les résultats plus logiques et sans ambiguïtés théoriques. Dans le cas non linéaire les résultats sont cohérents et faciles à comprendre et à interpréter.

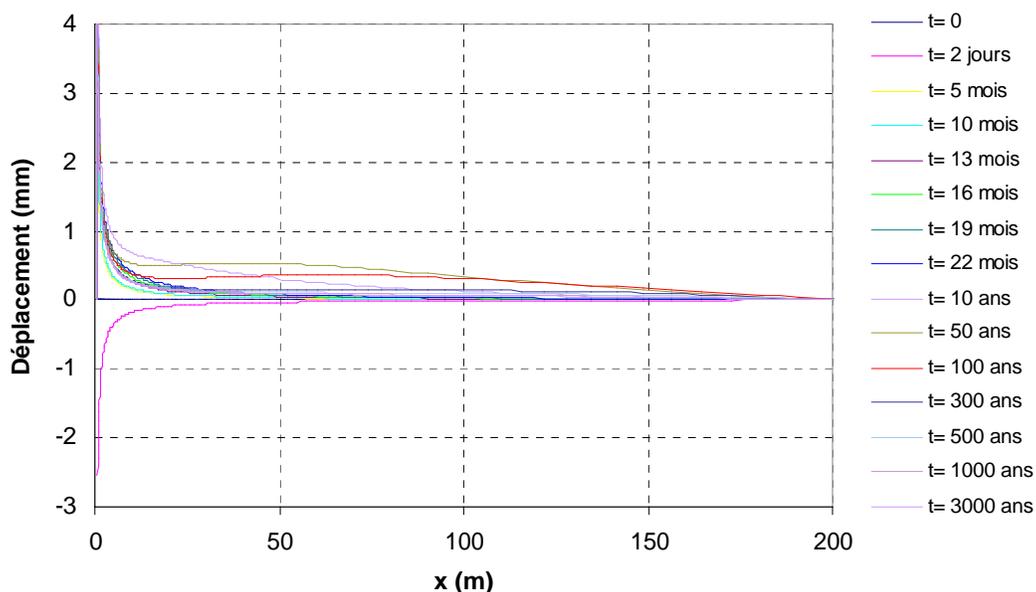


Figure 3-50 : Profils de déplacement horizontal le long de l'ouvrage à différents instants ; modélisation 2, calcul 2, modèle non linéaire

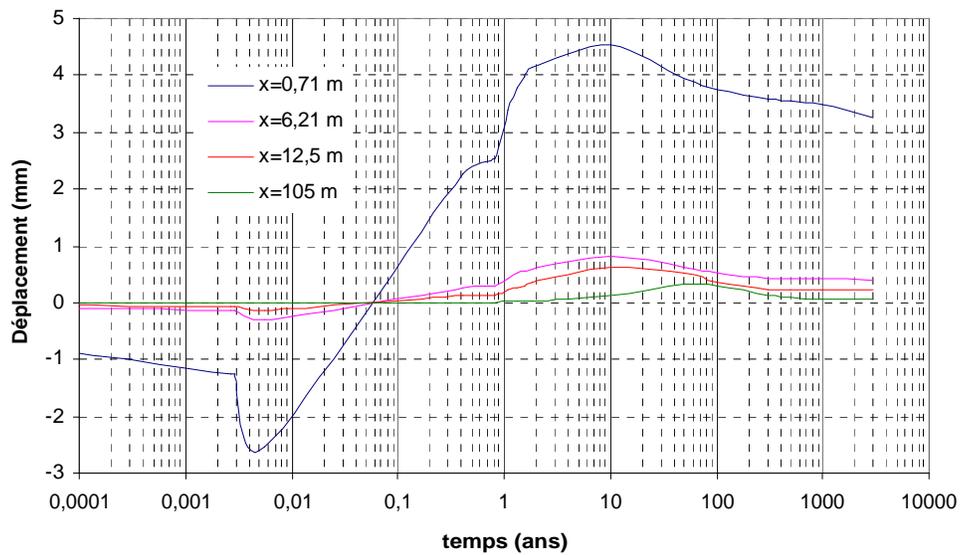


Figure 3-51 : Variation de déplacement radial dans le temps ; modélisation 2, calcul 2, modèle non linéaire

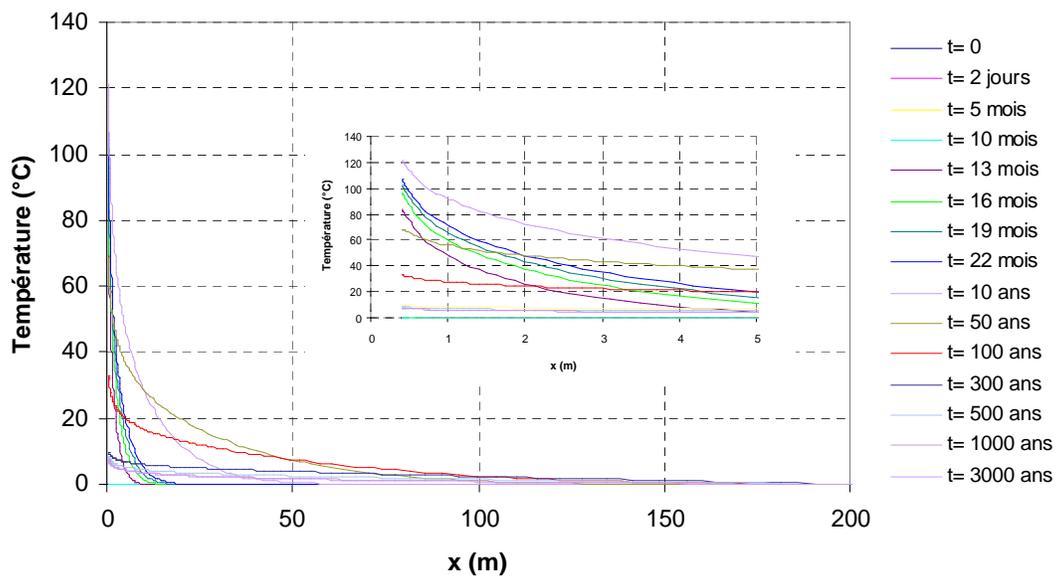


Figure 3-52 : Profils de température le long de l'ouvrage à différents instants ; modélisation 2, calcul 2, modèle non linéaire

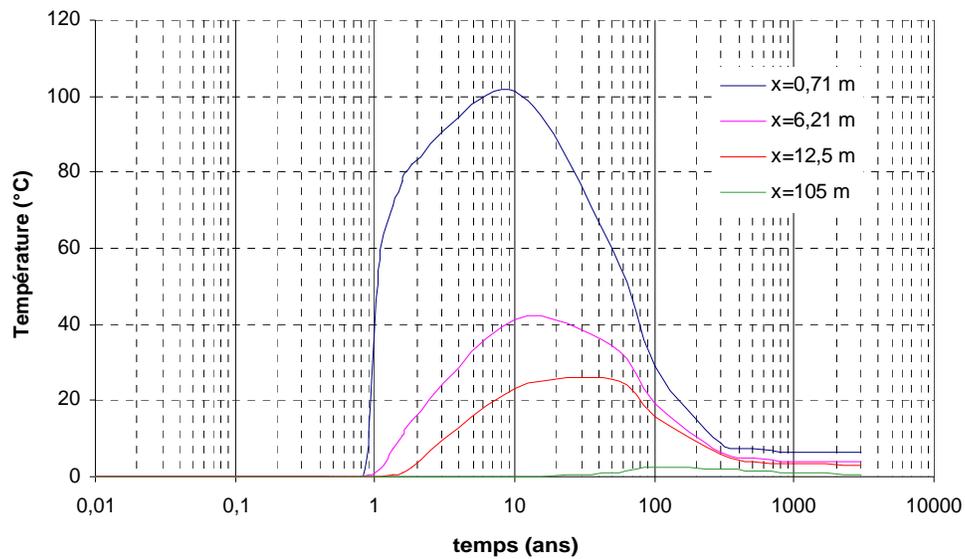


Figure 3-53 : Variation de température dans le temps ; modélisation 2, calcul 2, modèle non linéaire

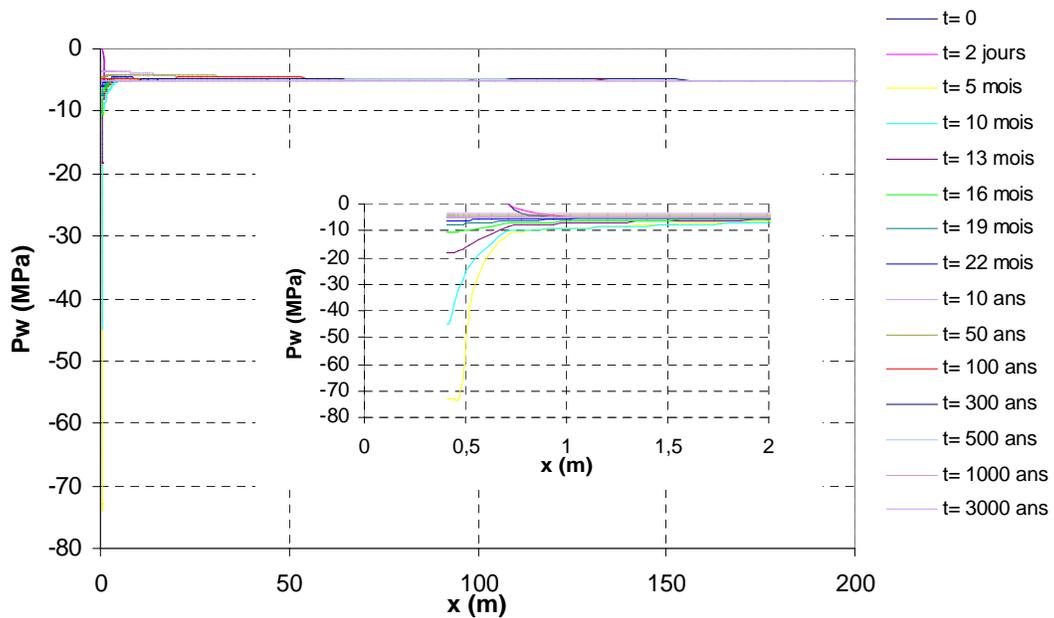


Figure 3-54 : Profils de pression interstitielle du liquide le long de l'ouvrage à différents instants ; modélisation 2, calcul 2, modèle non linéaire

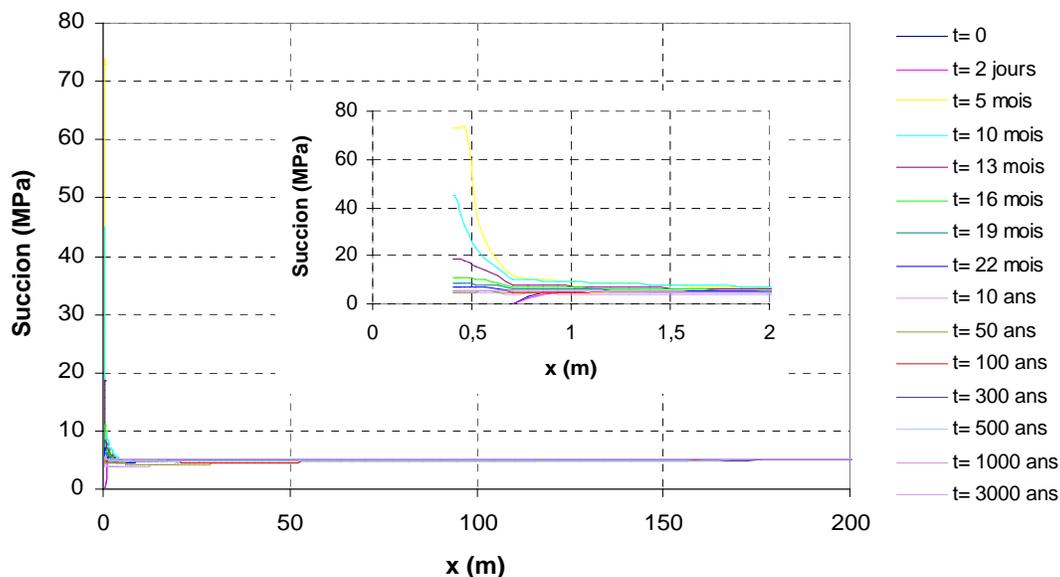


Figure 3-55 : Profils de succion le long de l’ouvrage à différents instants ; modélisation 2, calcul 2, modèle non linéaire

3.4 Conclusion

Les formulations thermo-hydro-mécanique CERMES intégrée dans le Code_Aster ont été présentées dans ce chapitre. L’analyse de puits de stockage de déchets nucléaires intégrant la barrière ouvrages et la barrière géologique a été effectuée pour la vérification de ce module.

Les résultats des modélisations THM axisymétriques unidimensionnelles d’une tranche du sol non saturé ont été décrits. Deux modélisations en non saturé ont été présentées. Dans le premier calcul, une tranche bi-matériau (BO-BG) a été analysée et dans le deuxième calcul, une tranche du sol (seulement BG) a été considérée, mais le creusement du puits a été modélisé et les conditions aux limites équivalentes issues de la première modélisation ont été imposées sur la frontière interne du modèle.

Au cours de la réalisation des calculs, quelques corrections sur la source de quelques sous-routines du modèle de THM non saturé CERMES ont été effectuées.

Les résultats obtenus montrent l'évolution générale de la température, du déplacement, de la succion et des contraintes à différents instants dans le massif. Cette étude nous a permis de voir la quasi-indépendance du phénomène thermique par rapport aux autres phénomènes.

La désaturation de la BG, en absence de la BO, au cours de l'excavation et tout au long de la vie de l'ouvrage a été clairement identifiée. L'étendue géométrique de ce phénomène et l'ampleur de l'augmentation de la succion ont été précisés.

La resaturation et la mise en traction de la BO, dans un calcul BO+BG, a été constatée. Le rôle de la BO sur l'empêchement de la désaturation de la BG a été mis en évidence.

En résumé, on peut dire que l'excavation joue un rôle important sur l'évolution hydrique du massif de la BG. La désaturation de la BG dans une zone bien étendue est la conséquence immédiate de l'excavation. La présence de la BO diminue cette désaturation de la BG mais la resaturation de la BO engendre d'autres phénomènes, comme la mise en traction de cette dernière.

Bien que l'étude menée montre une cohérence générale des modèles non saturés intégrés, la nécessité d'approfondissement des phénomènes observés et d'éclaircissement de quelques points est ressentie. L'application au cas réels et la comparaison avec les résultats in-situ semble la voie privilégiée pour la meilleure compréhension des phénomènes complexes caractéristiques du comportement THM des milieux multiphasiques.

La mise en oeuvre d'un système de stockage nécessite de prévoir la réponse de l'ensemble des éléments qui composent le système. Pour ceci, on doit prendre en compte, à côté des aspects THM précédemment décrites, les différents processus qui vont avoir lieu pendant la vie utile de l'ouvrage, en particulier les interactions entre les différents composants. Il faut considérer, par exemple, la corrosion du conteneur, la diffusion de la radio activité et les interactions chimiques. En outre, les constituants chimiques peuvent changer au cours de la resaturation de la barrière ouvragée, ce qui constitue un paramètre important par rapport à l'initiation de la corrosion. Ces problèmes environnementaux nous conduisent à aborder le couplage THCM dans les sols non saturés. Dans le chapitre suivant, on va présenter une formulation couplée THCM pour la modélisation du transfert et les réactions d'un soluté dans les sols non saturés, tout en considérant les effets du soluté sur la vitesse de l'eau et le comportement mécanique.

CHAPITRE QUATRE: MODELISATION THCM

PRISE EN COMPTE DES EFFETS CHIMIQUES DANS LE COMPORTEMENT

4.1 Introduction

Ce chapitre sera consacré à décrire les équations THCM gouvernant les milieux poreux non saturés. Une brève introduction sur les différentes méthodes d'examiner les équations ainsi que la méthode utilisée seront présentés dans ce paragraphe. Ensuite on explique l'équation d'équilibre du système suivi de la loi de comportement. Et puis on présentera les équations de conservation de la masse et celle de transfert des constituants de l'eau, de l'air et de l'espèce chimique. L'équation de l'énergie du système sera décrite. Enfin on présentera le traitement des équations du comportement thermo-hydro-chimio-mécanique par la méthode des éléments finis.

Les équations de conservation seront écrites à l'échelle macroscopique dans un volume élémentaire représentative (VER). Ces équations décrivent des phénomènes se déroulant à une échelle microscopique.

4.2 Constituant d'eau

Etant donné l'existence des forces thermiques et chimiques en plus des forces hydriques, les phénomènes de transfert de l'eau sont complexes. Dans les paragraphes qui suivent, tout d'abord, on va expliquer le transfert de l'eau dans les milieux non saturés et ensuite on présentera l'équation de conservation de l'humidité.

4.2.1 Transfert de l'eau liquide

Le transfert de l'eau dans le milieu poreux a été modélisé pour la première fois par Darcy (1856). Cette modélisation ne considère que l'influence de la gravitation et de la pression de l'eau. L'influence du potentiel capillaire, la généralisation de la loi de Darcy au

transfert de l'eau dans les milieux poreux non saturés a été proposée par plusieurs auteurs (Buckingham, 1907 ; Richards, 1931 ; Childs et Collis-Gorge, 1969 ; Bear, 1979). Dans les argiles compactées et peu perméables avec un indice des vides faible, la force osmotique devient dominante par rapport au force hydraulique (Mitchell, 1993). Dans le cas où l'influence de forces chimiques est importante, le gradient de potentiel osmotique peut être ajouté au gradient de pression (Mitchell, 1993 ; Thomas et Cleall, 2001).

Dans le but de prendre en compte les effets osmotiques dans la loi de Darcy Généralisée, on considère le potentiel osmotique en remplaçant le gradient de la pression de la manière suivante :

$$\nabla(P) = \nabla(\Psi_m + z) + \omega \nabla(\Psi_o) \quad \text{Eq. 0-1}$$

où ω est l'efficacité osmotique et Ψ_o est le potentiel osmotique. Pour les solutions diluées, Ψ_o peut être défini par l'équation de Van't Hoff :

$$\Psi_o = -\frac{RTC}{\gamma_w} \quad \text{Eq. 0-2}$$

où R est la constante universelle des gaz parfaits ($R= 8,314 \text{ J}^\circ\text{k/mole}$) et C est la concentration du soluté et T est la température.

L'efficacité osmotique dépend de propriété du sol et du soluté. L'efficacité osmotique d'une argile est une mesure de sa capacité à engendrer un flux hydraulique sous une pression osmotique et de son aptitude à se comporter comme une membrane semi-perméable qui empêche le passage des ions tout en permettant l'infiltration de l'eau.

La valeur de l'efficacité osmotique est égale ou supérieure à zéro et inférieure ou égale à un. Cette valeur a été mesurée pour plusieurs argiles comme par exemple dans les travaux de Kemper et Rollins, (1966) ; Letey et al., (1969) ; Olsen, (1969) ; Kemper et Quirk, (1972) ; Bresler, (1973) ; Elrick et al., (1976) et Barbour et Fredlund, (1989). Plusieurs résultats ont été résumés par Bresler (1973) et sont présentés dans la Figure 0-1. Dans cette figure, l'efficacité osmotique est montrée en fonction de la distance entre les particules d'argile et de la concentration de cation.

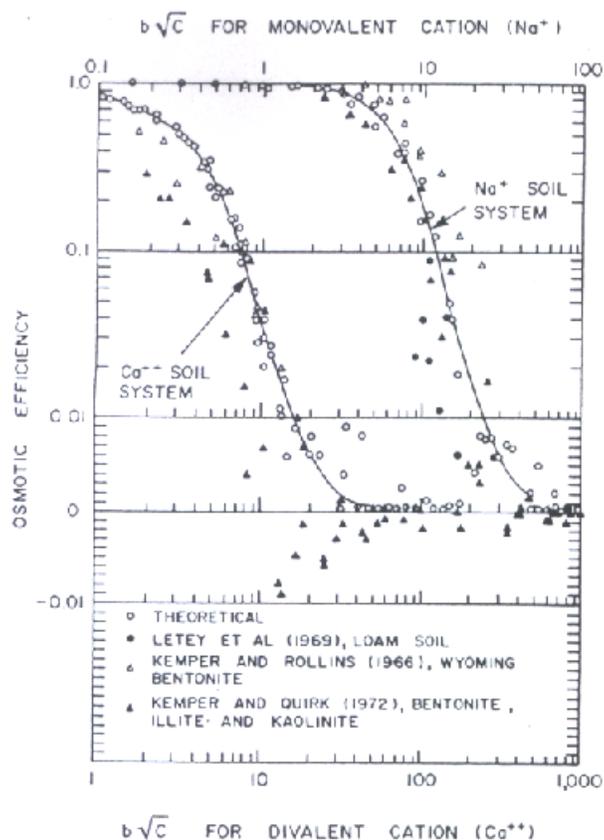


Figure 0-1 : Efficacité osmotique en fonction de $b\sqrt{c}$ où c est la concentration d'anion monovalent et $2b$ est l'espace effectif entre les particules (Bresler, 1973).

Pour avoir une relation plus proche des concepts de la mécanique des sols, l'espace entre les particules a été converti en teneur en eau en supposant, en première analyse, que la teneur en eau correspond à une couverture uniforme sur toutes les particules. La teneur en eau a été obtenue en multipliant l'épaisseur de couverture par la surface spécifique. Une relation entre la surface spécifique (A_s : m^2/g) et la limite de liquidité (LL) a été proposée par (Farrar et Coleman, 1967) :

$$LL = 19 + 0,56A_s \quad (\pm 20\%) \quad \text{Eq. 0-3}$$

Les résultats de ce calcul sont présentés sur la Figure 0-2 (Mitchell, 1993). Selon ces résultats et les travaux expérimentaux et théoriques de Barbour et Fredlund (1989), une haute efficacité osmotique se développe à basse teneur en eau, c'est à dire dans une argile compactée et avec une porosité faible et avec un électrolyte dilué.

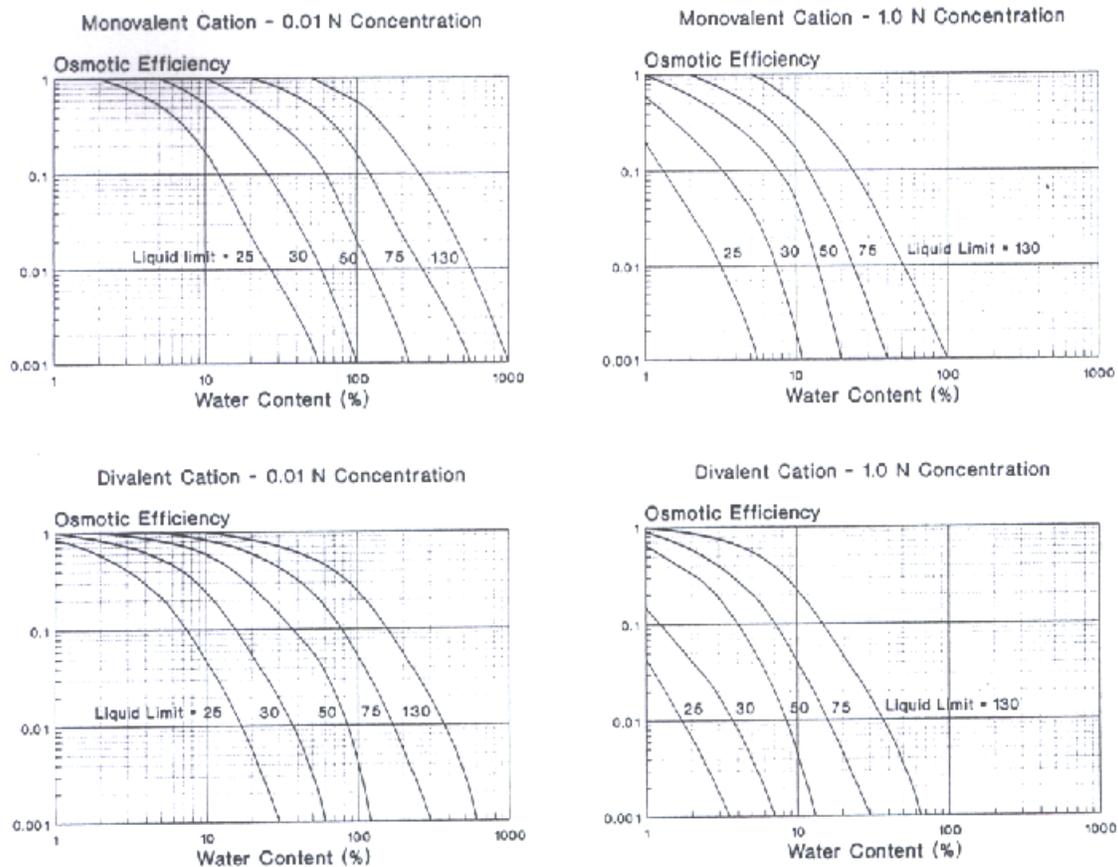


Figure 0-2 : Efficacité osmotique d'argile en fonction de la teneur en eau et de la concentration de cation (Mitchell, 1993).

En résumé, les effets du sol, des constituants chimiques et de la teneur en eau sont d'une grande importance sur l'efficacité osmotique. C'est pourquoi on propose d'introduire dans ce travail une surface de l'efficacité osmotique en fonction de la concentration et de la teneur en eau selon l'expression :

$$\omega = \omega(C, \theta) = \alpha \exp(\beta\theta + \gamma C) \quad \text{Eq. 0-4}$$

où α , β , γ sont les constantes qui dépendent des caractéristiques du sol et du soluté. La Figure 0-3 montre une surface d'efficacité osmotique où l'efficacité osmotique diminue avec l'augmentation de la concentration de soluté et aussi avec l'augmentation de la teneur en eau. Les paramètres de cette surface seront présentés dans l'exemple du paragraphe 5-5-2.

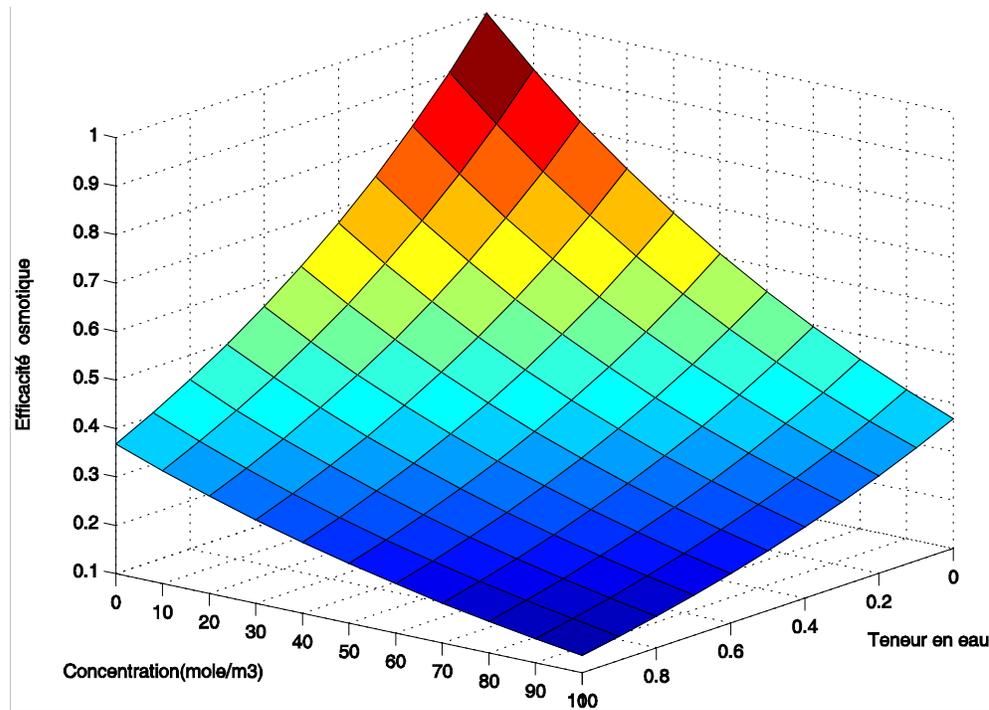


Figure 0-3 : l'efficacité osmotique en fonction de concentration et de teneur en eau

En remplaçant Ψ_m de l'équation Eq. 3-29 et Ψ_o de l'équation Eq. 0-2 dans l'équation Eq. 0-1, on aura :

$$\nabla(P) = \nabla(\Psi_m + z) + \omega \nabla(\Psi_o) = \frac{\partial \Psi_m}{\partial T} \nabla T + \frac{\partial \Psi_m}{\partial \theta} \nabla \theta + \nabla Z + \omega \frac{\partial \Psi_o}{\partial T} \nabla T + \omega \frac{\partial \Psi_o}{\partial C} \nabla C \quad \text{Eq. 0-5}$$

ou bien:

$$\nabla(P) = \frac{\Psi_r(\theta)}{\sigma_r} \frac{d\sigma(T)}{dT} \nabla T + \frac{\sigma(T)}{\sigma_r} \frac{d\Psi_r}{d\theta} \nabla \theta + \nabla Z + \omega(\theta, C) \frac{RC}{\gamma_w} \nabla T + \omega(\theta, C) \frac{RT}{\gamma_w} \nabla C \quad \text{Eq. 0-6}$$

En utilisant cette équation dans la loi de Darcy généralisée, on obtient :

$$U = \frac{q_w}{\rho_w} = -K_w \nabla(P) = -D_{Twc} \nabla T - D_{\theta w} \nabla \theta - D_{cw} \nabla C + K_w \nabla Z \quad \text{Eq. 0-7}$$

avec

$$D_{T_{wc}} = K_w \frac{\Psi_r(\theta) d\sigma(T)}{\sigma_r dT} + K_w \frac{RC}{\gamma_w} \omega(\theta, C) \quad \text{Eq. 0-8}$$

$$D_{\theta_w} = K_w \frac{\sigma(T) d\Psi_r}{\sigma_r d\theta} \quad \text{Eq. 0-9}$$

$$D_{c_w} = K_w \frac{RT}{\gamma_w} \omega(\theta, C) \quad \text{Eq. 0-10}$$

De même que précédemment, on retrouve pour D_{p_w} :

$$D_{p_w} = K(\theta, T) \frac{\sigma(T)}{\gamma_w \sigma_r} \quad \text{Eq. 0-11}$$

où $\sigma(T)$ est la tension surfacique de l'eau considérée comme une fonction de la température. Cette tension surfacique diminue avec l'augmentation de la température de la façon suivante (Edlefsen et Anderson, 1943):

$$\sigma(T) = 0,1171 - 0,0001516T \quad \text{Eq. 0-12}$$

où T est en °K et $\sigma(T)$ en J/m^2 .

Quant à la perméabilité à l'eau du milieu, elle est largement influencée par la déformation, la teneur en eau et la température. Il n'existe pas de relation de perméabilité à l'eau biunivoque pour les chemins de dessiccation et d'humidification du milieu non saturé (Crony, 1952 ; Nielsen et Biggar 1961, Fredlund et Rahadjo, 1993). Malgré l'existence de cette boucle d'hystérésis, une seule relation du coefficient de perméabilité proposée par Gatmiri (1997) a été utilisée dans cette étude, en supposant que l'effet de la concentration chimique est négligeable dans le cas de la solution diluée, selon l'expression :

$$K_w = K_n \cdot 10^{ae} \left(\frac{S_r - S_{ru}}{[1 - S_{ru}]} \right)^d \left(\frac{\mu_w(T_r)}{\mu_w(T)} \right) \quad \text{Eq. 0-13}$$

où S_r est le degré de saturation, S_{ru} est le degré de saturation résiduel, a , d sont les paramètres liés aux propriétés du matériau, T est la température et T_r est la température de référence.

$K(n)$ est la perméabilité géométrique ou intrinsèque du milieu qui ne dépend que de la porosité, donc pas du fluide considéré ni de la température. En génie pétrolier, les ingénieurs

réservoirs utilisent le *Darcy* comme unité de perméabilité intrinsèque. Un *Darcy* correspond à la perméabilité d'un sol par lequel un fluide de viscosité de 1 *cp* percolera avec un débit de 1 cm^3/s par cm^2 de section sous un gradient de pression de 1 *bar/cm* (Bear, 1972). Le facteur de conversion du *Darcy* en une unité de surface est le suivant :

$$1Darcy = 9,8697.10^{-13} m^2 \quad \text{Eq. 0-14}$$

μ_w est la viscosité de l'eau (Ns/m^2). On utilise la relation proposée par Kaye et Laby (1973) et introduite au paragraphe 3.2.3.2 (Eq. 3-50).

$$\mu_w = 0,6612.(T - 229)^{-1,562}$$

4.2.2 Conservation de la masse d'eau

L'équation de conservation de la masse d'eau, comme présentée au paragraphe §3.2.3 s'écrit :

$$\frac{\partial(\rho_w \theta_w + \rho_v \theta_v)}{\partial t} = -div(\rho_w (U + V)) \quad \text{Eq. 0-15}$$

où

U est la vitesse de l'eau liquide présenté dans l'équation Eq. 0-9 et V est la vitesse de vapeur d'eau qui s'est présenté dans la partie §3.2.3.1. On suppose que la concentration du soluté n'a pas d'effet sur le transfert de la vapeur dans les solutions diluées, donc la vitesse de vapeur s'écrit (Eq. 3-47 de la partie §3.2.3.1) :

$$V = \frac{q_{vap}}{\rho_w} = -D_{pv} \nabla(P_g - P_w) - D_{Tv} \nabla T \quad \text{Eq. 0-16}$$

$$\text{avec } \theta_w = nS_r \text{ et } \theta_v = n - \theta_w = n(1 - S_r) \quad \text{Eq. 0-17}$$

En substituant ces dernières équations dans l'équation Eq. 0-15 on obtient :

$$(\rho_w S_r - \rho_v (1 - S_r)) \frac{\partial n}{\partial t} + n(\rho_w - \rho_v) \frac{\partial(S_r)}{\partial t} + nS_r \frac{\partial \rho_w}{\partial t} + n(1 - S_r) \frac{\partial \rho_v}{\partial t} = -div(\rho_w (U + V)) \quad \text{Eq. 0-18}$$

Où, les différentes dérivées temporelles sont obtenues et présentées dans l'annexe A. En remplaçant les équations de dérivés temporelles et les équations de la vitesse d'eau et de la

vapeur (Eq. 0-7, Eq. 0-16) dans l'équation (Eq. 0-18) on obtient la forme finale de l'équation de conservation de la masse d'humidité comme :

$$c_{wu}\dot{\epsilon} + b_{f1}(1-n)\dot{\epsilon}_v + c_{ww}\dot{P}_w + c_{wg}\dot{P}_g + c_{wT}\dot{T} + c_{ws}\dot{C} = \text{div}(D_p \nabla P_w) + \text{div}(D_{p'} \nabla P_g) + \text{div}(D_w \nabla Z) + \text{div}(D_T \nabla T) + \text{div}(D_s \nabla C) \quad \text{Eq. 0-19}$$

Avec

$$\begin{aligned} D_p &= \rho_w (D_{pw} + D_{pv}) \\ D_{p'} &= -D_p \\ D_w &= K_w \\ D_T &= \rho_w (D_{Twc} + D_{Tv}) \\ D_s &= -\rho_w D_{cw} \end{aligned} \quad \text{Eq. 0-20}$$

et

$$\begin{aligned} c_{wu} &= b_{f2} D g_1 \\ c_{ww} &= n S_r \beta_p + b_{f2} (F g_1 - g_2) \\ c_{wg} &= b_{f2} (g_2 - F g_1) \\ c_{wT} &= n S_r \beta_T + b_{f3} + b_{f2} (g_3 - C_T g_1) \\ c_{ws} &= b_{f2} (g_4 - L_c g_1) \\ b_{f1} &= \rho_w S_r + \rho_v (1 - S_r) + n S_r A_n (1 - S_r) \\ b_{f2} &= n (\rho_w - \rho_v) + n^2 A_n (1 - S_r) \\ b_{f3} &= n \rho_v A_{\rho_0} (1 - S_r) \end{aligned} \quad \text{Eq. 0-21}$$

4.3 Constituant gaz

En se basant sur la loi de Darcy, la vitesse de l'air dans le sol s'écrit (Eq 3-51) :

$$V_g = \frac{q_g}{\rho_g} = -K_g \left(\nabla \left(\frac{P_g}{\gamma_g} \right) + \nabla Z \right) \quad \text{Eq. 0-22}$$

D'une façon générale, la perméabilité à l'air d'un milieu poreux (K_g), comme la perméabilité à l'eau, dépend de la granulométrie, de l'indice des vides, de la distribution des dimensions des pores dans le milieu, du type de sol et du degré de saturation.

Une expression pour la perméabilité à l'air du milieu, tenant en compte de l'indice des vides (e), est utilisée dans plusieurs travaux de recherche (Lloret et Alonso, 1980 ; Gatmiri, 1992 ; Thomas et He, 1995) comme suit :

$$K_g = \frac{b\gamma_g}{\mu_g} [e(1-S_r)]^c \quad \text{Eq. 0-23}$$

où ρ_g est la masse spécifique du gaz égale à 1 Kg/m^3 , μ_g est la viscosité du gaz égale à $1846.10^{-8} \text{ N.s/m}^2$ et b et c sont les constantes dépendant du sol étudié. Cette expression a été utilisée dans ce travail.

L'équation de conservation de la masse d'air obtenue s'est présentée dans la partie §3.2.4 comme :

$$\frac{\partial}{\partial t} [n\rho_a(1-S_r+HS_r)] = -\text{div}(\rho_a V_g) - \text{div}(\rho_a HU) \quad \text{Eq. 0-24}$$

En développant cette équation, on trouve :

$$\rho_a(1-S_r(1-H))\frac{\partial n}{\partial t} + n(1-S_r(1-H))\frac{\partial \rho_a}{\partial t} - (1-H)n\rho_a\frac{\partial S_r}{\partial t} = -\text{div}(\rho_a V_g) - \text{div}(\rho_a HU) \quad \text{Eq. 0-25}$$

dans laquelle les différentes dérivées temporelles sont présentées dans l'annexe A.

Enfin, en utilisant les dérivées temporelles (annexe A) et les équations de la vitesse d'eau et du gaz (Eq. 0-7, Eq. 0-22) dans l'équation Eq. 0-25, on obtient la forme finale de l'équation de conservation de la masse d'air comme :

$$\begin{aligned} c_{gu}\dot{\epsilon} + a_{f1}(1-n)\dot{\epsilon}_v + c_{gw}\dot{P}_w + c_{gg}\dot{P}_g + c_{gT}\dot{T} + c_{gs}\dot{C} = \\ \text{div}(D_{2p}\nabla P_w) + \text{div}(D_{2p'}\nabla P_g) + \text{div}(D_{2w}\nabla Z) + \text{div}(D_{2T}\nabla T) + \text{div}(D_{2s}\nabla C) \end{aligned} \quad \text{Eq. 0-26}$$

avec

$$\begin{aligned} c_{gu} &= a_{f2}Dg_1 \\ c_{gw} &= a_{f2}(Fg_1 - g_2) \\ c_{gg} &= a_{f2}(g_2 - Fg_1) + n(1-S_r + HS_r) \\ c_{gT} &= a_{f3} + a_{f2}(g_3 - C_T g_1) \\ c_{gs} &= a_{f2}(g_4 - L_c g_1) \\ a_{f1} &= (1-S_r + HS_r)(\rho_a - n(R_v/R_a)S_r A_n) \\ a_{f2} &= n\rho_a(H-1) - n^2 A_n(R_v/R_a)(1-S_r + HS_r) \\ a_{f3} &= n(1-S_r + HS_r)(\alpha_T - \rho_v A_{\rho_0}(R_v/R_a)) \end{aligned} \quad \text{Eq. 0-27}$$

4.4 Constituant chimique

Dans une solution hétérogène, les matières chimiques migrent d'un endroit à haute concentration vers un endroit à basse concentration. Dans un milieu poreux non saturé d'une

solution hétérogène, en plus de ce phénomène, on prend en compte le mouvement du soluté provoqué par la pression capillaire et la pression osmotique tout en considérant que les réactions entre le sol et le soluté peuvent affecter cette migration. On considère la température et ses effets sur la migration du soluté, via le changement de la vitesse de l'eau dû au gradient thermique. Il convient de mentionner que dans les sols non saturés, le flux de chaleur dû au gradient de concentration chimique (*effect Duffour*) et le flux du soluté dû au gradient thermique (*effet Soret*) ne sont pas significatifs (Mitchell, 1993) et on ne les considère donc pas à ce stade, bien que dans certaines argiles compactés ces effets puissent jouer un rôle important.

La formulation qui suit est consacrée au transport des matières chimiques dissous. Les limites de tailles qui déterminent si une particule est dissoute ou en suspension sont graduelles selon les auteurs. Cependant la définition la plus courante des particules colloïdales situe leur taille entre 1 nm et 1 µm (Pilgrim and Huff, 1983 ; Hunter, 1986 ; Buddemeir et Hunt, 1988 ; Degueldre et al., 1996 ; Kaplan et al., 1997). Pour des particules de cette taille, l'influence des forces de gravitation est négligeable devant celle du mouvement Brownien donc la formulation de ce travail devrait pouvoir aussi être appliquée pour les matières en suspension.

Dans ce paragraphe, on explique d'abord le transfert de constituant chimique dans un milieu continu non saturé, et on décrit ensuite l'équation de conservation de la masse de constituant chimique dans le milieu.

4.4.1 Transfert d'un constituant chimique

On note que lorsque l'on s'intéresse au transfert du soluté dans l'eau, on doit déterminer deux débits de transfert, selon que le transfert se fait par diffusion ou convection. Le débit dû à la convection (q_c) peut être obtenu par la relation suivante (Eq. 2-2) :

$$q_c = UC \quad \text{Eq. 0-28}$$

où C est la concentration et $U = \theta v$ est la vitesse de l'eau qui est définie dans la relation Eq. 0-7. Le débit de diffusion et dispersion selon la loi de Fick peut s'écrire (Eq. 2-4) :

$$q_{\text{disp}} = -\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \quad \text{Eq. 0-29}$$

où D_{ij} est le tenseur de dispersion défini dans le chapitre deux. Le transfert total du soluté dans un milieu est donc :

$$q_{\text{tot}} = q_{\text{disp}} + q_{\text{c}} = -\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} + UC \quad \text{Eq. 0-30}$$

En considérant l'efficacité osmotique (ω), le transfert total du soluté peut s'écrire (Mitchell, 1993 ; Manassero et Dominijanni, 2003):

$$q_{\text{tot}} = (1 - \omega)(-\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} + UC) \quad \text{Eq. 0-31}$$

4.4.2 Conservation du constituant chimique

L'équation de conservation de la masse pour le constituant chimique peut être obtenue par l'équation Eq 2-23. On considère les réactions chimiques (ΣR_n) comme la source ou le puits du constituant chimique, donc :

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = -\text{div}(q_{\text{tot}}) + \Sigma R_n \quad \text{Eq. 0-32}$$

Les réactions chimiques (ΣR_n), peuvent s'écrire (Zheng et Bennett, 1995) :

$$\Sigma R_n = -\frac{\partial(\rho_b C_s)}{\partial t} - \lambda_1 \theta C - \lambda_2 \rho_b C_s \quad \text{Eq. 0-33}$$

où C_s est la concentration adsorbée du soluté sur le squelette solide, ρ_b est la densité sèche du sol, λ_1 est la constante de dégradation de soluté soluble et λ_2 est la constante de dégradation de soluté adsorbé. Il convient de mentionner que dans certains cas de biodégradation le taux de décomposition du soluté dans la solution et sur le squelette solide ne sont pas égaux et on introduit donc deux coefficients différents λ_1 et λ_2 . Dans le cas de la dégradation des radio nucléïds, λ_1 est égale à λ_2 . La constante de dégradation λ et la demi-durée de vie $t_{1/2}$ sont liées par la relation :

$$\lambda = \frac{0,693}{t_{1/2}} \quad \text{Eq. 0-34}$$

En introduisant l'équation Eq. 0-33 dans l'équation Eq. 0-32 on obtient :

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = -\text{div}(q_{\text{tot}}) - \frac{\partial(\rho_b C_s)}{\partial t} - \lambda_1 \theta C - \lambda_2 \rho_b C_s \quad \text{Eq. 0-35}$$

en développant cette équation (annexe A), on trouve la forme finale de l'équation de conservation de la masse pour le constituant chimique :

$$\begin{aligned}
 c_{su}\dot{\varepsilon} + (CS_r - C_s\rho_s)(1-n)\dot{\varepsilon}_v + c_{sw}\dot{P}_w + c_{sg}\dot{P}_g + c_{sT}\dot{T} + (c_{ss} + R_{re})\dot{C} = \\
 \text{div}(D_{3P}\nabla P_w) + \text{div}(D_{3P'}\nabla P_g) + \text{div}(D_{3w}\nabla Z) + \text{div}(D_{3T}\nabla T) + \text{div}(D_{3c}\nabla C) \\
 - \lambda_1\theta C - \lambda_2\rho_s C_s = -\text{div}(q_{tot}) - \lambda_1\theta C - \lambda_2\rho_s K_{sorp} C
 \end{aligned}
 \tag{Eq. 0-36}$$

avec :

$$\begin{aligned}
 D_{3P} &= CD_{Pw} \\
 D_{3P'} &= -CD_{Pw} \\
 D_{3w} &= CK_w \\
 D_{3T} &= CD_{Twc} \\
 D_{3c} &= \theta D_{diff} - CD_{cw}
 \end{aligned}
 \tag{Eq. 0-37}$$

et

$$\begin{aligned}
 c_{su} &= nCDg_1 \\
 c_{sw} &= nC(Fg_1 - g_2) \\
 c_{sg} &= nC(g_2 - Fg_1) \\
 c_{sT} &= nC(g_3 - C_T g_1) \\
 c_{ss} &= nC(g_4 - L_c g_1) \\
 R_{re} &= 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial C_s}{\partial C}
 \end{aligned}
 \tag{Eq. 0-38}$$

4.5 Conservation de l'énergie

De la même manière que précédemment, on va écrire l'équation d'équilibre de l'énergie (§ 3.2.5) :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \text{div}Q = 0
 \tag{Eq. 0-39}$$

où en considérant la convection de chaleur due aux constituants chimiques du milieu, le flux de chaleur (Q) s'écrit :

$$Q = -\theta \text{grad}T + [C_{Pw}\rho_w U + C_{Pv}\rho_v V + C_{Pg}\rho_g V_g + C_{Pc}M_c q_{tot}](T - T_0) + \rho_w h_{fg} V + \rho_v V_g h_{fg}
 \tag{Eq. 0-40}$$

où C_{Pc} est la chaleur spécifique du soluté, q_{tot} est présenté dans l'équations Eq. 0-31, et

$$\theta = (1-n)\lambda_s + \theta\lambda_w + (n-\theta)\lambda_v + \theta C\lambda_c \quad \theta \text{ en W/m}^2\text{K}
 \tag{Eq. 0-41}$$

où λ_c est la conductivité thermique du soluté. φ est la quantité volumique de chaleur du sol:

$$\varphi = C_T(T - T_0) + (n - \theta)\rho_v h_{fg} \quad \text{Eq. 0-42}$$

C_T étant la chaleur spécifique du mélange. Elle peut être déterminée par la pondération de chaleur spécifique de chacune des phases, pour chaque fraction volumique (De Vries, 1963 ; Fredlund et Rahadjo, 1993). En ajoutant l'espèce chimique, elle s'écrit comme :

$$C_T = (1-n)\rho_s C_{ps} + \theta\rho_w C_{pw} + (n-\theta)\rho_v C_{pv} + (n-\theta)\rho_g C_{pg} + \theta C M_c C_{pc} \quad \text{Eq. 0-43}$$

où C_{pc} est la chaleur spécifique du soluté et M_c est la masse molaire du soluté. Il convient de mentionner que bien que l'hypothèse d'équilibre thermique locale ne soit pas valable pour les sables avec un taux d'infiltration important (Milly, 1982), cette hypothèse est valable pour les couches de faibles perméabilité ou pour les barrières ouvragées. Dans ces couches, le dégagement de chaleur par la diffusion est dominant et le nombre Peclet est assez faible.

En introduisant les équations, Eq. 0-40, Eq. 0-42 et Eq. 0-43 dans Eq. 0-39 , l'expression de conservation de chaleur vaut donc :

$$\begin{aligned} c_{f4}\dot{n} + c_{f5}\dot{S}_r + c_{f6}\dot{T} + c_{f7}\dot{P}_w + c_{f8}\dot{P}_g + c_{f9}\dot{C} = \text{div}(\lambda \text{grad}(T) - \\ (C_{pw}\rho_w U + C_{pv}\rho_w V + C_{pv}\rho_v V_g + C_{pa}\rho_a V_g + C_{pc}M_c q_{tot})(T - T_0) \\ + h_{fg}(\rho_w V + \rho_v V_g)) \end{aligned} \quad \text{Eq. 0-44}$$

avec :

$$\begin{aligned} c_{f1} &= -\rho_s C_{ps} + S_r \rho_w C_{pw} + (1 - S_r) \rho_v C_{pv} + (1 - S_r) \rho_a C_{pa} + C S_r M_c C_{pc} + \\ & n(1 - S_r) C_{pv} S_r A_n - n S_r (1 - S_r) C_{pa} (R_v / R_a) A_n \\ c_{f2} &= n \rho_w C_{pw} - n \rho_v C_{pv} + n \rho_a C_{pa} + n C M_c C_{pc} + n^2 (1 - S_r) C_{pv} A_n - \\ & n^2 (1 - S_r) C_{pa} (R_v / R_a) A_n \\ c_{f3} &= \theta C_{pw} \beta_T + n(1 - S_r) \rho_v C_{pv} A_{\rho 0} + n(1 - S_r) C_{pa} (\alpha_T \dot{T} - (R_v / R_a) \rho_v A_{\rho 0}) \\ c_{f4} &= c_{f1} (T - T_0) + (1 - S_r) \rho_v h_{fg} + n(1 - S_r) h_{fg} S_r A_n \\ c_{f5} &= c_{f2} (T - T_0) + n^2 (1 - S_r) h_{fg} A_n - n \rho_v h_{fg} \\ c_{f6} &= c_{f3} (T - T_0) + C_{tot} n(1 - S_r) h_{fg} \rho_v h_{fg} A_{\rho 0} \\ c_{f7} &= \theta C_{pw} \beta_p (T - T_0) \\ c_{f8} &= n(1 - S_r) C_{pa} \alpha_p (T - T_0) \\ c_{f9} &= n S_r M_c C_{pc} (T - T_0) \end{aligned} \quad \text{Eq. 0-45}$$

En développant cette équation pour les variations temporelles de n et S_r (annexe A) on trouve la forme finale de la conservation de chaleur :

$$\begin{aligned}
 c_{Tu} \dot{\epsilon} + a_{T1}(1-n)\dot{\epsilon}_v + c_{Tw} \dot{P}_w + c_{Tg} \dot{P}_g + c_{TT} \dot{T} + c_{Ts} \dot{C} = \\
 \text{div}(\lambda \text{grad}(T) - (C_{pw} \rho_w U + C_{pv} \rho_w V + C_{pv} \rho_v V_g + C_{pa} \rho_a V_g + C_{pc} M_c q_{tot})) \\
 (T - T_0) + h_{fg} (\rho_w V + \rho_v V_g)
 \end{aligned} \tag{Eq. 0-46}$$

avec

$$\begin{aligned}
 c_{Tu} &= c_{f5} D g_1 \\
 c_{Tw} &= c_{f5} (F g_1 - g_2) + c_{f7} \\
 c_{Tg} &= c_{f5} (g_2 - F g_1) + c_{f8} \\
 c_{TT} &= c_{f5} (g_3 - C_T g_1) + c_{f6} \\
 c_{Ts} &= c_{f5} (g_4 - L_c g_1) + c_{f9}
 \end{aligned} \tag{Eq. 0-47}$$

4.6 Equation d'équilibre

Les équations d'équilibres sont les équations mentionnées dans la partie §3.2.1 soit pour les sols non saturés :

$$(\sigma_{ij} - \delta_{ij} P_g)_{,j} + P_{g,i} + b_i = 0 \tag{Eq. 0-48}$$

4.7 Loi de comportement

Dans les conditions non isothermes, en tenant en compte du transfert du soluté, on introduit l'effet de la concentration du soluté dans la loi de comportement. La concentration du soluté peut engendrer une déformation d'origine chimique dans le sol (Barbour et Fredlund, 1989 ; Santamarina et Fam, 1995 ; Di Maio, 1996 ; Hueckel, 1997 ; Peters et Smith, 2004). On propose la relation contrainte-déformation de ce problème comme suit :

$$d(\sigma - m P_g) = D de - F d(P_g - P_w) - C_T dT - L_C dP_{os} \tag{Eq. 0-49}$$

avec :

$$L_C = D D_C^{-1}, D_C^{-1} = \beta_C m, \beta_C = \frac{1}{1+e} \frac{\partial e}{\partial P_{os}} \tag{Eq. 0-50}$$

et

$$P_{os} = RTC \tag{Eq. 0-51}$$

Les autres paramètres ont été présentés dans la partie §3.2.2.

4.7.1 Surfaces d'état du modèle

Dans les conditions non saturées et non isothermes d'un sol déformable, l'indice des vides et le degré de saturation varient avec la température, la succion, la contrainte et la concentration du soluté. Dans les paragraphes suivants, on essaiera de retrouver les relations de (e) et (S_r) qui permettront de prendre en compte les différents couplages au sein du milieu considéré. On va présenter dans ce qui suit les formulations des surfaces d'état retenues dans cette étude.

- *Surface d'état de l'indice des vides*

On va modifier la surface d'état de l'indice des vides (Eq. 3-15), pour prendre en compte les effets de la concentration du soluté sur la déformation du sol. Les effets considérés sont la déformation d'origine osmotique et la déformation d'origine chimique. La surface d'état d'indice des vides peut s'écrire :

$$e = \frac{1 + e_0}{\exp \left[\left[a_e \left(\frac{s - p_g}{p_{atm}} \right) + b_e \left(1 - \frac{s - p_g}{s_c} \right) \left(\frac{p_g - p_w}{p_{atm}} \right) + d_e \left(1 - \frac{s - p_g}{s_c} \right) \left(\frac{p_{os}}{p_{atm}} \right) \right]^{1-m} / K_b (1-m) \right] \exp[c_e (T - T_0)]} - 1 \quad \text{Eq. 0-52}$$

ou :

$$e = \frac{1 + e_0}{\exp \left[\left[a_e \left(\frac{s - p_g}{p_{atm}} \right) + b_e \left(1 - \frac{s - p_g}{s_c} \right) \left(\frac{p_g - p_w}{p_{atm}} + \zeta \frac{p_{os}}{p_{atm}} \right) \right]^{1-m} / K_b (1-m) \right] \exp[c_e (T - T_0)]} - 1 \quad \text{Eq. 0-53}$$

avec :

$$d_e = \zeta * b_e \quad \text{Eq. 0-54}$$

où ζ est un paramètre qui définit l'interaction soluté/déformation et qui représente le rapport entre le changement de volume dû à la consolidation chimique et celui dû à la consolidation correspondant à la succion. Pour la première fois, Peters et Smith (2004) ont utilisé un paramètre similaire pour les sols saturés qui définit le rapport du changement de volume dû à l'effet consolidation chimique à celui dû à la consolidation mécanique.

Comme on a expliqué dans le chapitre deux, en plus de consolidation chimique il y a la déformation osmotique. La pression osmotique change la pression du liquide en conséquence la succion change, ce qui entraîne la déformation volumique. La pression osmotique engendrée dans le milieu dépend de l'efficacité osmotique du milieu ; la déformation osmotique dépend donc de l'efficacité osmotique.

En introduisant cette surface d'état de l'indice des vides on considère donc deux paramètres pour intégrer l'effet chimio-osmotique : ζ pour la déformation chimique et ω pour la déformation osmotique. Cette approche permet de simplifier le modèle à l'échelle macroscopique, sachant que l'effet chimio-osmotique est plus complexe.

Figure 0-4 montre la surface d'état de l'indice des vides. On observe que l'indice des vides augmente avec l'augmentation de la pression osmotique et qu'il diminue avec l'augmentation de la succion. De même, en augmentant la température, l'indice des vides augmente alors qu'il diminue avec l'augmentation de la contrainte, lorsque les autres variables sont constantes. Les paramètres de cette surface seront présentés dans l'exemple du paragraphe 5-5-4.

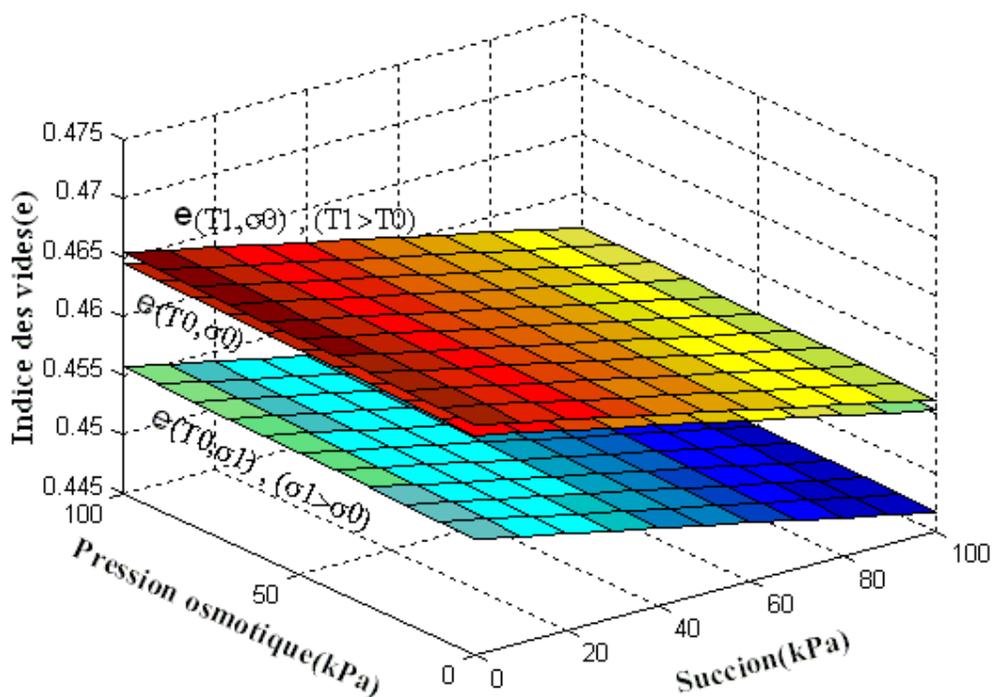


Figure 0-4: Surfaces d'état de l'indice des vides pour trois cas y compris (T_0, σ_0) , (T_0, σ_1) tel que $\sigma_1 > \sigma_0$ et (T_1, σ_0) tel que $T_1 > T_0$

- *Surface d'état du degré de saturation*

Les expressions mentionnées dans le chapitre précédent ne prennent pas en compte l'effet de la concentration du soluté. Pour retrouver l'expression finale de la surface d'état du degré

de saturation, on introduit l'influence de la concentration dans la relation proposée par Gatmiri (1997) sous une forme exponentielle :

$$S_r = 1 - [a_s + b_s(s - p_g)] [1 - \exp(c_s(p_g - p_w))] \exp(f_s(C - C_0)) \exp(d_s(T - T_0)) \quad \text{Eq. 0-55}$$

où a_s , b_s , c_s , d_s , f_s sont des constantes et T_0 , C_0 sont la température et la concentration de référence respectivement. La Figure 0-5 montre un exemple de cette surface d'état du degré de saturation. Les paramètres de cette surface seront présentés dans l'exemple du paragraphe 5-5-4. Le degré de saturation diminue en augmentant la succion et il augmente en augmentant la concentration de soluté. On observe que le degré de saturation augmente avec la diminution de la température alors qu'il diminue avec la diminution de la contrainte lorsque les autres variables sont constantes.

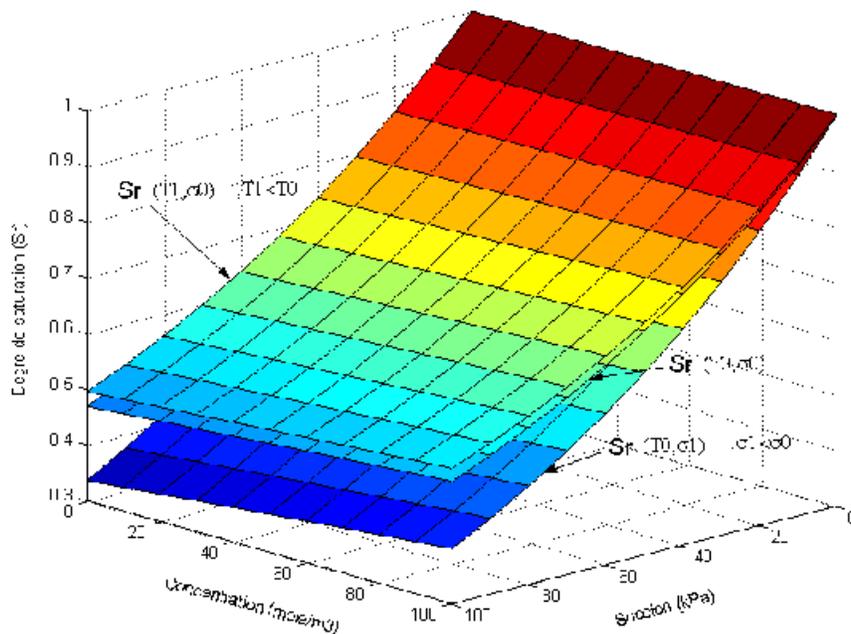


Figure 0-5: Surfaces d'état du degré de saturation pour trois cas y compris (T_0, σ_0) , (T_0, σ_1) tel que $\sigma_1 < \sigma_0$ et (T_1, σ_0) tel que $T_1 < T_0$

4.8 Intégration numérique par la méthode des éléments finis

Dans ce paragraphe, on présentera le traitement des équations du comportement thermo-hydro-chimio-mécanique par la méthode des éléments finis. En première étape, on rappelle le

système d'équations finales du THCM des milieux poreux multiphasiques. Ensuite, on expliquera la démarche qui conduit à la modélisation par la méthode des éléments finis. Ce traitement numérique sera présenté dans les étapes suivantes :

- la formulation variationnelle (principe de minimum de l'énergie potentielle) des équations issues des lois de transfert et de conservation de la masse de chacun des constituants du milieu ;
- la formulation variationnelle approchée du problème ;
- la discrétisation dans l'espace et la formulation matricielle ;
- la discrétisation dans le temps par la θ -méthode.

Enfin, on expliquera, brièvement, l'architecture du module THCM dans θ – STOCK.

4.8.1 Système des équations THCM

Les cinq équations finales, qui correspondent au squelette solide, à l'eau, au gaz, à la chaleur, et la concentration du soluté, sont résumées dans ce qui suit :

- Le squelette solide (Eq. 0-49 dans l'équation Eq. 0-48) :

$$\text{div}(D_{de} - F_d(P_g - P_w)) - C_T dT - L_C dC + \text{grad}(dP_g) + b = 0 \quad \text{sur } \Omega \times [0, \infty) \quad \text{Eq. 0-56}$$

Ω est le domaine de frontière Γ considéré

- L'eau (Eq. 0-19) :

$$\begin{aligned} c_{wu} \dot{\epsilon} + b_{f1}(1-n)\dot{\epsilon}_v + c_{ww} \dot{P}_w + c_{wg} \dot{P}_g + c_{wT} \dot{T} + c_{ws} \dot{C} = \\ \text{div}(D_p \nabla P_w) + \text{div}(D_{p'} \nabla P_g) + \text{div}(D_w \nabla Z) + \text{div}(D_T \nabla T) + \text{div}(D_s \nabla C) \\ = -\text{div}(\rho_w U + \rho_w V) \quad \text{sur } \Omega \times [0, \infty) \end{aligned} \quad \text{Eq. 0-57}$$

- L'air (Eq. 0-26) :

$$\begin{aligned} c_{gu} \dot{\epsilon} + a_{f1}(1-n)\dot{\epsilon}_v + c_{gw} \dot{P}_w + c_{gg} \dot{P}_g + c_{gT} \dot{T} + c_{gc} \dot{C} = \\ \text{div}(D_{2p} \nabla P_w) + \text{div}(D_{2p'} \nabla P_g) + \text{div}(D_{2w} \nabla Z) + \text{div}(D_{2T} \nabla T) + \text{div}(D_{2s} \nabla C) \\ = -\text{div}(\rho_a V_g + \rho_a HU) \quad \text{sur } \Omega \times [0, \infty) \end{aligned} \quad \text{Eq. 0-58}$$

- La chaleur (Eq. 0-36) :

$$\begin{aligned}
 c_{Tu} \dot{\epsilon} + a_{T1}(1-n) \dot{\epsilon}_v + c_{Tw} \dot{P}_w + c_{Tg} \dot{P}_g + c_{TT} \dot{T} + c_{Ts} \dot{C} = \\
 \text{div}(\lambda \text{grad}(T) - (C_{pw} \rho_w U + C_{pv} \rho_v V + C_{pv} \rho_v V_g + C_{pa} \rho_a V_g + C_{pc} M_c q_{tot})) \\
 (T - T_0) + h_{fg} (\rho_w V + \rho_v V_g) \quad \text{sur } O \times [0, \infty)
 \end{aligned} \tag{Eq. 0-59}$$

➤ La concentration chimique (Eq. 0-44) :

$$\begin{aligned}
 c_{su} \dot{\epsilon} + (CS_r - C_s \rho_s)(1-n) \dot{\epsilon}_v + c_{sw} \dot{P}_w + c_{sg} \dot{P}_g + c_{sT} \dot{T} + (c_{ss} + R_{re}) \dot{C} = \\
 \text{div}(D_{3P} \nabla P_w) + \text{div}(D_{3P'} \nabla P_g) + \text{div}(D_{3w} \nabla Z) + \text{div}(D_{3T} \nabla T) + \text{div}(D_{3c} \nabla C) \\
 - \lambda_1 \theta C - \lambda_2 \rho_s C_s = -\text{div}(q_{tot}) - \lambda_1 \theta C - \lambda_2 \rho_s C_s \quad \text{sur } O \times [0, \infty)
 \end{aligned} \tag{Eq. 0-60}$$

Les définitions des coefficients sont présentées dans l'annexe A.

4.8.2 Les conditions aux limites et initiales

Dans cette partie, le schéma général des conditions aux limites pour un problème Thermo-Hydro-Chimio-Mécanique est présenté. La frontière Γ du domaine Ω consiste en une superposition de cinq couches pour les différents constituants : Le squelette solide, l'eau, l'air, la chaleur et la chimie. La frontière de chaque constituant du milieu a deux types de condition aux limites : *Dirichlet* et *Neumann*. Le type de *Dirichlet* ou *essentiel* est défini sur les inconnues elles-mêmes, par contre, le type de *Neumann* ou *naturel* est défini sur les flux ou bien la dérivée de chaque inconnue.

➤ *Conditions aux limites mécaniques*

Sur le constituant de squelette solide on applique les conditions aux limites mécaniques. La première couche de la frontière Γ du domaine Ω , relative aux conditions aux limites mécaniques, est supposée être constituée de deux parties en fonction de ces conditions. La première partie notée Γ_u est à déplacements imposés et la deuxième partie notée Γ_σ est à forces ou contraintes imposées. Ces deux parties de la frontière Γ sont reliées par les expressions suivantes :

$$\Gamma = \Gamma_\sigma \cup \Gamma_u \quad \text{et} \quad \Gamma_\sigma \cap \Gamma_u = \emptyset \tag{Eq. 0-61}$$

Sur la frontière Γ_u à déplacements imposés, on applique :

$$u(x, t) = u_\Gamma(x, t) \quad \forall x \in \Gamma_u \tag{Eq. 0-62}$$

Sur la frontière Γ_σ à contraintes imposées, on considère :

$$T(x,t) = T_{\Gamma\sigma}(x,t) \quad \forall x \in \Gamma_\sigma \quad \text{Eq. 0-63}$$

$T_{\Gamma\sigma}$ est le vecteur de contrainte sur la frontière qui s'écrit :

$$T_{\Gamma\sigma}(x,t) = \sigma.n \quad \forall x \in \Gamma_\sigma \quad \text{Eq. 0-64}$$

avec :

- n, le vecteur normal à la surface de la frontière Γ_σ ;
- σ , le tenseur des contraintes.

➤ *Les conditions aux limites hydrauliques, gazeuses, thermiques, chimiques*

De même façon que précédemment, sur la frontière Γ , on considère une partie Γ_i Pour la condition de *Dirichlet* et d'autre partie Γ_{Qi} pour la condition de *Neumann* tel que i définit les conditions hydrauliques ($i=h$), les conditions gazeuses ($i=g$), les conditions thermiques ($i=T$), les conditions chimiques ($i=c$). Les relations suivantes relient ces deux parties de la frontière de Γ :

$$\Gamma = \Gamma_i \cup \Gamma_{Qi} \quad \text{et} \quad \Gamma_i \cap \Gamma_{Qi} = \phi \quad \text{Eq. 0-65}$$

Les pressions de l'eau sont souvent imposées au contact de surfaces libres ou de réservoirs sur la partie Γ_h de la frontière Γ comme :

$$P_w(x,t) = P_{w\Gamma}(x,t) \quad \forall x \in \Gamma_h \quad \text{Eq. 0-66}$$

Sur la partie Γ_{Qh} de la frontière on se donne les flux imposés de l'eau (\bar{q}_w) en fonction de la vitesse d'infiltration :

$$(\rho_w U)n - \bar{q}_w = 0 \quad \forall x \in \Gamma_{Qh} \quad \text{Eq. 0-67}$$

Une équation similaire peut également s'écrire pour la phase vapeur.

La pression de gaz est souvent imposée au contact de surfaces libres (la pression atmosphérique) ou de réservoirs de gaz sur la partie Γ_g de la frontière Γ comme :

$$P_g(x,t) = P_{g\Gamma}(x,t) \quad \forall x \in \Gamma_g \quad \text{Eq. 0-68}$$

Sur la partie Γ_{Qg} de la frontière considérée, on se donne les flux imposés d'air (\bar{q}_a) en fonction de la vitesse d'infiltration :

$$(\rho_a (V_a + HU)n - \bar{q}_a) = 0 \quad \forall x \in \Gamma_{Qg} \quad \text{Eq. 0-69}$$

Les températures imposées sur la partie Γ_T de la frontière Γ et les flux imposés de la chaleur (\bar{q}_h) sur la partie Γ_{QT} , en fonction de la vitesse de l'infiltration, sont :

$$T(x, t) = T_\Gamma(x, t) \quad \forall x \in \Gamma_T \quad \text{Eq. 0-70}$$

$$(Q)n - \bar{q}_h = 0 \quad \forall x \in \Gamma_{QT} \quad \text{Eq. 0-71}$$

La concentration imposée sur la partie Γ_c de la frontière Γ et les flux imposés du soluté (\bar{q}_c) sur la partie Γ_{Qc} sont :

$$C(x, t) = C_\Gamma(x, t) \quad \forall x \in \Gamma_c \quad \text{Eq. 0-72}$$

$$(q_{disp} + q_c)n - \bar{q}_c = 0 \quad \forall x \in \Gamma_{Qc} \quad \text{Eq. 0-73}$$

Où q_{disp} est le flux dû à la diffusion et dispersion et q_c est le flux dû à la convection. Dans le cas où on n'a que le flux de diffusion, cette condition s'appelle Neumann et en présence de flux de convection cette condition s'appelle Cauchy.

➤ *Conditions initiales*

On considère les notations suivantes afin de désigner les différentes conditions aux limites de notre problème.

$$\begin{aligned} u(x, t = 0) &= u_0(x) \\ P_w(x, t = 0) &= P_{w0}(x) \\ P_g(x, t = 0) &= P_{g0}(x) \\ T(x, t = 0) &= T_0(x) \\ C(x, t = 0) &= C_0(x) \end{aligned} \quad \text{Eq. 0-74}$$

Les valeurs de $u_0(x)$, $P_{w0}(x)$, $P_{g0}(x)$, $T_0(x)$ et $C_0(x)$ sont des valeurs initiales des inconnues.

4.8.3 Résolution des équations

Les équations Eq. 136, Eq. 137, Eq. 140, Eq. 142 et Eq. 145 avec leur condition aux limites et initiales sont non linéaires et on ne peut pas les résoudre analytiquement donc on va les résoudre avec les méthodes approchées. On utilisera la méthode des éléments finis dans l'espace et la méthode aux différences finis dans le temps. On rappelle qu'un problème aux limites comme :

$$\begin{aligned} A(u) &= 0 && \text{sur } \Omega \\ B(u) &= 0 && \text{sur } \Gamma \end{aligned} \quad \text{Eq. 0-75}$$

est équivalent au de problème suivant :

$$\int_{\Omega} \omega^T A(u) d\Omega + \int_{\Gamma} \varpi^T B(u) d\Gamma = 0 \quad \forall \omega, \varpi \quad \text{Eq. 0-76}$$

En multipliant chacune des équations Eq. 136, Eq. 137, Eq. 140, Eq. 142 et Eq. 145 par une fonction ω et leurs conditions aux limites par ϖ , puis en *l'intégrant par partie* avec l'utilisation de la formule *Green – Stokes*, on retrouve la forme intégrale du problème. On démontre l'existence et l'unicité de cette solution par le *lemme de Lax-Milgram*

Remarque 1 : Formule de Green – Stokes ou intégration par partie en contraintes sur un domaine considéré de Ω avec la frontière Γ , représenté par :

$$\int_{\Omega} \Phi \text{div}(\sigma) d\Omega = + \int_{\Gamma} \Phi(\sigma \cdot n) d\Gamma - \int_{\Omega} \sigma \cdot \text{grad}(\Phi) d\Omega \quad \text{Eq. 0-77}$$

Remarque 2 : Quelque soit la fonction de pondération de ω et de ϖ , la relation Eq. 0-76 est valide, donc on va choisir une relation simple qui est la méthode de *Galerkin* qui consiste à prendre en compte les mêmes fonctions de pondération que les fonctions d'interpolation. Notre choix pour les fonctions de pondération est zéro sur les frontières Dirichlet et pour le domaine Ω et les frontières Neumann on utilisera la fonction d'interpolation (N) qui va être présentée ultérieurement.

Les formes faibles des équations Eq. 136, Eq. 137, Eq. 140, Eq. 142 et Eq. 145 et leurs conditions aux limites qui résultent des traitements mathématiques mentionnés ci-dessus s'écrivent :

➤ Squelette solide :

$$\int_{\Omega} (\mathbf{LN})^T \boldsymbol{\sigma} d\Omega = \int_{\Gamma_{\sigma}} N^T T_{\Gamma} d\Gamma + \int_{\Omega} N^T b d\Omega \quad \text{Eq. 0-78}$$

où Ω est le domaine considéré de frontière Γ .

➤ Eau :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} N^T (c_{wu} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + b_{f1} (1-n) \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_v + c_{ww} \dot{P}_w + c_{wg} \dot{P}_g + c_{wT} \dot{T} + c_{ws} \dot{C}) d\Omega \\ & - \int_{\Omega} (\nabla N)^T (\rho_w U + \rho_w V) + \int_{\Gamma_{Qh}} N^T (\bar{q}_w + \bar{q}_v) d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad \text{Eq. 0-79}$$

➤ Air :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} N^T (c_{gu} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + a_{f1} (1-n) \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_v + c_{gw} \dot{P}_w + c_{gg} \dot{P}_g + c_{gT} \dot{T} + c_{gc} \dot{C}) d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \nabla N (\rho_a V_g + \rho_a H U) d\Omega + \int_{\Gamma_{Qg}} N^T (\bar{q}_g) d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad \text{Eq. 0-80}$$

➤ Chaleur :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} N^T (c_{Tu} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + a_{T1} (1-n) \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_v + c_{Tw} \dot{P}_w + c_{Tg} \dot{P}_g + c_{TT} \dot{T} + c_{Ts} \dot{C}) d\Omega - \\ & \int_{\Omega} (\nabla N)^T (C_{pw} \rho_w U + C_{pv} \rho_w V + C_{pv} \rho_v V_g + C_{pa} \rho_a V_g + C_{pc} M_c q_{tot}) (T - T_0) d\Omega \\ & + \int_{\Omega} (\nabla N)^T (\lambda \text{grad}(T)) d\Omega + \int_{\Gamma_{Qr}} N^T \bar{q}_h = 0 \end{aligned} \quad \text{Eq. 0-81}$$

➤ Concentration chimique :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} N^T (c_{su} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + (C S_r - C_s \rho_s) (1-n) \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_v + c_{sw} \dot{P}_w + c_{sg} \dot{P}_g + c_{sT} \dot{T} + (c_{ss} + R_{re}) \dot{C}) d\Omega \\ & + \int_{\Omega} (\nabla N)^T q_{tot} + \int_{\Omega} N^T (\lambda_1 \theta C + \lambda_2 \rho_s C_s) d\Omega - \int_{\Gamma_{Qc}} N^T \bar{q}_c d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad \text{Eq. 0-82}$$

4.8.4 Discrétisation dans l'espace

Le principe de la méthode des éléments finis consiste à considérer le domaine étudié comme un ensemble d'éléments distincts de forme géométrique simple. On traite les équations du problème pour chaque élément en émettant des hypothèses sur la variation des inconnues au niveau de chacun des éléments. Ensuite, on s'intéresse aux conditions inter

élémentaire puis on assemblera tous les éléments. Cela pour obtenir finalement le système d'équations du problème sur tout le domaine idéalisé.

Dans le cas présent, en déformation plane, on a choisi des éléments carrés à 4 nœuds avec fonctions d'interpolation identiques pour u , P_w , P_g , P_w , T et Concentration (C) dans un élément définis par la matrice N . Pour la région discrétisée,

$$\begin{aligned} \{u(x, t)\} &= Nu_w(t) \\ \{P_w(x, t)\} &= NP_w(t) \\ \{P_g(x, t)\} &= NP_g(t) \\ \{T(x, t)\} &= NT(t) \\ \{C(x, t)\} &= NC(t) \end{aligned} \quad \text{Eq. 0-83}$$

Les vecteurs $\{u(x,t)\}$, $\{P_w(x,t)\}$, $\{P_g(x,t)\}$, $\{T(x,t)\}$ et $\{C(x,t)\}$ sont les valeurs des inconnues dans les éléments, alors que les vecteur du coté droit ($u(t)$, $P_w(t)$, $P_g(t)$, $T(t)$ et $C(t)$) sont les valeurs dans les nœuds.

Les déformations, dans l'hypothèse des petites perturbations, peuvent s'écrire sous la forme matricielle suivante :

$$\{\varepsilon(x, t)\} = L\{u(x, t)\} = LN\{u(t)\} \quad \text{Eq. 0-84}$$

avec L matrice de dérivation. Ou bien :

$$\{\varepsilon(x, t)\} = B\{u(t)\} \quad \text{avec } B = LN \quad \text{Eq. 0-85}$$

Les éléments utilisés sont isoparamétriques donc les nœuds sont à la fois nœuds géométriques et nœuds d'interpolation. Les coordonnées de chaque élément (x,y) se déterminent en fonction des coordonnées (X_i, Y_i) des nœuds de l'élément considéré. On note que le calcul des intégrales se fait numériquement par une méthode de quadrature. Cela signifie que l'on approxime les intégrales par une combinaison pondérée d'évaluation des intégrandes en *points de Gauss*.

Après les traitements du système des équations initiales par la méthode des éléments finis, on retrouve la forme matricielle semi discrétisée du problème thermo-hydro-chimio-mécanique qui devrait ensuite être discrétisé dans le temps, comme suit :

$$\begin{bmatrix} [R] & [C_w] & [C_g] & [C_T] & [C_s] \\ [C_{wu}] & [C_{ww}] & [C_{wg}] & [C_{wT}] & [C_{ws}] \\ [C_{gu}] & [C_{gw}] & [C_{gg}] & [C_{gT}] & [C_{gs}] \\ [C_{Tu}] & [C_{Tw}] & [C_{Tg}] & [C_{TT}] & [C_{Ts}] \\ [C_{su}] & [C_{sw}] & [C_{sg}] & [C_{sT}] & [C_{ss}] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{u} \\ \dot{p}_w \\ \dot{p}_g \\ \dot{T} \\ \dot{C} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} [0] & [0] & [0] & [0] & [0] \\ [0] & [K_{ww}] & [K_{wg}] & [K_{wT}] & [K_{ws}] \\ [0] & [K_{gw}] & [K_{gg}] & [K_{gT}] & [K_{gs}] \\ [0] & [K_{Tw}] & [K_{Tg}] & [K_{TT}] & [K_{Ts}] \\ [0] & [K_{sw}] & [K_{sg}] & [K_{sT}] & [K_{ss}] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u \\ p_w \\ p_g \\ T \\ C \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \dot{F}_\sigma \\ F_w \\ F_g \\ F_T \\ F_s \end{Bmatrix} \quad \text{Eq. 0-86}$$

Les coefficients sont présentés dans l'annexe B.

4.8.5 Discrétisation dans le temps

Dans cette partie, On s'intéresse à la discrétisation temporelle et à l'intégration dans le temps. Il existe de nombreuses méthodes, tant implicites qu'explicites, qui supposent une variation linéaire des inconnues dans l'intervalle du temps $t_{n+1}-t_n$, parmi lesquelles on a choisi la méthode implicite de Θ . Les valeurs du vecteur des inconnues P , à un instant donné t dans l'intervalle du temps $t_{n+1}-t_n$ peuvent être exprimées comme :

$$\{P(t)\} = \{P(t_n)\} + \frac{t-t_n}{t_{n+1}-t_n} \{P(t_{n+1}) - P(t_n)\} \quad \text{Eq. 0-87}$$

Sachant que $t_n < t < t_{n+1}$ et que l'on peut poser :

$$\Theta = \frac{t-t_n}{t_{n+1}-t_n} \quad \text{et} \quad \Theta \in [0,1] \quad \text{Eq. 0-88}$$

en mettant cette définition dans l'équation Eq. 0-87 on obtient :

$$\{P(t)\} = (1-\Theta)\{P(t_n)\} + \Theta\{P(t_{n+1})\} \quad \text{Eq. 0-89}$$

La dérivée du vecteur des inconnues P selon la méthode de *Euler* peut s'écrire:

$$\{\dot{P}(t)\} = (\{P(t_{n+1})\} - \{P(t_n)\}) / \Delta t \quad \text{Eq. 0-90}$$

On trouve aussi, l'intégrale du vecteur des inconnues P , comme:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \{P(t)\} dt = ((1-\Theta)\{P(t_n)\} + \Theta\{P(t_{n+1})\}) \Delta t \quad \text{Eq. 0-91}$$

On peut écrire les relations ci-dessus pour les vecteurs de déformation, pression de l'eau, pression du gaz, température et concentration chimique. On obtient la discrétisation temporelle du système d'équation Eq. 0-86 qui prendra la forme suivante :

$$\begin{aligned}
 & \begin{bmatrix} [R] & [C_w] & [C_g] & [C_T] & [C_s] \\ [C_{wu}] & [C_{ww}] + \theta\Delta t[K_{ww}] & [C_{wg}] + \theta\Delta t[K_{wg}] & [C_{wT}] + \theta\Delta t[K_{wT}] & [C_{ws}] + \theta\Delta t[K_{ws}] \\ [C_{gu}] & [C_{gw}] + \theta\Delta t[K_{gw}] & [C_{gg}] + \theta\Delta t[K_{gg}] & [C_{gT}] + \theta\Delta t[K_{gT}] & [C_{gs}] + \theta\Delta t[K_{gs}] \\ [C_{Tu}] & [C_{Tw}] + \theta\Delta t[K_{Tw}] & [C_{Tg}] + \theta\Delta t[K_{Tg}] & [C_{TT}] + \theta\Delta t[K_{TT}] & [C_{Ts}] + \theta\Delta t[K_{Ts}] \\ [C_{su}] & [C_{sw}] + \theta\Delta t[K_{sw}] & [C_{sg}] + \theta\Delta t[K_{sg}] & [C_{sT}] + \theta\Delta t[K_{sT}] & [C_{ss}] + \theta\Delta t[K_{ss}] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta u \\ \Delta P_w \\ \Delta P_g \\ \Delta T \\ \Delta C \end{Bmatrix} \\
 & = \begin{Bmatrix} \Delta F_\sigma \\ \theta\Delta t\Delta F_w \\ \theta\Delta t\Delta F_g \\ \theta\Delta t\Delta F_T \\ \theta\Delta t\Delta F_s \end{Bmatrix} + \Delta t \begin{Bmatrix} 0 \\ F_{wn} - [K_{ww}]P_{wn} - [K_{wg}]P_{gn} - [K_{wT}]P_{Tn} - [K_{ws}]P_{sn} \\ F_{gn} - [K_{gw}]P_{wn} - [K_{gg}]P_{gn} - [K_{gT}]P_{Tn} - [K_{gs}]P_{sn} \\ F_{Tn} - [K_{Tw}]P_{wn} - [K_{Tg}]P_{gn} - [K_{TT}]P_{Tn} - [K_{Ts}]P_{sn} \\ F_{sn} - [K_{sw}]P_{wn} - [K_{sg}]P_{gn} - [K_{sT}]P_{Tn} - [K_{ss}]P_{sn} \end{Bmatrix} \quad \text{Eq. 0-92}
 \end{aligned}$$

où P_{wn} , P_{gn} , P_{Tn} et P_{sn} sont les valeurs de l'étape n de la pression de l'eau, de la pression du gaz, de la température et de la concentration chimique. Dans la première étape ils sont les valeurs initiales du problème.

On note que pour $\Theta > 0,5$ le schéma est inconditionnellement stable et la seule contrainte est celle de la précision (Zienkiewicz, 1977). $\Theta = 1$ correspond au schéma explicite (méthode d'*Euler progressive*). Cette méthode ne donne pas de résultats satisfaisants pour les équations différentielles mal conditionnées. $\Theta = 0$ correspond au schéma implicite (méthode d'*Euler rétrograde*) et avec $\Theta = 0,5$ on obtient l'algorithme de *Crank-Nicholson*.

4.8.6 Méthode de résolution

Les formulations proposées et leur système matriciel sont non linéaires. Les sources de non-linéarité sont les composantes non linéaires par rapport aux inconnues du problème et aussi les paramètres physiques dépendent des inconnues du problème telle que : le coefficient de dispersion, la perméabilité à l'eau, la perméabilité à l'air et les paramètres mécanique du sol dans le modèle *hyperbolique*. La formulation du problème non linéaire après traitements concernant la méthode des éléments finis, prendra la forme :

$$\Psi(u_{n+1}) = F_{n+1} - R_{n+1} = K_{n+1}u_{n+1} - R_{n+1} \quad \text{Eq. 0-93}$$

Cela pour chaque $n+1$: le pas de charge courant. Ψ est le vecteur de résidus. On cherche à résoudre ce système, qui consiste à trouver un vecteur u tel que Ψ devient le plus proche possible de zéro. La solution exacte rendra bien évidemment, le résidu nul. Il existe différentes méthodes de résolution comme (Dhatt et Touzot, 1981 ; Zienkiewicz, 1977 ; Bathe, 1982 et Simo et Hughes, 1998) :

- les méthodes classiques comme itération directe
- les méthodes de *Newton - Raphson* et de *Newton Raphson modifié*
- les méthodes incrémentales
- et les schémas quasi – Newtons et accélérateurs de convergence parmi lesquels le schéma le plus souvent utilisé est celui de *BFGS (Boyden - Fletcher – Goldfarb - Shanno)*

Les méthodes de *Newton - Raphson* et de *Newton Raphson modifiée* ont été implantées dans le code de calcul et on les utilise pour résoudre les problème thermo-hydro-chimio-mécanique couplé. Ces méthodes, grâce à leur simplicité ainsi que leur capacité à traiter des problèmes non linéaires de différents types sont les plus utilisées (Bathe, 1982).

4.8.7 Critère de convergence

Sur chaque étape d’itération du pas de charge, on vérifie le critère de convergence. Si le critère de convergence est satisfait, on arrête le processus itératif et on procède à l’étape de chargement suivant. La définition d’un critère de convergence bien adapté au problème traité est indispensable.

Dans le code aux éléments finis normalement, deux critères de convergence sont implantés. On vérifie d’abord la convergence par la variation du vecteur incrémental des inconnues qui doit être zéro entre deux itérations. En utilisant la norme relative au maximum :

$$\|n\| = \text{Max}_j \left| \frac{\Delta u_j}{u_j} \right|^{(i)} \quad \text{Eq. 0-94}$$

i étant l’itération et j représentant le point de Gausse. La norme des moindres carrés relatifs est deuxième critère de convergence :

$$\|n\| = \frac{\sqrt{\{\Delta u^i\}^T \{\Delta u^i\}}}{\sqrt{\{u^i\}^T \{u^i\}}} \quad \text{Eq. 0-95}$$

Pour atteindre le convergence, il faut que $\|n\| < Tol_u$.

Parallèlement, on peut estimer l’erreur en terme de vecteur des résidus :

$$\|n\| = \frac{\sqrt{\{\{R_{n+1}^i\} - \{F_{n+1}^i\}\}^T \{\{R_{n+1}^i\} - \{F_{n+1}^i\}\}}}{\sqrt{\{\{R_{n+1}\} - \{F_n\}\}^T \{\{R_{n+1}\} - \{F_n\}\}}} < Tol_\psi \quad \text{Eq. 0-96}$$

4.8.8 Code de calcul

Dans cette partie, on décrit le code de calcul θ -STOCK (Gatmiri 1997) consacré au comportement thermo-hydro-mécanique des barrières ouvragées. Dans le cadre de cette thèse, le modèle du comportement thermo-hydro-chimio-mécanique a été implanté dans ce code de calcul. Il s'agit d'ajouter un élément à six degrés de libertés en déformation plan. Pour cela la sous-routine STIF4S qui calcule la matrice de rigidité décrit l'équation Eq. 0-92 a été ajoutée dans la sous-routine STIFF. Les modifications nécessaires dans les parties d'acquisition des données, d'initialisation, de résolution du système et d'écriture des résultats sont effectuées.

Le logiciel commence par un programme principal (Subroutine MARKAZ), qui contient cinq parties principales. Les parties principales et les sous-routines correspondantes sont décrites ci-dessous (Figure 0-6) :

4.8.8.1 Acquisition des données

Les données principales sont lues du fichier d'entrée dans cette étape. Les données principales sont : les données géométriques, Les conditions aux limites, les propriétés mécaniques, thermiques, hydrauliques et chimiques des matériaux, et les conditions de chargement. Les sous-routines correspondantes sont :

- DIM1 : lit les données basique telle que le nombre total des nœuds et des éléments et crée les mémoires nécessaires.
- INPUT : lit et stocke les données principales telle que : les propriétés géométriques et la nature des matériaux et les conditions aux limites et initiales et les étapes de chargement.
- DIM2 : évalue le nombre des degrés de liberté et la dimension des différentes matrices, et crée donc la mémoire ainsi que les tableaux nécessaires correspondants à ces composantes au cours de l'exécution de calcul.
- DETNA : détermine la mémoire accordée à la construction et au traitement de la matrice de rigidité dans des conditions symétriques et non symétriques. Celle –ci est stockée en *ligne de ciel*.
- RREAD, RREAD1 : lisent les données nécessaires dans le cas où on utilise le mode de RESTART pour l'analyse.

4.8.8.2 Initialisation

Le logiciel commence par calculer les contraintes et les déformations initiales. Les sous-routines correspondantes sont :

- INIT1 : initialise les tableaux de contraintes et de déplacements.
- INIT2 : initialise les valeurs nodales du déplacement, de la pression de l'eau, de la pression de l'air, de la température et de la concentration chimique suivant les conditions initiales.
- INIT3 : détermine et imprime les contraintes initiales.
- BARGOS : Dans chaque boucle et sur un incrément du chargement, effectue les calculs associés aux charges appliquées au niveau des éléments et des transformations de ces charges sur les nœuds à l'aide des sous-routines suivantes : LOADNODE (pour la partie mécanique), FLOTNODE (pour la partie thermique), FLOWNODE (pour la pression de l'eau), FLOANODE (pour la pression de l'air), FLOSNODE (pour la partie chimique)
- ZERO : met à zéro la mémoire consacrée aux inconnues.
- ZERO1 : met à zéro les indicateurs définissant l'état d'un élément vis à vis de la plasticité pour le traitement élasto-plastique.
- ZERO2 : met à zéro les champs de vitesse de l'eau qui est calculé à partir des inconnues dans chaque étape.
- LSTP : dans chaque étape d'itération, on ajoute les valeurs nodales des charges appliquées par l'extérieur à celles calculées à BARGOS pour chaque incrément de chargement.

4.8.8.3 Matrice de rigidité

Après la construction des matrices de rigidités élémentaires, en faisant la somme de ces matrices, la matrice de rigidité globale est déterminée dans la sous-routine STIFF. Les matrices de rigidité élémentaires sont calculées en quatre sous-routines suivantes (Figure 0-7) :

- STIF4D : établit la matrice de rigidité des éléments drainés.
- STIF4C : établit la matrice de rigidité des éléments saturés.
- STIF4U : établit la matrice de rigidité des éléments non saturés.
- STIF4S : établit la matrice de rigidité des éléments chimiques

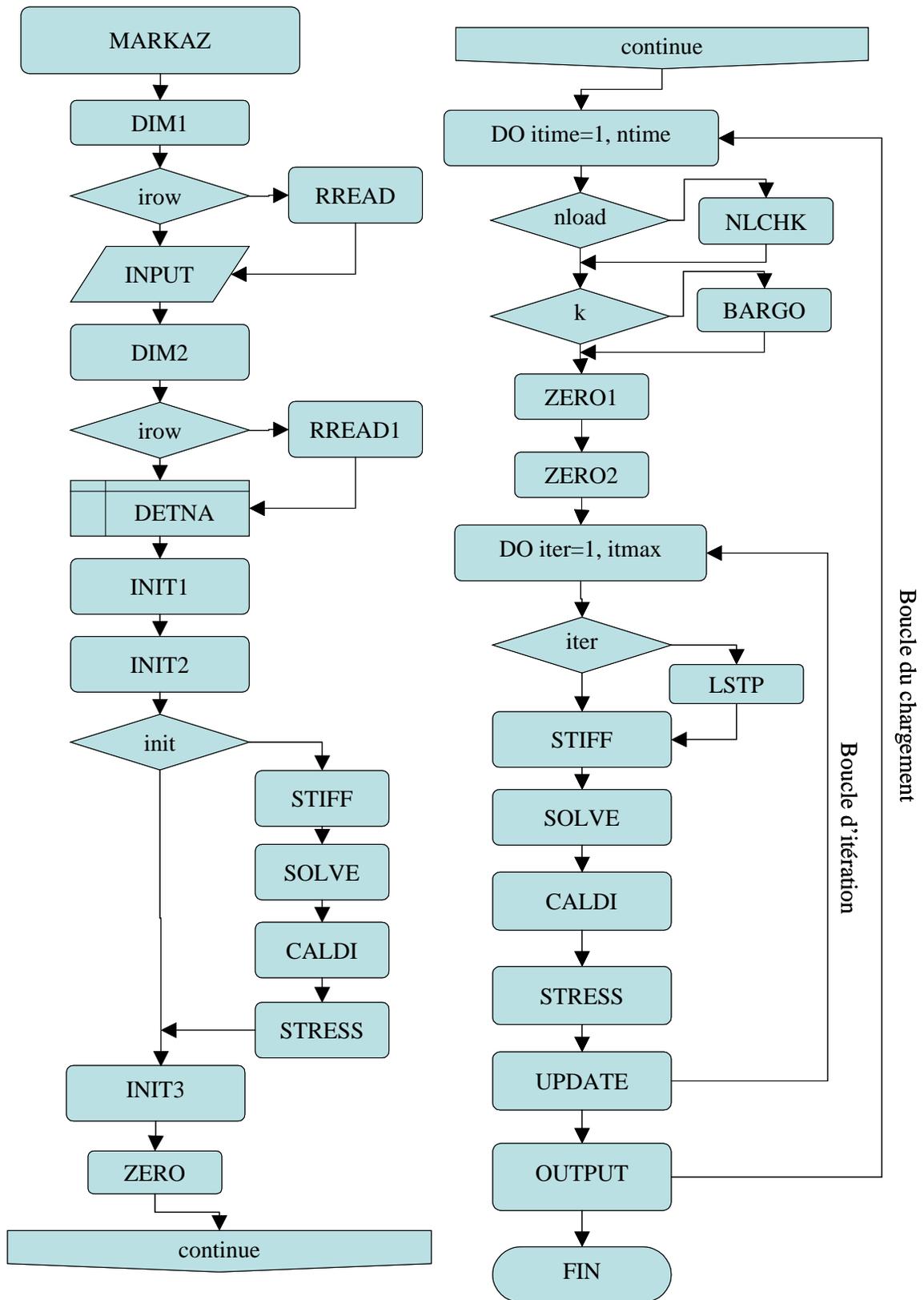


Figure 0-6 Organigramme du code 0-STOCK Ver. 2.1

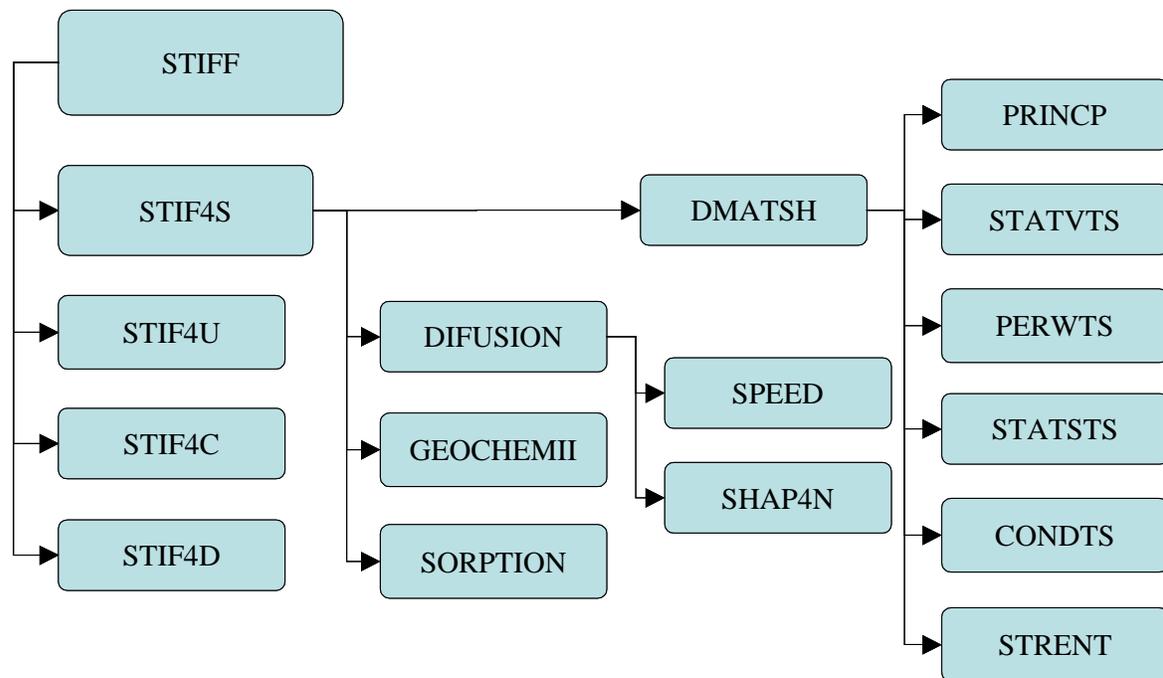


Figure 0-7 Organigramme de la subroutine STIF4S

- DMATSH : correspond au comportement élastique linéaire et non linéaire hyperbolique.
- DIFUSION : calcule le tenseur de dispersion de concentration chimique pour les sols saturés et non saturés.
- SPEED : détermine la vitesse de l'eau pour les sols saturés et non saturés.
- SHAP4N : calcule les fonctions d'interpolation.
- PRINCP : calcule les contraintes principales.
- STATVTS : détermine l'indice des vides et ses dérivés.
- PERWTS : calcule la perméabilité à l'eau.
- PERGTS : calcule la perméabilité à l'air.
- STATSTS : détermine le degré de saturation et ses dérivés.
- CONDTS : calcule les conductivités thermiques.
- STRENT : calcule la résistance au cisaillement.
- SORPTION : détermine la concentration adsorbée sur les éléments pour les différents modèles d'adsorption.
- GEOCHEMI : calcule la dérivé de concentration soluble par rapport à concentration adsorbée pour les différents modèles d'adsorption.

4.8.8.4 Résolution du système

En ayant la matrice de rigidité globale et le vecteur de force, le logiciel calcule les inconnues. Les inconnues, pour un élément chimique non saturé, sont les pressions interstitielles de l'eau et l'air, les déplacements, les températures et la concentration chimique aux différents nœuds. La subroutine correspondante est :

- SOLVE : résout le système d'équations en inversant la matrice de rigidité globale.

Une fois que le vecteur des inconnues est trouvé, il faudrait renouveler les valeurs des contraintes et des déformations. Les sous-routines correspondantes sont :

- STRESS : calcul les valeurs des contraintes.
 - STR4ND : calcule les contraintes pour un élément de type drainé.
 - STR4NC : calcule les contraintes pour un élément de type saturé.
 - STR4NU : calcule les contraintes pour un élément de type non saturé.
 - STR4NS : calcule les contraintes pour un élément de type chimique.
- UPDATE : renouvelle les valeurs des contraintes et des déformations. Pour les conditions élastiques, le programme procède à la phase finale qui n'est que l'écriture des résultats. Alors que pour les processus itératifs, il faudrait déterminer le vecteur des résidus et vérifier la convergence du problème. Cela pour se rapprocher le plus de la réponse exacte du système.
- RESIDU : construit le vecteur des résidus à partir des résultats obtenus lors de l'itération courante.
- CONVER : vérifie la convergence du processus itératif. Si le problème a convergé, on procède à l'écriture des résultats si non on continue.

4.8.8.5 Ecriture des résultats

- OUTPUT : après la fin de chaque boucle d'une itération, écrit les résultats dans un fichier de la sortie. Selon le cas drainé, saturé, non-saturé ou élément chimique, les résultats finaux du programme sont les déformations, les pressions de l'eau et du gaz, la température et la concentration chimique ainsi que les contraintes et les différents paramètres caractéristiques tels que degré de saturation, indice des vides, conductivité thermique, perméabilité à l'eau et à l'air, coefficient de dispersion, etc.

4.9 Conclusion

Dans ce chapitre on a présenté les équations macroscopiques du problème thermo-hydro-chimio-mécanique dans le milieu multiphasique à partir de : l'équation d'équilibre du système, de la loi de comportement du système, des équations de conservation de la masse et des transferts des constituants de l'eau, de l'air, de l'espèce chimique et aussi de l'équation de l'énergie du système.

La loi de comportement est linéaire et non linéaire (hyperbolique), tout en considérant les déformations dues aux variations de la température et de la concentration du constituant chimique.

Le transfert de la vapeur d'eau a été établi avec la théorie de Philipe et de Vries (1957). Le transfert de l'eau liquide a été obtenu en utilisant la loi de Darcy généralisée et on a pris en compte le potentiel osmotique qui peut intervenir dans le cas des sols fins.

Le transfert de gaz a été obtenu en utilisant la loi de Darcy. La partie dissoute du gaz dans l'eau a été modélisée par le coefficient de Henry.

La diffusion, la convection et les réactions chimiques ont été envisagées pour modéliser le transfert du constituant chimique. La pression osmotique et la notion d'efficacité osmotique qui modifient la vitesse de transfert de l'eau, ont des effets sur le transfert du soluté. La vitesse de migration du soluté peut être changée par différents modes d'adsorption.

Basé sur la loi de Fourier et aussi sur la convection, le transfert de chaleur a été examiné. La conductivité thermique du système est proportionnelle à la conductivité thermique de chaque constituant et à sa fraction. Dans la conservation de l'énergie, la chaleur latente d'évaporation et les chaleurs spécifiques de tous les constituants sont considérés. Il convient de mentionner que le constituant chimique influe sur la distribution de la chaleur dans le milieu via l'existence de sa chaleur spécifique dans les équations thermiques et aussi via la convection de chaleur suite au changement de la vitesse d'eau due au potentiel osmotique.

On a développé l'équation différentielle de chaque constituant en combinant les expressions de l'écoulement et de la conservation. La forme matricielle finale du système des équations différentielles a été intégrée dans le code aux éléments finis (θ -STOCK).

Afin d'obtenir la forme matricielle finale, après avoir établi le système des équations de comportement thermo-hydro-chimio-mécanique, les conditions initiales et les conditions aux limites du problème ont été définies ; la formulation intégrale et variationnelle approchée du

problème ont été ensuite développées. En passant par la discrétisation dans l'espace et la discrétisation dans le temps, la forme matricielle finale a été obtenue.

Le système d'équations de comportement thermo-hydro-chimio-mécanique proposé et leur système matriciel sont non linéaires. Cela nous conduit à résoudre le problème avec les méthodes itératives comme Newton-Raphson modifié qui est adoptée dans le code aux éléments finis.

Une brève description de l'architecture du code θ – STOCK déjà existant et de la partie concernant le module THCM mis au point dans ce travail ont été données.

Dans le chapitre suivant, on présentera la vérification et la validation du développement du module THCM de code θ – STOCK. Il convient de mentionner que la vérification de la formulation THM a été effectuée dans le cadre de la thèse de Jenab (2000) ; les travaux suivants valideront donc le développement de la partie THCM.

CHAPITRE CINQ: VALIDATION ET APPLICATION NUMERIQUE DU CODE DE CALCUL

5.1 Introduction

Le présent chapitre est consacré à la validation et aux applications des développements effectués dans le code de calcul aux éléments finis θ – STOCK. Les développements dans ce code consistent en l'ajout du comportement THCM des géomatériaux multiphasiques décrit dans le chapitre précédent.

Ce chapitre est divisé en quatre parties : premièrement un exemple d'étude de comportement thermo-hydro-mécanique dans un sol multiphasique (non saturé) afin de vérifier le couplage THM ; deuxièmement, trois cas correspondants aux conditions de transfert de polluants dans les milieux saturés ; troisièmement, trois exemples traitant les problèmes liés aux transferts de solutés dans les sols multiphasiques (non saturés) et l'interaction sol-soluté ; et enfin, quatre applications du code dans les milieux multiphasiques pour illustrer les capacités du code (Tableau 5-1).

Dans ce chapitre, on validera le code à partir de résultats analytiques existants. Dans le cas sans solution analytique, les validations sont faites à partir des résultats expérimentaux et/ou des résultats d'autres codes de calcul.

Tableau 5-1 Les exemples de validation et vérification de comportement THMC dans le code de calcul θ -STOCK

Exemples de validation et vérification	Paragraphe	composant						
		Tem.	Hydrauliques		Chimiques			Méc.
			eau	air	Conv.	Diff.	Reac.	
Echauffement d'une argile	5-2-1	oui	oui	oui	—	—	—	oui
Diffusion pure	5-3-1	—	oui	—	—	oui	—	—
Convection	5-3-2	—	oui	—	oui	—	—	—
Diffusion et convection	5-3-3	—	oui	—	oui	oui	—	—
Transfert du Nacl	5-4-1	—	oui	oui	oui	oui	—	—
Transfert du Pb	5-4-2	—	oui	oui	oui	oui	oui	—
Courbes d'élutions du Zn	5-4-3	—	oui	oui	oui	oui	oui	—
Transfert du Cu et Zn	5-5-1	—	oui	oui	oui	oui	oui	—
Efficacité osmotique	5-5-2	—	oui	oui	oui	oui	—	—
Interaction mécanique	5-5-3	—	oui	oui	oui	oui	—	oui
Transfert THCM	5-5-4	oui	oui	oui	oui	oui	oui	oui

5.2 Couplage THM

Tout d'abord, on va vérifier le couplage THM du code sans les effets chimiques à travers des modules THCM.

5.2.1 L'échauffement d'une argile non saturée –Villar et al. (1993)

5.2.1.1 L'expérience en laboratoire

On modélise numériquement une expérience réalisée en laboratoire par Villar et al. (1993) (CIEMAT) sur une montmorillonite d'Espagne. L'échantillon d'argile a été compacté de façon unidimensionnelle avec une teneur en eau de 12,4%, à une masse volumique à l'état sec de 1,62 Mg/m³ à l'intérieur d'une cellule métallique de 14,6 cm de hauteur et de 15 cm de diamètre. Le dispositif qui sert à chauffer l'échantillon de sol est placé au milieu de la cellule dans sa partie supérieure (Figure 5-1). Il permet de chauffer jusqu'à 100°C. Le champ de température a été déterminé à l'aide de 9 thermocouples placés à trois niveaux différents dans l'échantillon. Lors de cette expérience, la température des bords a été maintenue

constante à l'aide d'une circulation d'eau tiède de 25 à 30° C afin d'éviter l'influence des variations dues à la température externe. Toutes les limites sont imperméables à l'eau et à l'air, à l'exception de celle du haut qui laisse passer l'air. Dans tout l'échantillon, la température initiale (T0) est fixée à 20 °C. Au départ, le degré de saturation et l'indice des vides sont respectivement de 50% et de 0,73. Le régime permanent est atteint environ une heure après le début de l'échauffement.

5.2.1.2 Les caractéristiques du matériau

L'essai ci-dessus a été simulé avec les modules THM intégré dans le code par Jenab (2000) dans le cadre de sa thèse. Dans cette partie, on utilisera pour le matériau les mêmes caractéristiques que celles utilisées par Jenab.

Les données expérimentales du CIEMAT fournissent l'expression de la perméabilité à l'eau en fonction de l'indice des vides (e) et du degré de saturation (S_r), comme suit :

$$K_w = 1.2 \times 10^{-9} \cdot 10^{5e} \left[\frac{S_r - 0,05}{0,95} \right]^3 \quad (\text{m/s}) \quad \text{Eq. 5-1}$$

La relation retenue pour la perméabilité à l'air du milieu est la suivante :

$$K_g = 3 \times 10^{-10} \frac{\gamma_g}{1,846 \times 10^{-5}} [e(1 - S_r)]^4 \quad (\text{m/s}) \quad \text{Eq. 5-2}$$

La surface d'état de l'indice des vides se détermine par :

$$e = \frac{1,73}{\exp\left[\frac{1,5 \left(\frac{\sigma - p_g}{p_{atm}} \right) + 0,15 \left(1 - \frac{\sigma - p_g}{80 \times 10^4} \right) \left(\frac{p_g - p_w}{p_{atm}} \right)}{K_b} \right] \exp[-3 \times 10^{-4} (T - T_0)]} - 1 \quad \text{Eq. 5-3}$$

Et la surface d'état du degré de saturation prendra la forme suivante :

$$S_r = 1 - [1,0 + (-2,088 \times 10^{-8})(\sigma - p_g)] [1 - \exp((-1,08855 \times 10^{-4})(p_g - p_w))] \exp(10^{-5}(T - T_0)) \quad \text{Eq. 5-4}$$

Les paramètres des surfaces d'état indice des vides et du degré de saturation sont facultatifs. On note que, dans le but de retrouver un jeu de paramètres qui représente bien le sol considéré, on a effectué une étude approfondie sur les données correspondant aux propriétés mécaniques, hydrauliques et thermiques du milieu. Cela surtout du fait que les informations fournies par les expérimentateurs du CIEMAT et des chercheurs tels que Thomas et al. (1994, 1998) qui ont essayé de modéliser ce problème, sont limitées.

Par ailleurs, les propriétés thermiques du milieu sont données sur le Tableau 5-2

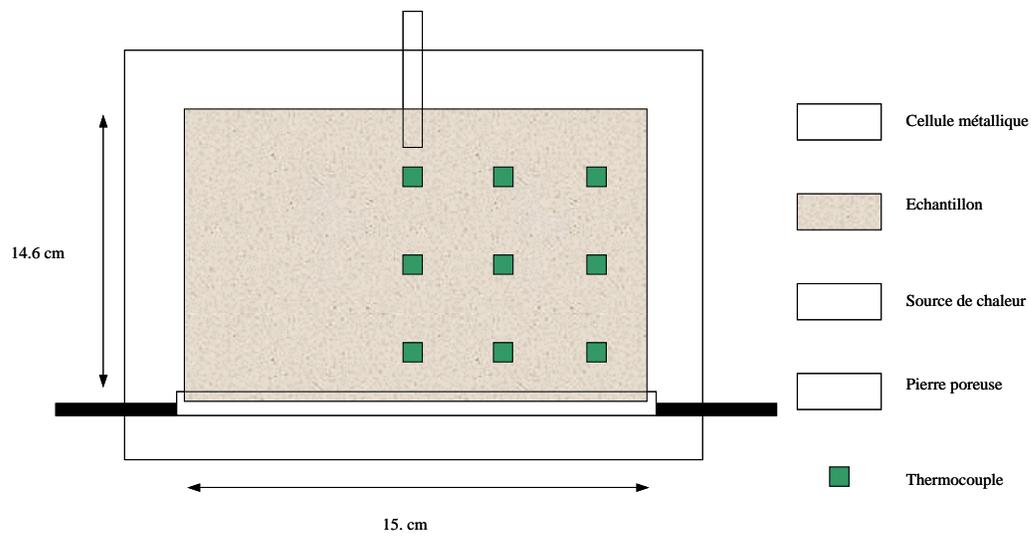


Figure 5-1 Dispositif expérimental.

5.2.1.3 Simulation numérique

Le maillage des éléments finis utilisé afin de réaliser les simulations numériques est présenté sur la Figure 5-2.

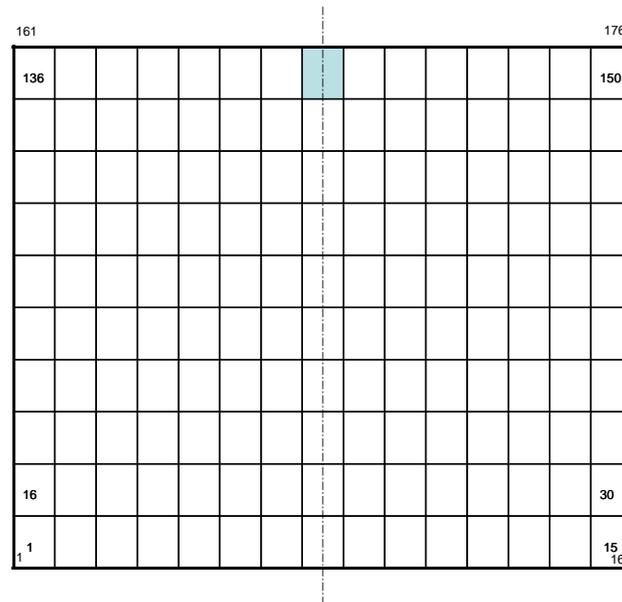


Figure 5-2 Maillage utilisé pour la simulation numérique.

Tableau 5-2 Propriétés thermiques du matériau.

Propriétés	Unit	Valeurs
Capacité calorifique des grains de sol	Cps (J/kg°C)	800
Capacité calorifique de l'eau	Cpw (J/kg°C)	4180
Capacité calorifique de la vapeur	Cpv (J/kg°C)	1870
Capacité calorifique de l'air	Cpg (J/kg°C)	1000
Conductivité thermique des grains de sol	λ_s (W/m°C)	0,9
Conductivité thermique de l'eau	λ_s (W/m°C)	0,6
Conductivité thermique de l'air	λ_s (W/m°C)	0,0258
Chaleur latente de l'évaporation	h_{fg} (J/kg)	$2,40 \times 10^6$

- **Conditions aux limites :**

- Concentration

Sur tous les bords, la concentration est nulle.

- Déplacement

Sur le bord inférieur, les déplacements sont bloqués dans les deux directions verticale et horizontale. Le bord supérieur est libre. Les limites des deux côtés droit et gauche sont uniquement bloquées dans le sens horizontal.

- Pression

Tous les bords sont imperméables à l'eau et à l'air sauf la limite supérieure qui est à l'air libre (pression atmosphérique).

- Température

La température des nœuds se trouvant sur les bords est fixée à 28° C. Par ailleurs, la température du dispositif de chauffage est égale à 100° C.

- **Conditions initiales :**

- Concentration

Sur tous les nœuds, la concentration initiale est nulle.

- Pression

La pression de l'air sur tous les nœuds est égale à la pression atmosphérique. La pression d'eau peut être calculée par la surface d'état du degré de saturation.

- Température

La température initiale de tous les nœuds du maillage est considérée comme étant égale à 20° C.

5.2.1.4 Résultat du calcul numérique

A la fin de l'essai, environ 2 heures après le début du chauffage, les isovaleurs de la température sont données sur la Figure 5-3. Les points sont des valeurs mesurées expérimentalement. On observe que la température diminue de façon régulière de l'endroit où est placé le dispositif du chauffage jusqu'aux bords. Cela est dû au fait que la température de ce dispositif est montée jusqu'à 100° C et que la température est maintenue constante à 28° C sur les limites. A partir des résultats expérimentaux, il nous semble que les isovaleurs du degré de saturation ont une forme radiale à proximité du dispositif d'échauffement et qu'elles s'aplatissent au fur et à mesure que l'on s'approche du bas de la cellule. Aussi, en se basant sur les résultats obtenus pour la distribution du degré de saturation (Figure 5-4), un phénomène d'évaporation se produit au voisinage de la source de chaleur alors qu'une condensation de la vapeur d'eau aux points plus éloignés est engendrée. Cette constatation reste conforme aux hypothèses de départ du modèle proposé. En outre, la réponse mécanique du milieu dépend fortement des variations simultanées de succion, de température et de contraintes (Figure 5-5). On a constaté qu'au voisinage de la source de chaleur, la compression sous l'effet du chargement thermique est plus importante que le phénomène de dilatation thermique du sol. Juste au-dessous de cette zone, la tendance globale semble s'inverser, c'est-à-dire que la dilatation thermique devient prépondérante. Enfin, on présente la distribution de la succion sur les nœuds du maillage des éléments finis (Figure 5-6).

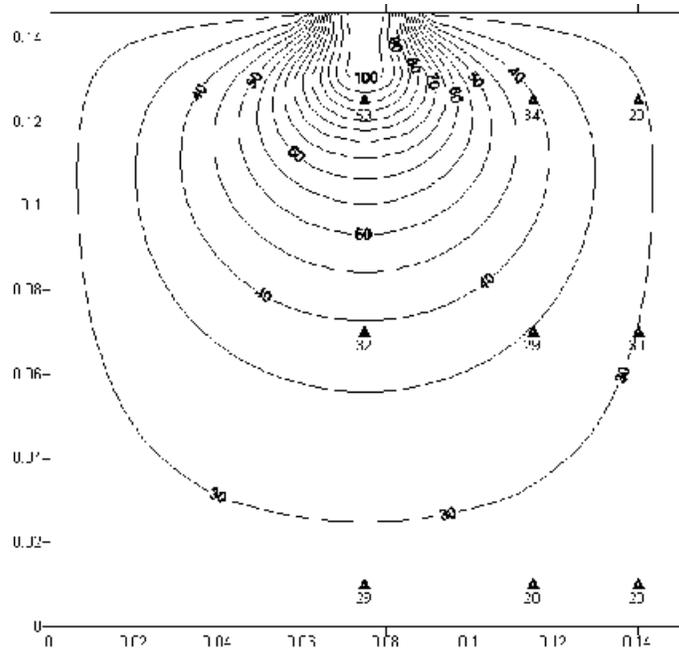


Figure 5-3 Iso valeurs de la température – Confrontation des mesures expérimentales de Villar et al. (1993) et des résultats de θ - STOCK.

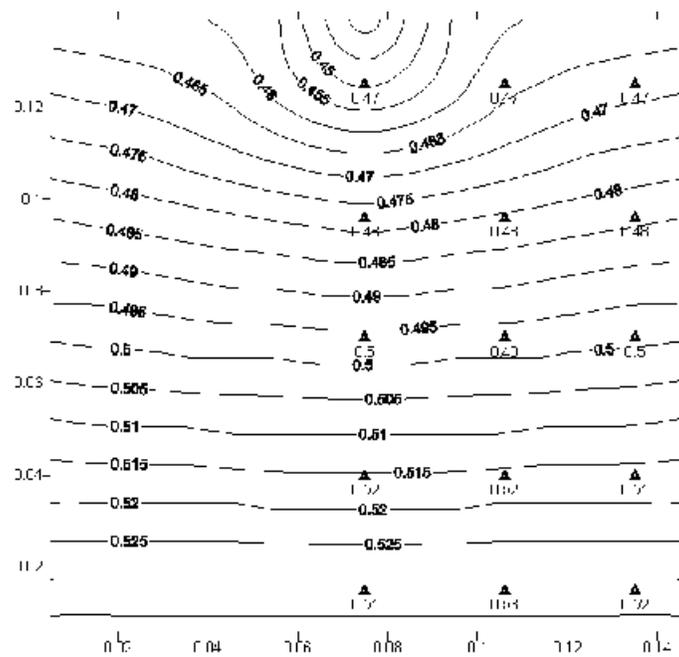


Figure 5-4 Iso valeurs du degré de saturation – Confrontation des mesures expérimentales de Villar et al.(1993) et des résultats de θ - STOCK.

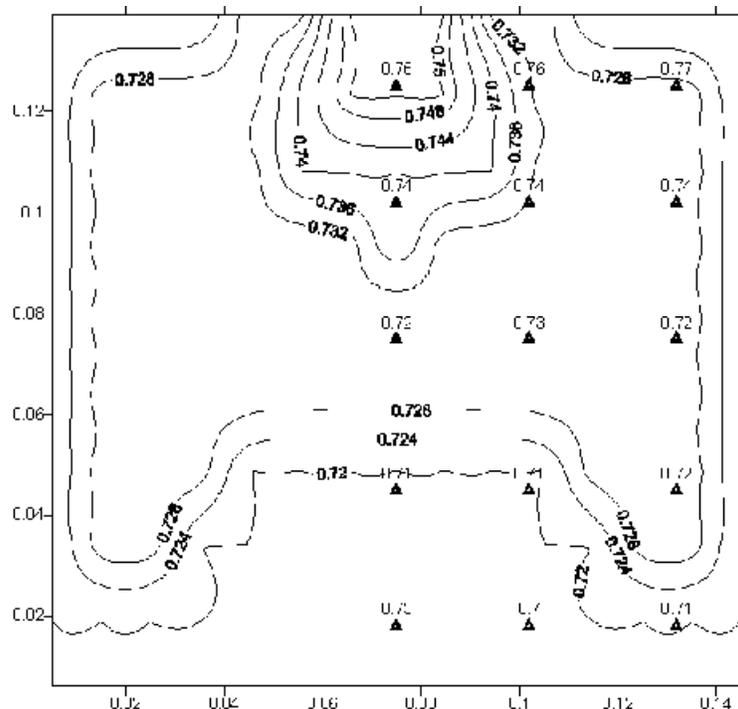


Figure 5-5 Iso valeurs de l'indice des vides – Confrontation des mesures expérimentales de Villar et al.(1993) et des résultats de θ - STOCK.

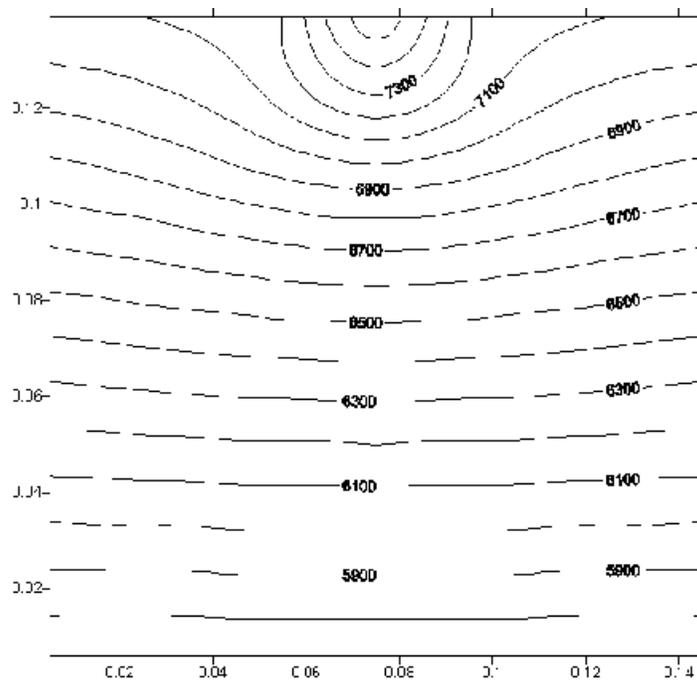


Figure 5-6 Iso valeurs de la succion (kPa).

5.3 Transfert du soluté dans un milieu saturé

Le but de cette partie est de vérifier le code de calcul pour le transfert du soluté dans les milieux saturés. Trois cas correspondants à la diffusion, à la convection et à la convection & diffusion de polluants dans les milieux saturés sont présentés dans les paragraphes suivants.

5.3.1 Diffusion pure de soluté dans un sol saturé

Le but de cette partie est de vérifier le code de calcul pour le cas simple d'une diffusion pure dans un milieu saturé condition isotherme et de le confronter à la solution analytique. Cet exemple et les deux exemples suivants sont dans un milieu saturé et indéformable ; donc on n'utilise pas les surfaces d'état d'indice des vides et du degré de saturation. Le degré de saturation est toujours égal à 1,0 et l'indice des vides est toujours égal à sa valeur initiale. La température est fixée à 10° C.

5.3.1.1 Calcul numérique

On considère une colonne de sol de 100 cm de hauteur et de 10 cm d'épaisseur, maillée par 100 éléments carrés à 4 nœuds soit 153 nœuds (Figure 5-7). Le sol est saturé et il n'y a pas écoulement d'eau dans la colonne. Le coefficient de dispersion de soluté (D_L) est égal à $1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{Sec}$.

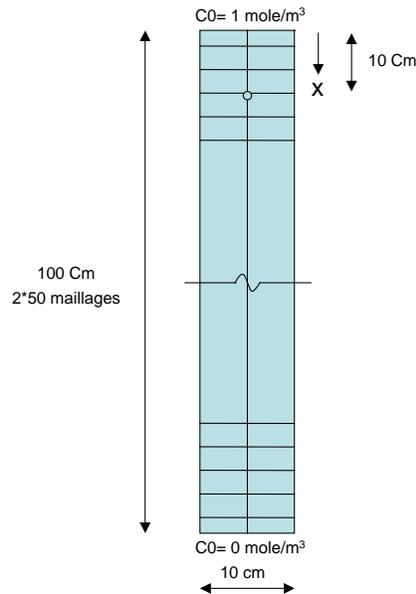


Figure 5-7 Maillage utilisé pour le calcul.

- Conditions aux limites :

Sur le bord supérieur, on applique une concentration de 1 mole/m³ pendant un an, sur le bord inférieur la concentration est toujours nulle, sur tous les nœuds, les déplacements sont bloqués dans les deux directions verticale et horizontale. Tous les bords sont imperméables à l'eau. Sur la limite supérieure, la pression de l'eau est nulle.

▪ **Conditions initiales :**

Sur le bord supérieur, on applique une concentration initiale de 1 mole/m³ et sur les autres nœuds, la concentration initiale est nulle. La pression initiale de l'eau est égale à la pression hydrostatique.

5.3.1.2 *Solution analytique*

Pour la comparaison des résultats, on utilise une méthode analytique. L'équation gouvernant l'état de diffusion pure unidimensionnel dans sol saturé est obtenue de l'équation (Eq. 2-29) avec une vitesse nulle pour l'eau :

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \theta D_L \frac{\partial C}{\partial x} \quad \text{Eq. 5-5}$$

- C , la concentration du soluté ;
- D_L , le coefficient de dispersion longitudinale ;
- θ , la teneur en eau ;
- t , le temps.

Dans les sols saturés, homogènes et indéformables, la teneur en eau peut être supprimée de l'équation et la solution analytique s'écrit comme (Eq. 2-30, Ogata et Banks 1961) :

$$C(x,t) = C_0 \cdot \text{erfc}\left(\frac{x}{2 \cdot (D_L \cdot t)^{0.5}}\right) \quad \text{Eq. 5-6}$$

- C_0 , la concentration initiale du soluté ;
- $C(x,t)$, la concentration du soluté ;
- x , la distance de source du soluté.

5.3.1.3 *Le résultat du calcul numérique et analytique*

La variation analytique de la concentration du soluté dans le temps, ainsi que celle obtenue par le code en éléments finis, pour deux points de la colonne à des distances de 10 et de 30 cm de la source de soluté est montrée sur la Figure 5-8. Comme on peut le constater, les résultats analytiques et la présente étude sont les mêmes et la concordance est très satisfaisante. Evidemment, les dimensions du maillage et le pas de temps doivent être choisis assez fins afin d'avoir des résultats numériques corrects. Le pas de temps pour cet exemple est

31500 secondes et la hauteur des mailles est de 2 cm, ils ont été choisis après une analyse de sensibilité. Sur la Figure 5-9 on peut voir la comparaison des résultats de cet exemple avec différents maillages. La variation de concentration avec 20 mailles (avec une hauteur de maille de 10 cm) n'est pas exacte alors qu'avec 100 mailles les résultats correspondent exactement au résultat analytique, ce qui montre l'effet de dimension de maille. L'erreur de résultat dans la distance de 10 cm de la source du soluté est supérieure à celle à 30 cm ce qui montre encore l'effet de la dimension des éléments sur la précision du résultat.

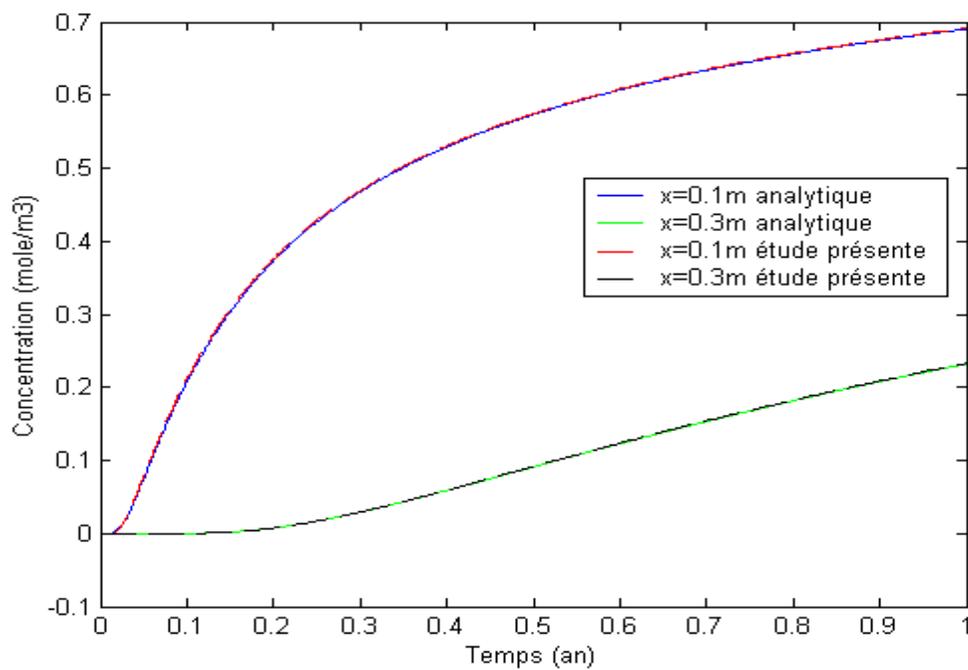


Figure 5-8 Comparaison de résultat de diffusion pure.

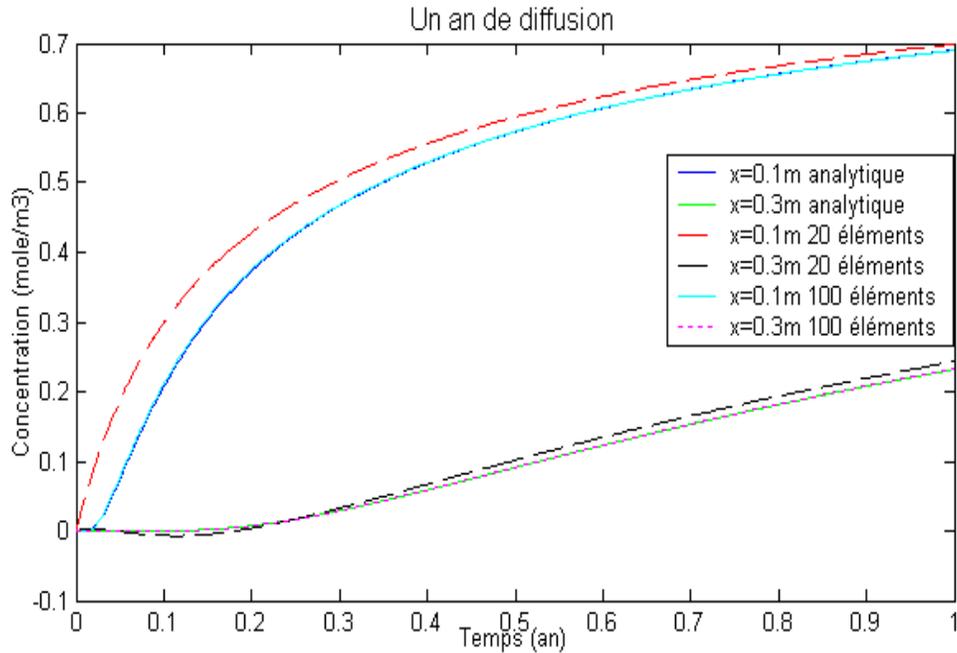


Figure 5-9 Comparaison de résultat de différent maillage

5.3.2 Convection de soluté dans le sol saturé

Le but de cette partie est de vérifier le code de calcul pour le cas d'une convection dans un milieu saturé pour lequel la vitesse de transport du soluté est égale à la vitesse de l'eau.

5.3.2.1 La solution analytique

L'équation de convection pure de soluté dans une colonne unidimensionnelle de sol saturé est obtenue de l'équation de convection-dispersion (Eq. 1-1) avec un coefficient de dispersion nul :

$$\frac{\partial(C)}{\partial t} = v_x \frac{\partial(C)}{\partial x} \quad \text{Eq. 5-7}$$

où v_x est la vitesse de l'eau.

La solution analytique s'écrit comme :

$$C(x,t) = v_x C_0 \cdot \quad \text{Eq. 5-8}$$

C_0 , la concentration initiale du soluté ;

$C(x,t)$, la concentration du soluté dans le temps t ;

x , la distance de source du soluté.

5.3.2.2 Le calcul numérique

On considère une colonne de sol de 100 cm de longueur et de 10 cm d'épaisseur, maillé par 100 éléments carrés à 4 nœuds soit 153 nœuds (Figure 5-10). Le sol est saturé et il y a écoulement continu d'eau dans la colonne. Le soluté migre dans la colonne avec l'eau et à la même vitesse, c'est-à-dire que l'on considère la dispersion hydromécanique nulle.

- **Conditions aux limites :**

Sur le bord gauche, on applique un débit de $5.10^{-10} \text{ m}^3/\text{s}$ qui entre dans la colonne et qui sort au bord droit. Sur le bord gauche, on applique une concentration de $1 \text{ mole}/\text{m}^3$ pendant un an. Le soluté avec cette vitesse de l'eau n'arrive pas au bord droit donc sur ce bord, la concentration est toujours nulle. Sur tous les nœuds, les déplacements sont bloqués dans les deux directions verticale et horizontale.

- **Conditions initiales :**

Sur tous les nœuds, la concentration initiale est nulle. La pression initiale de l'eau est égale à la pression hydrostatique.

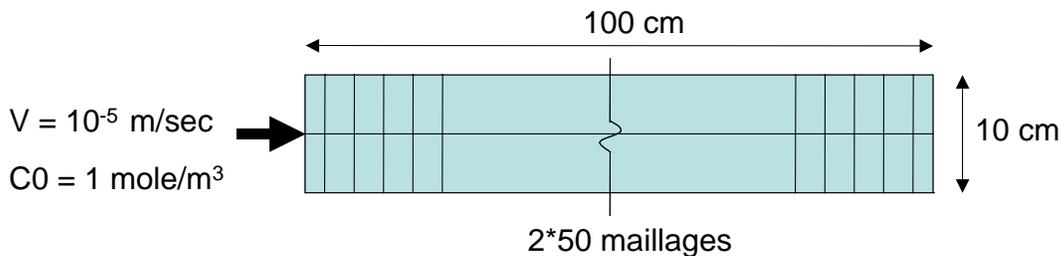


Figure 5-10 Maillage utilisé pour le calcul.

5.3.2.3 Les résultats du calcul numérique et analytique

La solution analytique de la concentration de soluté après un an de convection, ainsi que celle obtenue par élément finis, sont montrées sur la Figure 5-11. Comme on peut le calculer facilement, il y a un front abrupt à $x=0,315 \text{ m}$; la solution analytique a une concentration égale à $C_0=1 \text{ mole}/\text{m}^3$ en deçà et nulle au delà.

En ce qui concerne les résultats en éléments finis, dans la nature, on n'a pas une situation de convection pure du soluté et on a ajouté un coefficient de diffusion faible. Les résultats avec un coefficient de diffusion égale $1 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ sont présentés. La courbe de concentration n'a pas un front abrupt à cause de la faible diffusion du soluté et aussi à cause

de la fonction de forme des éléments finis qui garde le milieu toujours continu. On constate que les résultats de convection pure sont acceptables par rapport aux résultats analytiques

La variation analytique de la concentration du soluté après un an de convection pure ainsi que celle obtenue avec l'élément finis avec un coefficient de diffusion égale à zéro, est montrée sur la Figure 5-12. On voit une oscillation autour de la réponse analytique et ils ne sont pas corrects. L'équation Eq. 5-7 est de type hyperbolique et sa résolution avec la méthode éléments finis classiques engendre ce problème (Prickett et al. 1981).

Le problème de convection pure du soluté peut être résolu avec la notion de fonction de forme discontinue, l'approche mixte eulérienne-lagrangienne (Neuman, 1984 ; Zhang et al., 1993) et aussi avec un modèle hybride aux éléments finis et avec volume finis (Vohralik 2004). On n'a pas corrigé cette erreur dans le cadre de ce travail ; on la mentionne pour éviter toute utilisation erronée du code de calcul.

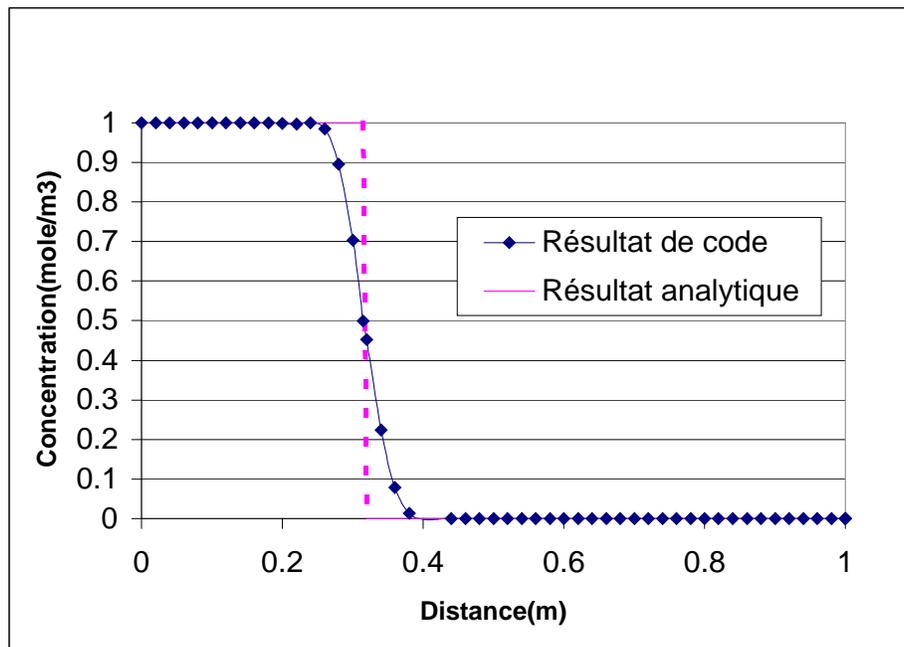


Figure 5-11 Comparaison de résultat de convection – Front de soluté après un an

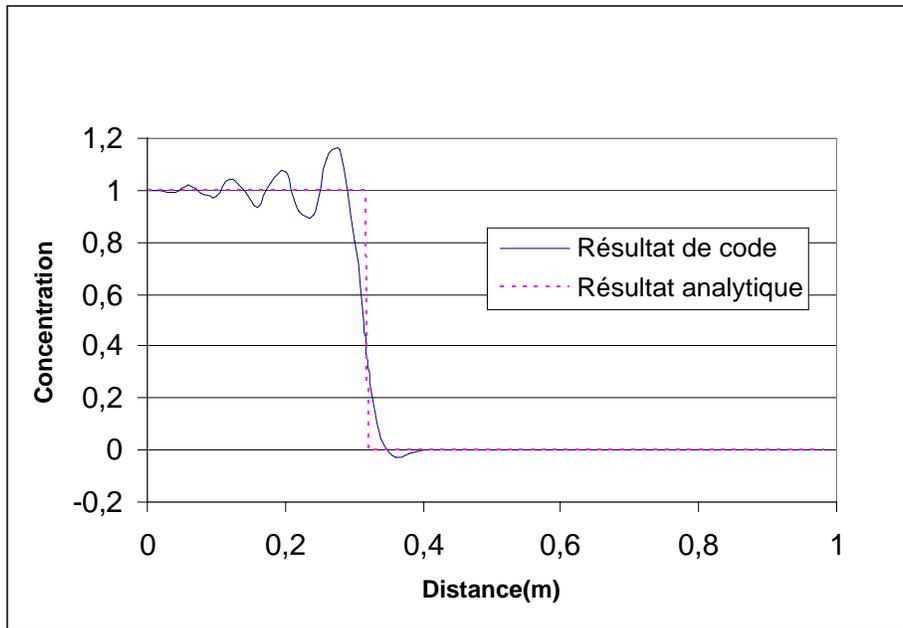


Figure 5-12 Comparaison de résultat de convection pure – Front de soluté après un an

5.3.3 Diffusion-convection de soluté dans le sol saturé

Le but de cette partie est de vérifier le code de calcul pour le cas d'une diffusion - convection dans un milieu saturé et sous la condition isotherme pour lequel on dispose d'un résultat analytique.

On considère la colonne de sol de l'exemple précédent avec les mêmes dimensions et le même maillage (Figure 5-10). Le sol est saturé et il y a un écoulement continu de l'eau dans la colonne. Le soluté migre dans la colonne avec l'eau et on a une variation de front du soluté due à la dispersion avec un coefficient de dispersion de $10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$. La vitesse de l'eau est égale à $5 \cdot 10^{-8} \text{ m/s}$; avec une teneur en eau de 0,5, on aura une vitesse de $1 \cdot 10^{-8} \text{ m/s}$ dans les pores.

- **Conditions aux limites et conditions initiales :**

Sur le bord gauche, on applique une concentration de 1 mole/m^3 pendant un an. Sur le bord droit la concentration est toujours nulle. Sur tous les nœuds, les déplacements sont bloqués dans les deux directions verticale et horizontale. Sur le bord gauche, on applique le débit de $5 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3/\text{s}$ qui entre dans la colonne et qui sort du bord droit. Sur le bord gauche, on applique une concentration initiale de 1 mole/m^3 et sur les autres nœuds, la concentration initiale est nulle. La pression initiale de l'eau est égale à la pression hydrostatique.

La solution analytique (Eq. 2-36) et celle par élément finis de la concentration du soluté dans le massif après un an, sont montrées sur la Figure 5-13. Comme on peut le constater, les résultats analytique et numérique sont identiques.

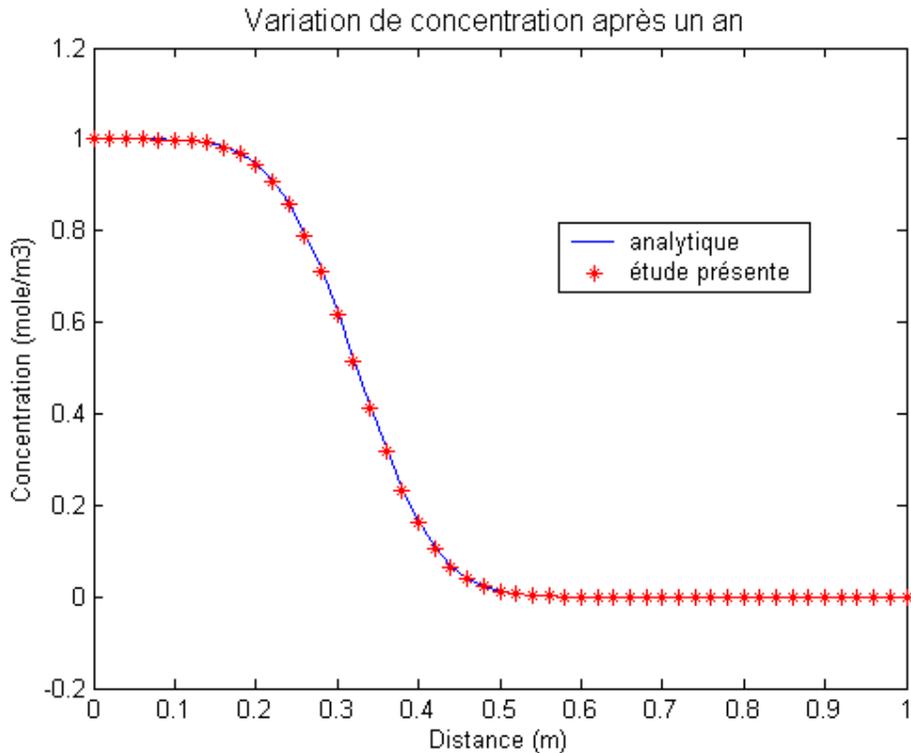


Figure 5-13 Comparaison de concentration analytique et élément finis dans la colonne

5.4 Transfert du soluté dans un milieu non saturé

Le but de cette partie est de vérifier le code de calcul pour le transfert du soluté dans les milieux saturés. Trois cas correspondants à la diffusion, à la convection et à la convection & diffusion de polluants dans les milieux saturés sont présentés dans les paragraphes suivants.

5.4.1 La dispersion du soluté dans les billes de verre non saturé

On s'intéresse dans ce paragraphe à la modélisation d'une expérience de dispersion dans un milieu poreux non saturé isotherme réalisée par Nützmann et al. (2002). Le but de cette partie est de vérifier le code de calcul pour le cas d'une dispersion dans un milieu non saturé.

Une série d'expériences a été effectuée par Nützmann et al. (2002) pour déterminer les coefficients de dispersion dans une colonne de sol non saturé. Le dispositif expérimental est montré sur la Figure 5-14.

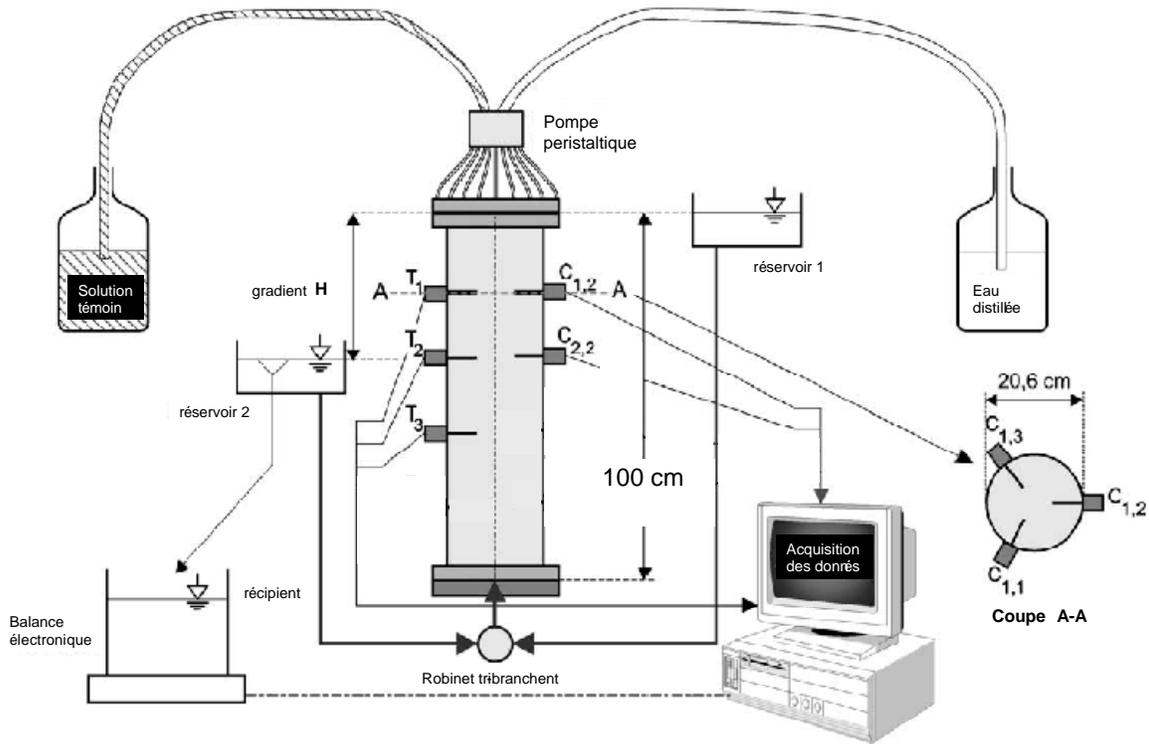


Figure 5-14 Schéma de la colonne et détail en coupe. T_i: Sondes de réflectométrie temporelle, C_i: sondes de platine (Nützmann et al. 2002).

Une colonne de hauteur de 100 cm et de diamètre interne de 20.6 cm rempli de billes de verre est utilisée. Les billes de verre mesurent de 0,36 à 0,71 mm de diamètre pour une porosité moyenne de 0,374. La perméabilité à l'eau de $7,94 \cdot 10^{-4}$ m/s à l'état saturé et la densité des grains de $2,57 \text{ Mg/m}^3$. L'extrémité supérieure de la colonne ($z=100$ cm) est au contact de l'atmosphère et le fond ($z=0$) est relié à deux réservoirs de niveau constant par un robinet à trois branches. Le premier réservoir a été employé pour saturer la colonne de sol avec de l'eau, et le deuxième réservoir a été employé pour contrôler le niveau d'eau dans la colonne, égal au niveau du fond de colonne dans le cas non saturé. Le deuxième réservoir a été relié à une balance électrique mesurant la sortie cumulée pendant les expériences. Avant chaque expérience, la colonne a été saturée du fond jusqu'en haut par plusieurs

incréments de charge, l'équilibre hydraulique étant atteint à chaque étape, et puis, en fixant le réservoir 2, le niveau d'eau dans la colonne a été jugé constant.

La pompe péristaltique au dessus de la colonne a fourni une application constante de solution d'eau distillée ou de traceur (solution chlorure de sodium NaCl). La valeur de vitesse de l'infiltration équilibrée est inférieure à la valeur de conductivité hydraulique saturée c'est pour quoi l'écoulement reste en état non saturé. La distribution de teneur en eau change avec la profondeur. L'infiltration sur le bord supérieur de la colonne a été uniformément distribuée en utilisant un disque perforé où chaque trou a été relié à un petit tube en plastique connecté à la pompe. La variation des vitesses d'infiltration pendant les écoulements non saturés pour les expériences de billes de verre est donnée sous forme de Tableau 5-3.

Tableau 5-3 Paramètres des essais sur billes de verres non saturées

Essai	Teneur en eau (cm ³ / cm ³)	Vitesse d'infiltration (cm/s)	Concentration initiale (g/l)	Concentration imposée (g/l)	Coef. de Dispersion α_L (cm)
1	0,11	0,002067	0,00	1,05	1,00
2	0,14	0,009867	0,06	1,02	1,50
3	0,13	0,009867	1,02	0,09	1,50
4	0,19	0,036650	0,10	0,90	0,70
5	0,20	0,036650	0,06	0,92	0,75
6	0,21	0,036650	1,00	0,10	0,50

Chaque essai a débuté par une infiltration constante de l'eau. Le traceur a été injecté après qu'un écoulement stable d'eau traversant la colonne ait été atteint, de manière à éviter les problèmes d'hystérésis. Les nombres moléculaires de Peclet sont compris entre $40 < Pe_{mol} < 600$, indiquant que le flux de masse est dominé par la dispersion avec une diffusion négligeable (Nützmann et al., 2002 ; Pfannkuch, 1963). Chaque 6 secondes, la teneur en eau a été mesurée par des sondes de réflectométrie temporelle à 20, 45 et 70 cm du bord supérieur de la colonne (Figure 5-14). La concentration de chlorure de sodium a été mesurée par des sondes de platine à 15 et 50 cm du bord supérieur de la colonne (coupe A-A de la Figure 5-14) par trois sondes à chaque niveau.

5.4.1.1 Résultats d'expérimentation

Les profils calculés de teneur en eau pour les différents essais sont montrés sur la Figure 5-15. Les profils de concentration pour l'essai 2 avec la teneur en eau à $0,14 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ et une vitesse $q_{inf}=9,867 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$ sont présentés sur la Figure 5-16. On constate que les

concentrations mesurées par les trois sondes de platine à un même niveau sont différentes (Figure 5-16). Ce phénomène attribué à des fluctuations de la vitesse de l'eau. Les lignes solides montrent les valeurs moyennes de concentration dans chaque niveau, qu'on va utiliser pour la comparaison des résultats numériques.

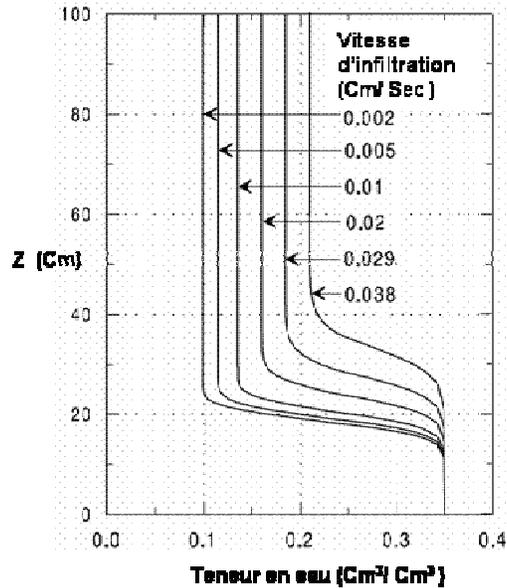


Figure 5-15 Profils de teneur en eau calculés pour les différentes vitesses d'infiltration (Nützmann et al. 2002)

5.4.1.2 Calcul numérique

On considère une colonne de sol de 100 cm de longueur et de $3,32 \times 100 \text{ cm}^2$ de superficie qui est la surface de la coupe de la colonne de manipe, maillé par 100 éléments carrés à 4 nœuds soit 153 nœuds (Figure 5-17). Le sol est non saturé et il y a un écoulement continu d'eau dans la colonne à la vitesse de 0,009867 cm/s sous condition isotherme. Le soluté (NaCl) migre dans la colonne avec l'eau et il y a variation du front de soluté du fait de la dispersion.

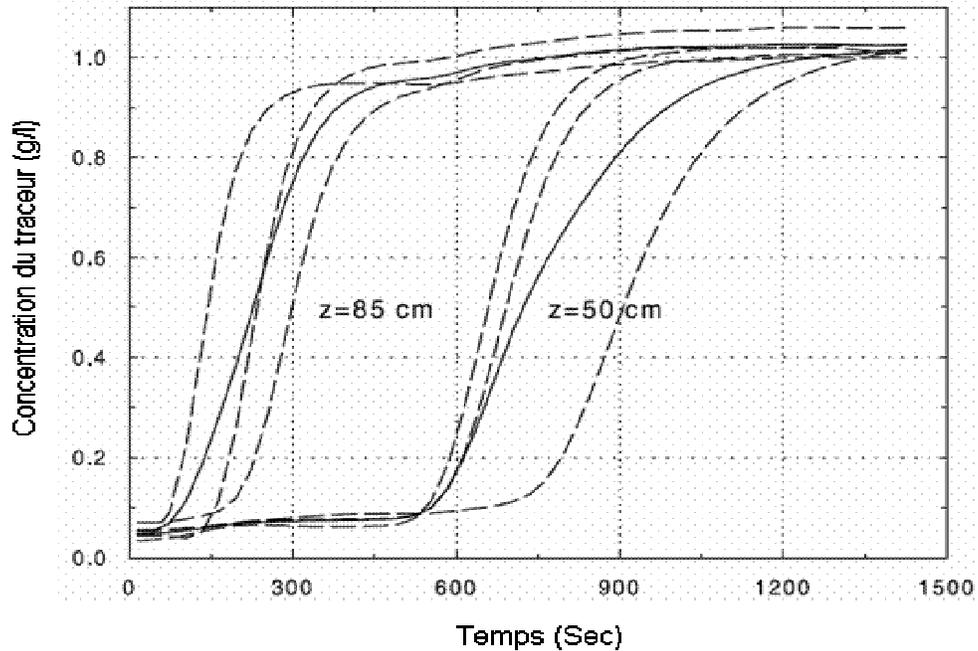


Figure 5-16 Profils de concentration en NaCl ; ligne pointillée, valeur mesurée par les sondes de platine ; ligne solide, valeur moyenne de trois sondes à un même niveau (Nützmann et al. 2002)

Le coefficient α_L de dispersion longitudinale du soluté a une relation inverse avec la teneur en eau, c'est-à-dire qu'avec une augmentation de teneur en eau, on a une diminution du coefficient de dispersion (Nützmann et al 2002) :

$$\alpha_L = 0,00395\theta^{-2,89689} . \quad \text{Eq. 5-9}$$

La diffusion moléculaire par rapport à la dispersion est négligeable.

- **Conditions aux limites :**

- Concentration

Sur le bord supérieur, on applique la concentration de 1.02 g/l pendant 1500 secondes. Sur le bord inférieur, la concentration est toujours nulle.

- Déplacement

Sur tous les nœuds, les déplacements sont bloqués dans les deux directions verticale et horizontale.

- Flux de l'eau

Sur le bord supérieur, on applique le débit de $3,276 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$ qui entre dans la colonne et qui sort du bord inférieur.

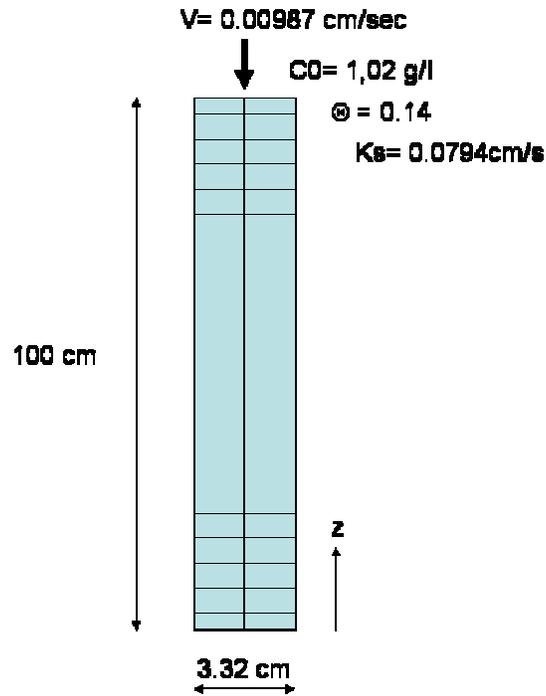


Figure 5-17 Maillage utilisé pour le calcul

▪ **Conditions initiales :**

- Concentration

Sur tous les nœuds, la concentration initiale est : $C_{s0} = 0.06 \text{ g/l}$.

- Pression

La pression de l'air sur tous les nœuds est égale à la pression atmosphérique. La pression de l'eau peut être calculée à partir de la surface d'état du degré de saturation.

5.4.1.3 *Résultat du calcul numérique et expérimental*

La variation expérimentale de la concentration du soluté pour deux points à différents niveaux ($z=0,5\text{m}$ et $z=0,85\text{m}$) ainsi que celle calculée, est montrée sur la Figure 5-18. Les résultats numériques pour le point $z=0,85 \text{ m}$ montrent que la concentration s'écarte de sa valeur initiale ($C_{s0}=0,06 \text{ g/l}$) après 100 secondes, et qu'elle commence à augmenter progressivement. La concentration atteint sa valeur maximum au bout de 500 secondes. On observe pour le point $z=0,50 \text{ m}$ que la concentration calculée s'écarte de sa valeur initiale

après 450 secondes et augmente avec une pente moins pointue que celle à $z=0,5$ m. La concentration atteint sa valeur maximum (1,02 g/l) au bout de 1200 secondes. Comme on peut le voir, les résultats numériques dans chaque point sont encadrés par les résultats obtenus par les différents capteurs.

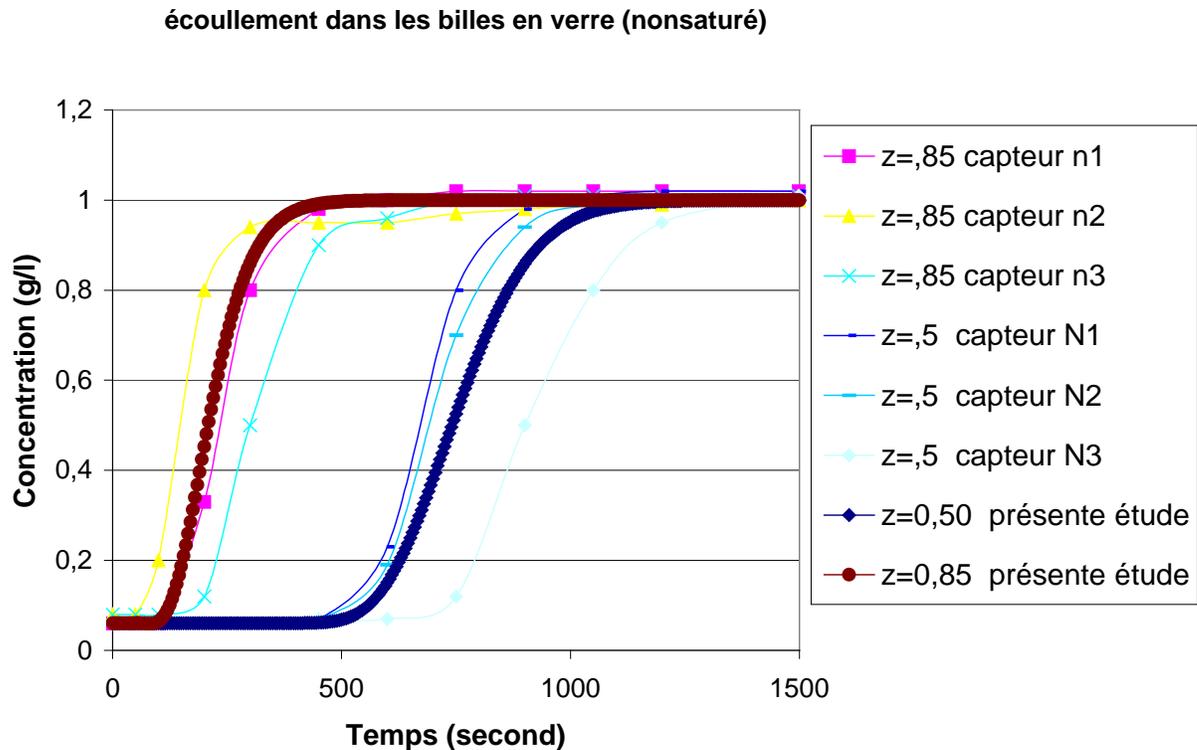


Figure 5-18 Comparaison des résultats du calcul aux éléments finis avec les résultats expérimentaux aux points distants de 0,5 m et de 0,15 de la source de soluté : $z=0.5$ et $z=0.85$ respectivement

La Figure 5-19 montre une comparaison entre les moyennes de résultats expérimentaux et les résultats des calculs. La pente de variation de concentration moins forte pour le point de $z=0.5$ m peut s'interpréter par le phénomène de dispersion. La différence entre le calcul numérique et les résultats expérimentaux sont inférieurs à 10%, ce qui est satisfaisant.

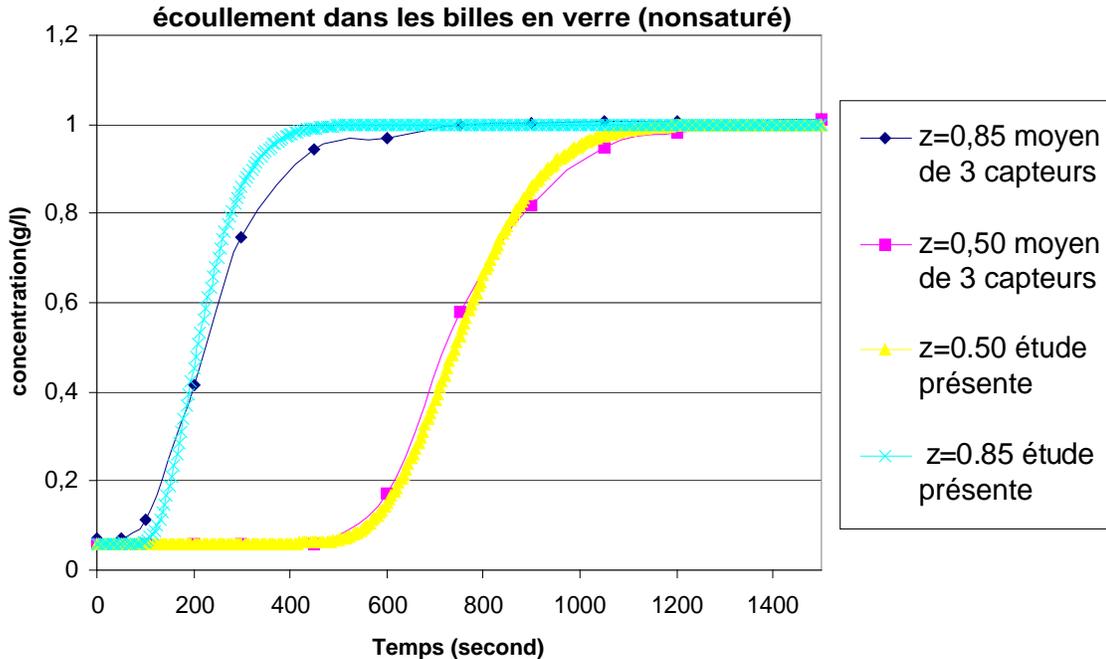


Figure 5-19 Comparaison des résultats du calcul aux éléments finis avec les moyens de résultats expérimentaux aux points distants de 0,5 m et de 0,15 de la source de soluté : $z=0.5$ et $z=0.85$ respectivement

5.4.2 Transfert de soluté et interaction sol/soluté dans le sol non saturé

Le but de cette partie est de vérifier le code de calcul pour le cas d'adsorption isotherme dans un milieu non saturé. On s'intéresse à l'interaction sol/soluté ou bien la concentration adsorbée du soluté sur squelette solide. Les résultats de cette étude seront comparés avec les résultats expérimentaux.

Une série d'expérimentation de lixiviation sur un sol non saturé a été effectuée par Thomas et Cleall (2001). Les propriétés du sol sont présentées dans le Tableau 5-4 (Thomas et al. 1999). Une colonne remplie de sol non saturé a été lixiviée jusqu'à l'état saturé par une solution qui contient une concentration en plomb de $2,41 \text{ mole/m}^3$. Ensuite l'échantillon a été coupé en 15 tranches. La concentration dans la phase liquide et sur la phase solide a été mesurée. La concentration totale a été déterminé par une méthode de spectrométrie à fluorescence aux rayons X avec étalonnage par méthode de digestion acide. La concentration

de métaux lourds dans la solution à été mesuré par spectroscopie de masse à plasma couplé induit (ICP : *Induced Couple Plasma Emission Spectroscopy*).

Tableau 5-4 Caractéristiques physiques de sol

Propriétés	Unités	Valeurs
Pression de l'eau	P_w (kPa)	4,6
Degré de saturation initial	S_r (Cm^3/Cm^3)	0,2
Porosité	n (Cm^3/Cm^3)	0,33
Débit de Darcy	Q (m/Sec)	$1,9 \cdot 10^{-8}$
Température	T ($^{\circ}\text{C}$)	20
Masse volumique	ρ (kg/m^3)	1690
PH du sol	pH ($\log(\text{H}^+)$)	7,6
Concentration adsorbée initiale en plomb	C_{s0} (mole/l sol)	0,66

5.4.2.1 Calcul numérique

On considère une colonne de sol de 30 cm de longueur et de 5 mm d'épaisseur, maillé par 60 éléments carrés à 4 nœuds correspondant à un total de 120 nœuds (Figure 5-20). Le sol est non saturé avec une teneur en eau initiale de 6,6%. La solution de plomb (Pb) se déplace dans la colonne sous une charge hydraulique nulle. Le coefficient de dispersion est égal à $6 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$. Le modèle de sorption de Langmuir a été utilisé dans la simulation.

- **Conditions aux limites et conditions initiales :**

- Concentration

Sur le bord gauche, on applique une concentration de $2,4 \text{ mole}/\text{m}^3$. Sur le bord droit, la concentration est toujours nulle. Sur tous les nœuds, la concentration initiale adsorbée sur les surfaces solides est : $C_{s0}=0,66 \text{ mole}/\text{l sol}$

- Déplacement

Sur tous les nœuds, les déplacements sont bloqués dans les deux directions verticale et horizontale.

- Pression

Sur le bord gauche, on applique une pression d'air et une pression d'eau nulles. La pression de l'eau initiale sur tous les nœuds est égale à -2560 kPa et la pression de l'air sur tous les nœuds est égale à la pression atmosphérique.

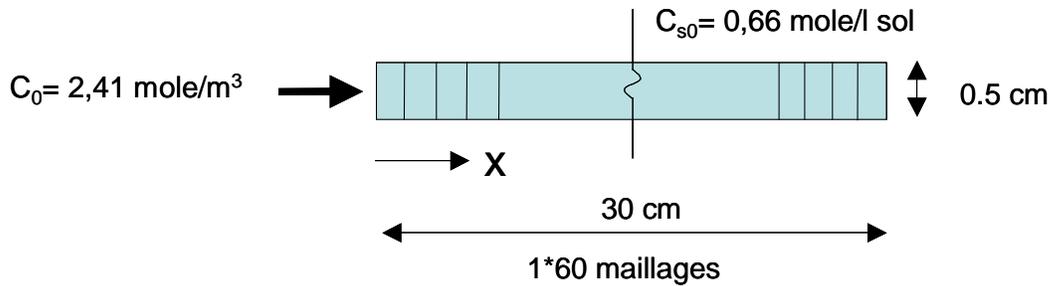


Figure 5-20 La colonne utilisée pour les essais

5.4.2.2 Résultat du calcul numérique

La Figure 5-21 montre le profil de concentration en plomb dissout le long d'échantillon, calculé par le code aux éléments finis. La concentration imposée sur le bord droit est toujours nulle et donc il n'y a pas d'effets du bord sur le profil de concentration. La concentration en plomb du bord gauche est toujours égale concentration initiale ($2,41 \text{ mole/m}^3$). On observe une décroissance rapide de la concentration dans le milieu, du fait de la sorption du soluté.

La Figure 5-22 montre la concentration adsorbée mesurée expérimentalement et celle du code éléments finis en fin du calcul, quand le sol atteint l'état saturé. Chaque point sur la figure correspond à la concentration adsorbée moyenne à 2 centimètres de hauteur de l'échantillon. Les points figurés par une étoile sont les résultats du code calcul θ -STOCK et les points figurés par un triangle sont les résultats expérimentaux. Thomas et al. ont utilisé le code de calcul COMPASS pour simuler les résultats expérimentaux. Ces résultats sont également proches des résultats expérimentaux. Le modèle utilisé pour décrire les réactions géochimiques dans les codes éléments finis est le modèle de Langmuir. On observe une adsorption du plomb juste aux huit premiers éléments. On trouve une bonne concordance entre les résultats du code aux éléments finis et les résultats expérimentaux.

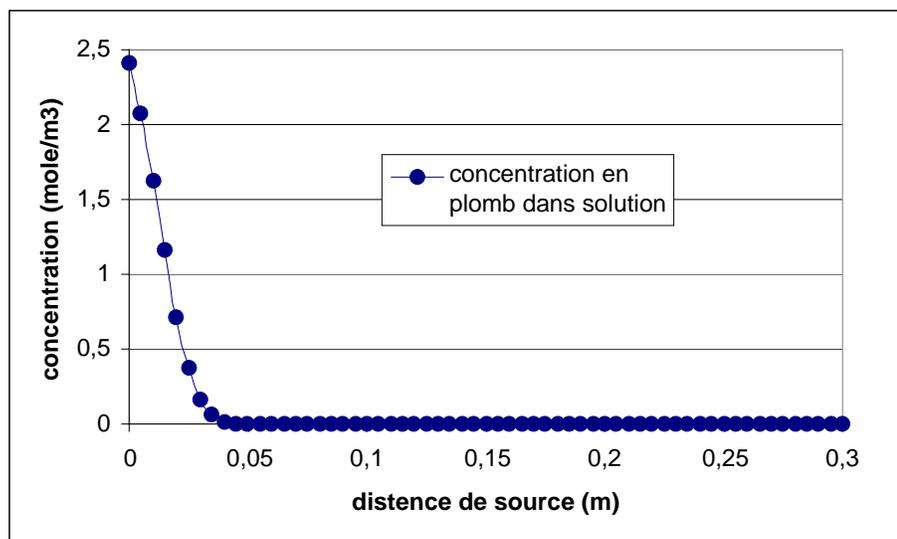


Figure 5-21 Profil de concentration en plomb le long de l'échantillon de sol

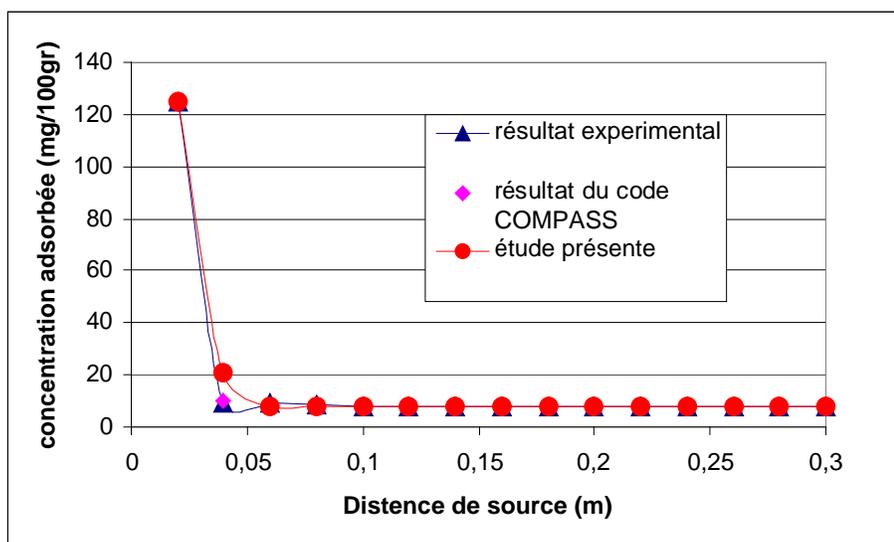


Figure 5-22 La comparaison entre le profil de concentration adsorbé en plomb le long de l'échantillon de sol

5.4.3 Sorption/désorption du soluté dans un sol non saturé

Le but de cette partie est de vérifier le code de calcul pour le cas d'une sorption et d'une désorption dans un essai d'injection d'une impulsion d'élément chimique dans un milieu non saturé sous condition isotherme. On utilisera les résultats expérimentaux de Delolme et al. (2004) pour la comparaison des résultats.

Un échantillon de sable de 1420 g a été placé dans une colonne en PVC de 12 cm de hauteur et 10 cm de diamètre (Figure 5-23). Un débit de 0,10 ml/s fourni par une pompe péristaltique a été choisi pour maintenir le milieu non saturé. Les caractéristiques du sol sont présentées dans le Tableau 5-5.

Le volume poreux total noté V_0 . Les essais sont effectués dans trois étapes :

- (i) La colonne a été lixiviée avec l'eau distillée jusqu'à obtenir un écoulement permanent.
- (ii) Après, un volume de pore de 2,4 V_0 de solution a été injecté pour un pH voulu (impulsion entrante du soluté).
- (iii) Ensuite, la colonne a été lixiviée avec la solution tampon sans soluté au même pH, pour 14-15 volumes poreux.

Les essais sont effectués pour les différents pH de valeur 4 à 7. La concentration du soluté dans la solution sortante est mesurée et les courbes d'élutions sont tracées.

Tableau 5-5 Caractéristique physique de la colonne expérimentale (Delolme et al. 2004)

Propriétés	Unité	Valeurs
Débit de Darcy	Q (m/s)	$1,28 \cdot 10^{-5}$
Teneur en eau	θ (cm ³ /cm ³)	0,23
Température	T (°C)	24±1
Masse volumique	ρ (Mg/m ³)	1,5
Coefficient de distribution pH 4	K_d (l/kg)	0,01
Coefficient de distribution pH 5	K_d (l/kg)	0,031
Coefficient de distribution pH 6	K_d (l/kg)	0,086
Coefficient de distribution pH 7	K_d (l/kg)	0,157
Dispersivité	λ (mm)	9

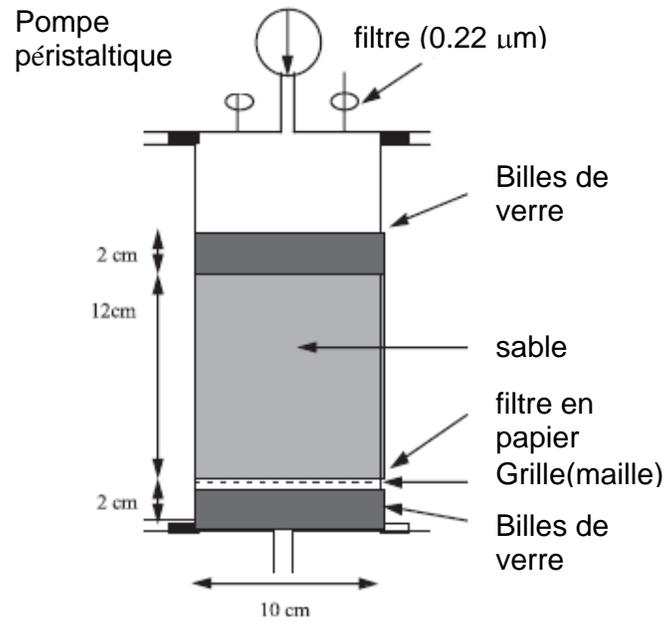


Figure 5-23 La colonne utilisée pour les essais (Delolme et al. 2004)

5.4.3.1 Résultats d'expérimentation

Les courbes de sorption isotherme pour le zinc à différents pH de 4, 5, 6 et 7 sont présentées en Figure 5-24. A pH 4, la rétention de Zn est inférieure à 1% ; elle est inférieure à 5% à pH 5. L'adsorption semble être linéaire à pH 4 et 5. À un pH plus élevé, l'adsorption augmente considérablement. En considérant le point de départ (concentration et concentration adsorbée nulle ($C = C_s = 0$)), les courbes de pH 6 et de pH 7 sont non-linéaires. L'aplatissement de la courbe avec l'augmentation du C_s indique processus de sorption de type Langmuir. Les courbes de sortie de zinc à pH 4 et 5 sont données dans la Figure 5-25. Les courbes de sortie commencent par une phase d'adsorption et continuent par une phase de désorption. La valeur maximum de concentration relative (C/C_0) vaut 0,83 pour pH 4 et elle atteint à 0,77 pour pH 5.

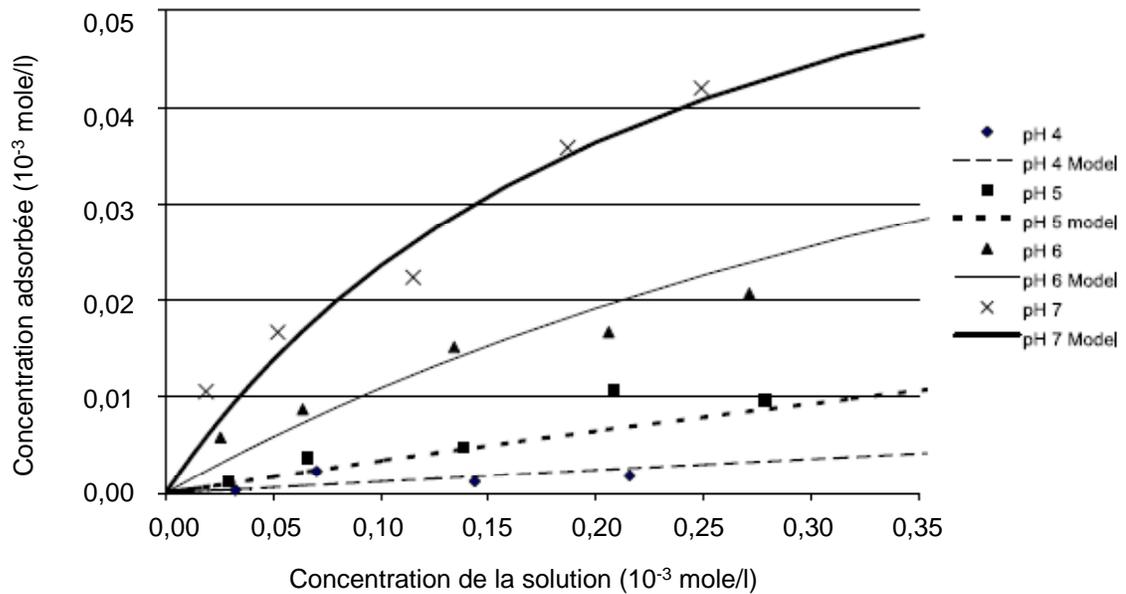


Figure 5-24 Résultats expérimentaux et modèles d'adsorption isotherme de zinc à différents pH (Delolme et al 2004)

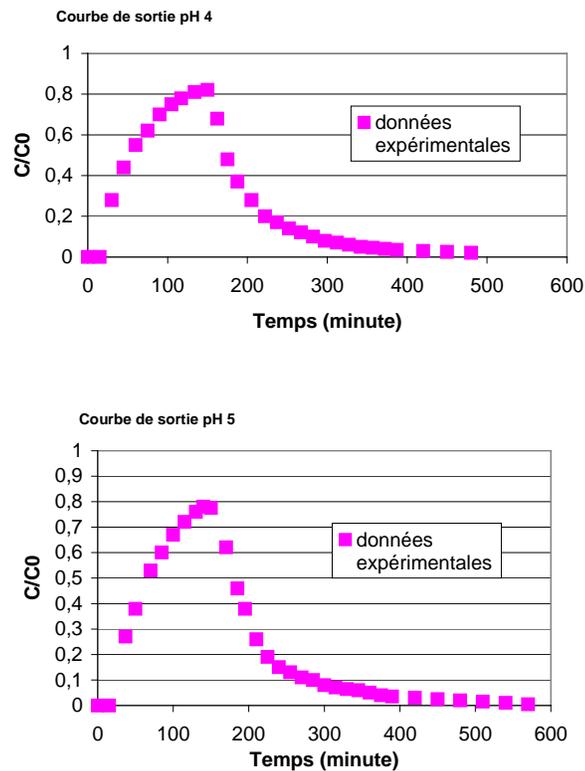


Figure 5-25 Courbe de sortie pour zinc à différents pH (Delolme et al. 2004)

5.4.3.2 Calcul numérique

Le code de calcul ne permettant pas dans sa configuration actuelle de calculs axisymétriques, on considère une colonne de sol rectangulaire de surface équivalente à celle de l'expérimentation maillée par 24 éléments carrés à 4 nœuds et en tout 50 nœuds (Figure 5-26). On utilise une longueur de 24 cm au lieu de 12 cm pour simplifier la condition aux limites de sortie. La concentration au point $x = 12$ cm change au cours du temps (courbe de sortie) et on a donc choisi de la prolonger pour maintenir une condition de sortie à concentration nulle. Le sol est non saturé avec une teneur en eau de 0,23. Le soluté (Zn) dans une solution tampon d'acétate est déplacé dans la colonne avec un débit de 0,1 ml/s. Les caractéristiques adoptées dans le calcul ont été présentées au Tableau 5-5. La diffusion moléculaire par rapport à la dispersion est négligeable. Les coefficients de distribution utilisés dans le calcul sont obtenus de la Figure 5-24, et ils ont été également présentés dans le Tableau 5-5.

- **Conditions aux limites et conditions initiales :**

Sur le bord gauche, on applique une concentration de 10 g/l pendant 144 minutes ; ensuite, la concentration reste nulle jusqu'à la fin du calcul (environ 550 minutes). Sur tous les nœuds, la concentration initiale est nulle. Sur tous les nœuds, les déplacements sont bloqués dans les deux directions verticale et horizontale et sur le bord gauche, on applique le débit entrant de $1 \times 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$.

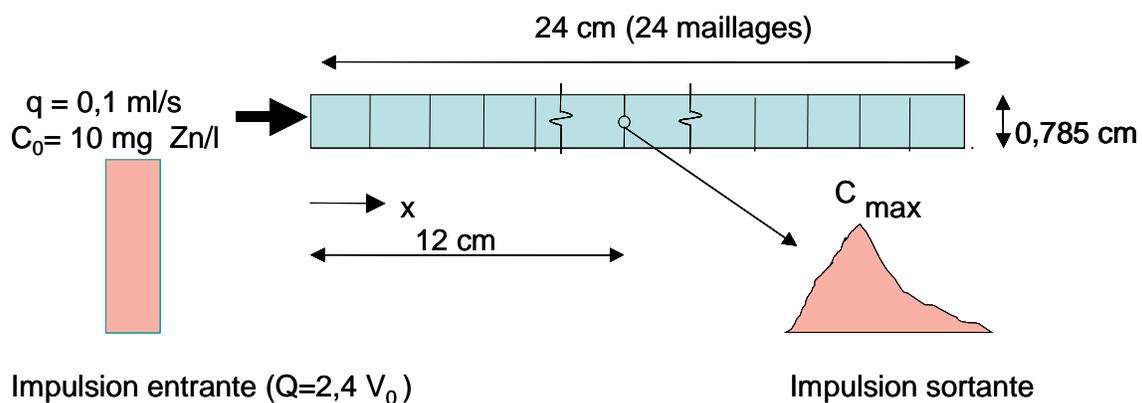


Figure 5-26 Maillage utilisé pour le calcul.

5.4.3.3 Résultat du calcul numérique

Les Figure 5-27 et Figure 5-28 montrent les résultats des calculs à pH4 et pH5 qui sont comparés aux résultats expérimentaux. Les calculs sont faits avec le modèle linéaire et les effets du pH sont intégrés dans la valeur adaptée pour le paramètre d'adsorption k_d . On observe une augmentation de la concentration relative qui se prolonge un peu après la fin de l'injection du soluté. A pH 4, on observe une concentration relative maximale de 0,85 contre 0,83 pour l'expérimentation, ce qui montre une bonne concordance. De même à pH 5, on voit les concentrations relatives maximales expérimentale et du modèle égales à 0,77 et 0,79 respectivement, qui sont assez proches l'une de l'autre. Les désorptions sont également en bonne concordance avec les résultats expérimentaux (Figure 5-27 et Figure 5-28). Malgré une différence au niveau du temps pour lequel les concentrations relatives maximales sont atteintes, les résultats expérimentaux et du modèle sont raisonnablement compatibles.

La Figure 5-29 montre les courbes d'élutions à différents pH de 4 à 7. Pour tous les pH, on a appliqué le modèle linéaire, bien qu'on puisse utiliser le modèle de Langmuir pour pH 6 et pH 7. La concentration relative (C/C_0) a été tracée en ordonnée en fonction du volume relatif de solution tampon (V/V_0). On observe une diminution de concentration relative maximum avec une augmentation de pH. En revanche, le temps nécessaire pour atteindre ce maximum croît avec l'augmentation de pH. Cette figure montre que l'augmentation de pH engendre une décroissance moins rapide dans la partie désorption.

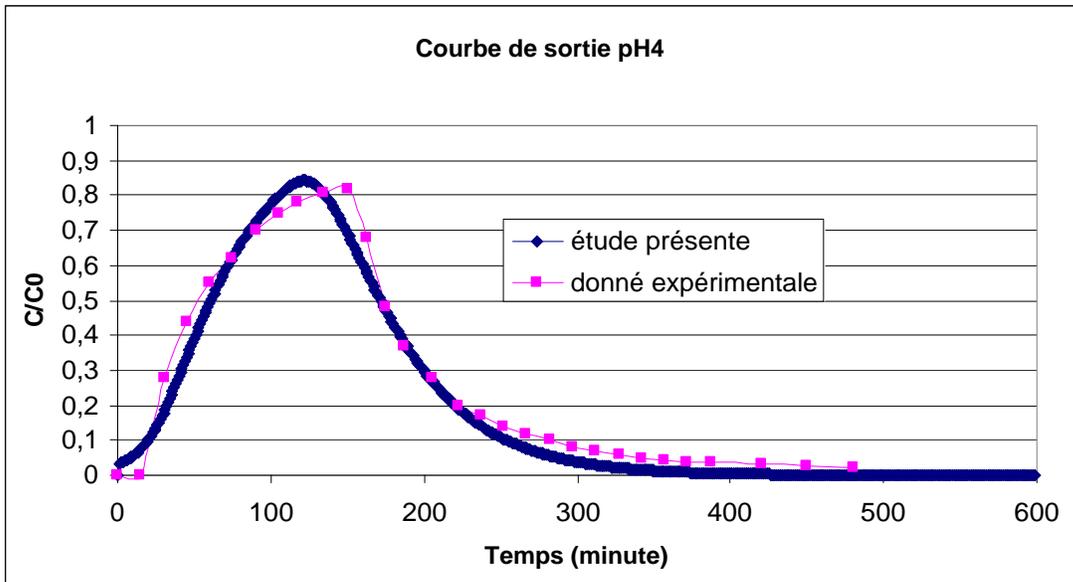


Figure 5-27 La courbe de sortie du zinc à pH 4

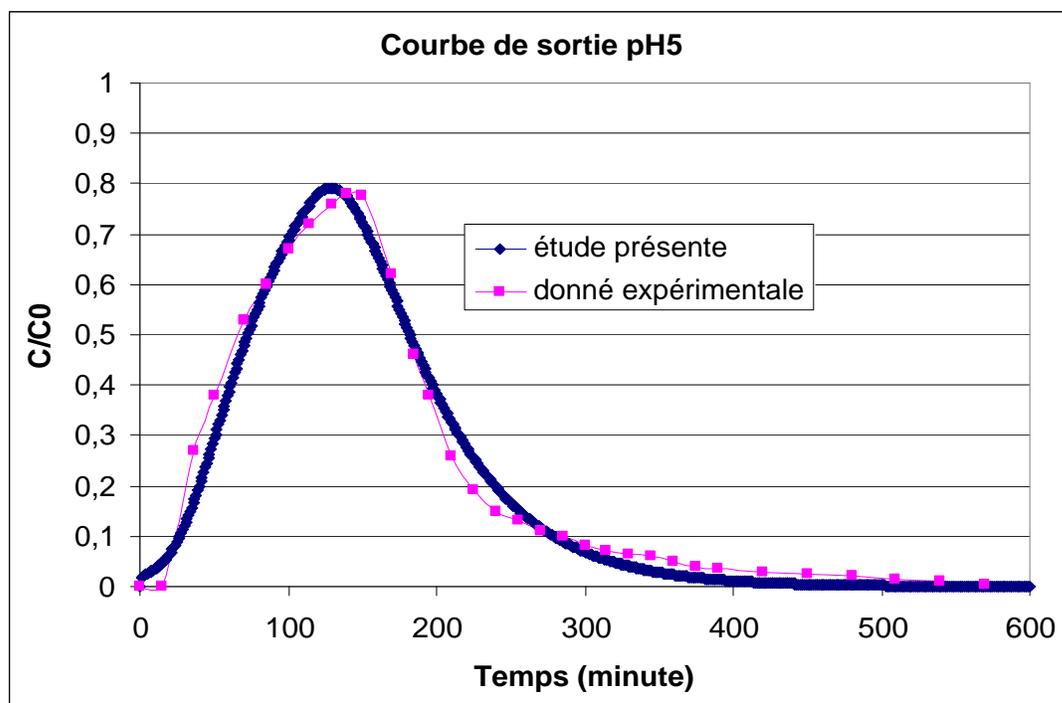


Figure 5-28 La courbe de sortie du zinc à pH 5

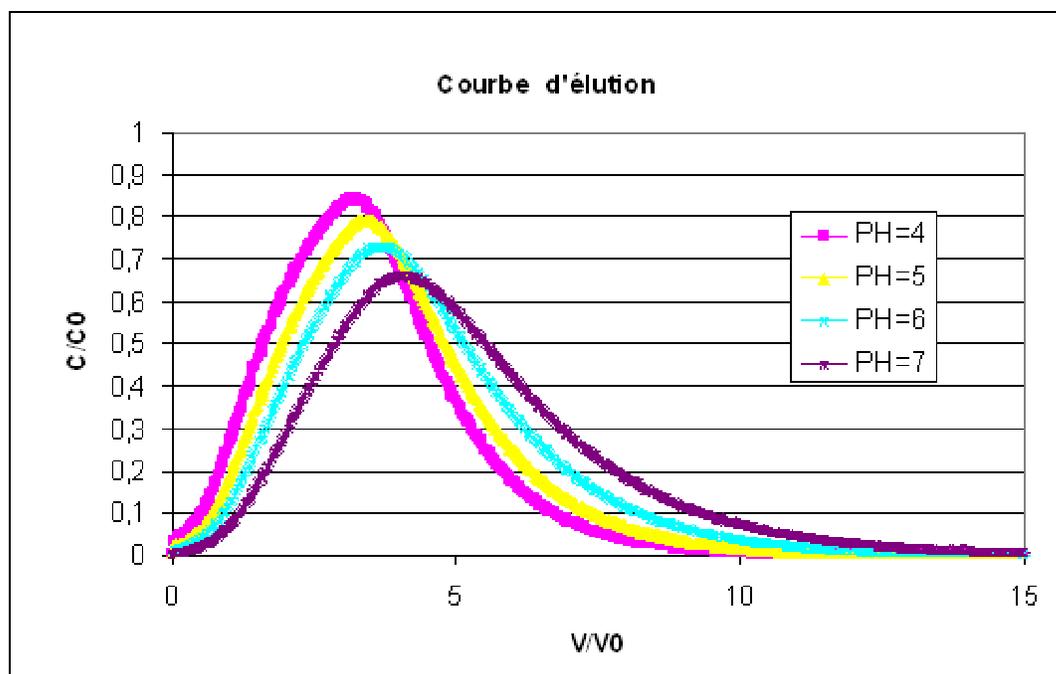


Figure 5-29 Les courbes d'éluions du zinc à différents pH

5.5 Applications du code de calcul

Le but de cette partie à présent est d'expliciter les capacités du code de calcul surtout dans des situations qui à notre connaissance n'ont pas fait l'objet de vérifications expérimentales en non saturés. Quatre applications du code dans les milieux multiphasiques seront présentées. La simulation de transfert des solutés, les effets de l'efficacité osmotique, l'interaction sol/soluté et la simulation complète d'un cas en présence de tous les composants (thermiques, hydriques, chimiques et mécanique) dans un milieu non saturé déformable seront présentées.

5.5.1 Transfert des solutés dans le sol non saturé

Dans cet exemple, on cherche à estimer le transfert des solutés dans un milieu non saturé en supposant une interaction négligeable entre les solutés. On simulera un exemple de transfert de deux éléments chimiques dans une colonne de sol, résolu numériquement par Thomas et Cleall (2001).

Cet exemple consiste en une colonne de sol de 10 cm de longueur et de 0,1 cm d'épaisseur, maillé par 100 éléments carrés à 4 nœuds avec en tout 202 nœuds (Figure 5-30). Le cuivre et le zinc ont des concentrations de 1 mole/m³ sur le bord supérieur ; ils diffusent dans l'échantillon. Les propriétés du sol et des solutés sont données dans le Tableau 5-6. Le modèle de sorption de Langmuir a été appliqué dans la simulation et la température est fixée à T=20° C.

Tableau 5-6 Caractéristiques physiques du sol et des solutés (Thomas et Cleall 2001)

Propriétés	Unit	Valeurs
Conductivité hydraulique	K (m/s)	$4,568 \times 10^{-12}$
Porosité	n (cm ³ /cm ³)	0,40
Température	T (°C)	20±1
Coefficient de dispersion pour le cuivre	D (m ² /s)	$6,342 \times 10^{-10}$
Coefficient de dispersion pour le zinc	D (m ² /s)	$6,342 \times 10^{-11}$
Logarithme de constante d'équilibre pour le cuivre	LogK	2,6885
Logarithme de constante d'équilibre pour le zinc	LogK	1,4186
Masse volumique	ρ (Mg/m ³)	1,5
Enthalpie de réaction	Q(J)	0,0

- **Conditions aux limites :**

- Concentration

Sur le bord inférieur, la concentration est toujours nulle.

- Déplacement

Sur tous les nœuds, les déplacements sont bloqués dans les deux directions verticale et horizontale.

- **Conditions initiales :**

- Concentration

Sur le bord supérieur, on applique une concentration de 1 mole/m^3 pour le cuivre. Sur les autres nœuds, la concentration est nulle.

- Pression

La pression de l'eau sur les nœuds du bord supérieur est égale à -5 kPa et pour les autres nœuds change avec la pente de 9.81 Pa/mm (condition hydrostatique). La pression de l'air sur tous les nœuds est égale à la pression atmosphérique.

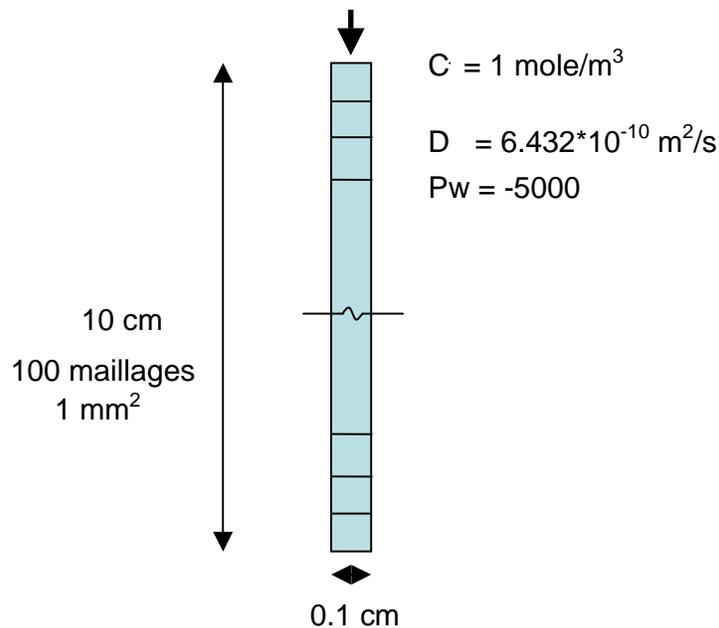


Figure 5-30 Maillage utilisé pour le calcul.

5.5.1.1 Résultats de simulation

La Figure 5-31 présente les résultats de la simulation de transfert des solutés avec le code de COMPASS après 25000 secondes (environ 7 h). La concentration au sommet de la colonne est égale à la concentration imposée. La concentration du soluté s'atténue dans la colonne et elle devient proche de zéro à une distance de 2 cm de la source du soluté. Cette atténuation est

plus forte pour le cuivre que pour le zinc à cause des propriétés de sorption différentes des solutés. Etant donné que $\text{Log}K$ pour Cu et Zn sont égaux à 2.6885 et 1.4186, respectivement, on constate qu'avec un $\text{Log}K$ supérieur il y a une pente plus forte. Le changement de coefficient de dispersion a aussi un effet important sur l'atténuation de la concentration. La Figure 5-32 montre que plus coefficient de dispersion diminue, plus la pente d'atténuation de la concentration devient forte (Thomas et Cleall 2001).

La Figure 5-33 montre les profils de concentration en Cu calculé par le code θ - STOCK sans envisager les effets de la concentration en Zn dans le milieu. Ces résultats calculés par code COMPASS sont aussi présentés dans cette figure. Dans les deux codes, le modèle de Langmuir a été utilisé pour la description des réactions géochimiques. On constate que les concentrations calculées par les deux codes sont proches en tous points, pour les cas avec ou sans sorption. Cet exemple montre la capacité du code θ - STOCK lorsque le transfert et la sorption d'un soluté n'ont pas d'effet important sur le transport et la sorption de l'autre soluté.

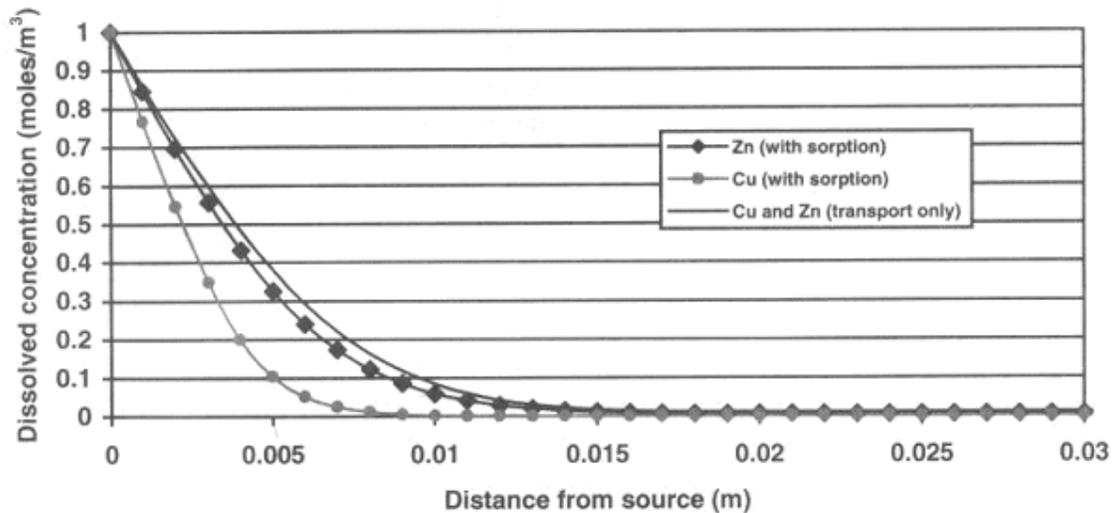


Figure 5-31 Profils de concentration en Cu et Zn (Thomas et Cleall 2001) avec le même coefficient de dispersion, à $t=25000$ s (environ 7 h)

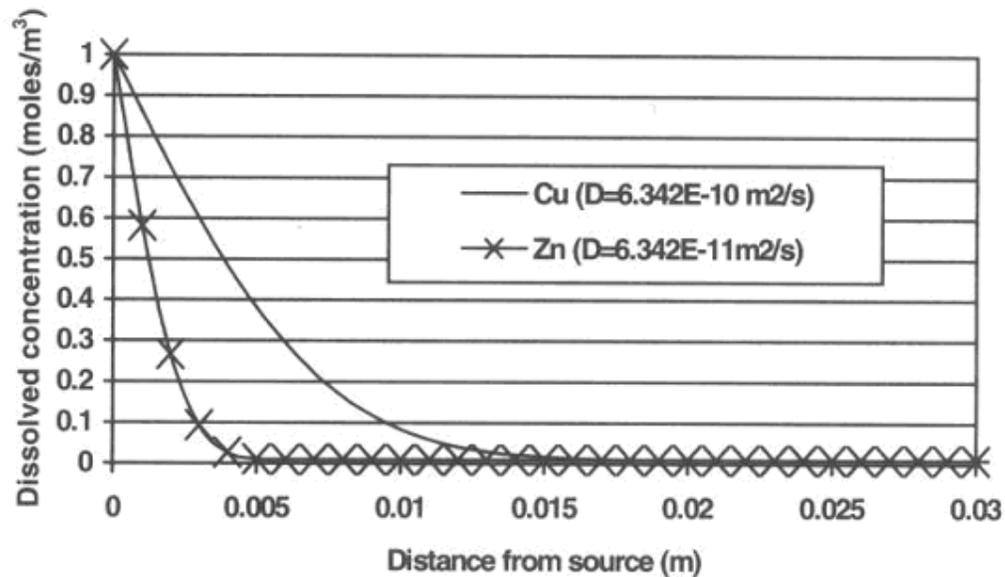


Figure 5-32 Profils de concentration en Cu et Zn avec différents coefficients de dispersion (Thomas et Cleall 2001), à $t=25000$ s (environ 7 h).

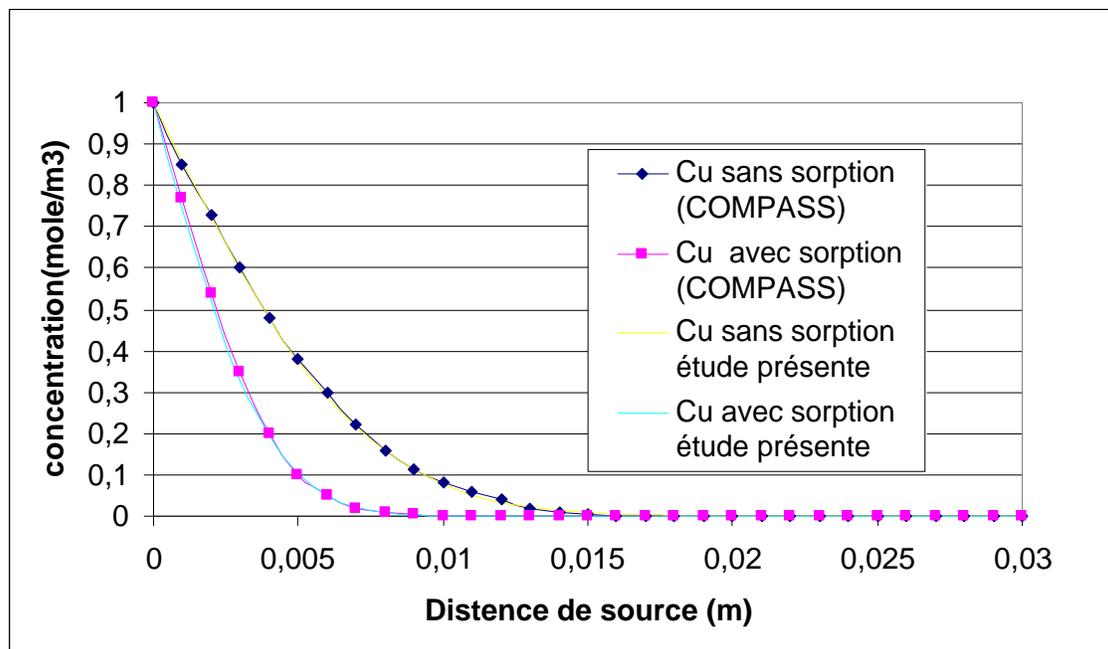


Figure 5-33 La comparaison de résultats de simulation numérique par θ - STOCK et COMPASS (à $t=25000$ s, environ 7 h)

5.5.2 Transfert d'un soluté dans un sol non saturé avec différentes efficacités osmotiques

Le but de cette partie est de montrer les effets de l'efficacité osmotique (ω) sur transfert du soluté dans un milieu non saturé.

Une série d'exemples avec différentes efficacités osmotiques à été résolu pour une colonne de sol sous condition isotherme ($T=20^{\circ}\text{C}$). Une colonne de sol de 30 cm de longueur et de 0,5 cm d'épaisseur, maillée par 60 éléments carrés à 4 nœuds (soit en tout 122 nœuds) à été utilisée (Figure 5-34). Le soluté entre dans milieu avec une concentration de 100 mole/m^3 sur le bord droit. L'efficacité osmotique dans le milieu varie de 0,0 à 0,8. Pour simplifier, on ne considère que le transfert du soluté dans le milieu, sans sorption ou désorption. Les propriétés du sol et du soluté sont données dans le Tableau 5-7.

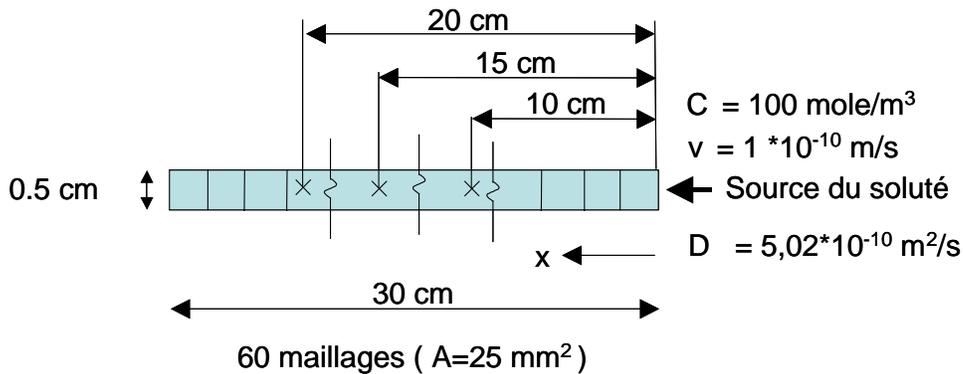


Figure 5-34 Maillage utilisé pour le calcul.

• **Conditions aux limites :**

- Concentration

Sur le bord droit, on applique une concentration de 100 mole/m^3 .

- Déplacement

Sur tous les nœuds, les déplacements sont bloqués dans les deux directions verticale et horizontale.

- Flux de l'eau

Sur le bord droit, on applique le débit de $0,5 \times 10^{-12}\text{ m}^3/\text{s}$.

Tableau 5-7 Caractéristiques physiques du sol et du soluté

Propriétés	Unité	Valeurs
Conductivité hydraulique	K (m/s)	1×10^{-9}
Porosité	n	0,33

Température	T (°C)	20
Coefficient de dispersion pour le soluté	D (m ² /s)	5,02× 10 ⁻¹⁰
Masse moléculaire du soluté	M (g/mole)	58,5
Masse volumique	ρ (Mg/m ³)	1,5
Efficacité osmotique	variable	0,0- 0,8

▪ **Conditions initiales :**

○ Concentration

La concentration initiale est nulle.

○ Pression

Sur tous les nœuds, la pression de l'eau est : -50 kPa et la pression de l'air est égale à la pression atmosphérique.

5.5.2.1 *Résultats de simulation*

La Figure 5-35 montre la variation de la concentration pour différentes efficacités osmotiques à une distance de 15 cm de la source du soluté, soit au milieu d'échantillon. Pour une efficacité osmotique égale à 0,8, la concentration commence à augmenter à partir de la concentration initiale ($C_0=0$) à 5,5 mole/m³ après un an, alors qu'elle augmente jusqu'à 57,5 mole/m³ dans le cas où l'efficacité osmotique est égale à 0. On voit une diminution de pente de la courbe de la variation de concentration avec l'augmentation de l'efficacité osmotique.

La Figure 5-36 montre la variation de la concentration pour différentes efficacités osmotiques à une distance de 10 cm de la source du soluté. Pour une efficacité osmotique égale à 0,8, la concentration commence à augmenter à partir de la concentration initiale ($C_0=0$) à 21,5 mole/m³ après un an alors qu'elle augmente jusqu'à 72,5 mole/m³ pour une efficacité osmotique égale à 0. En comparant ces figures, on observe que plus on est loin de la source, plus l'effet d'efficacité osmotique sur la concentration augmente.

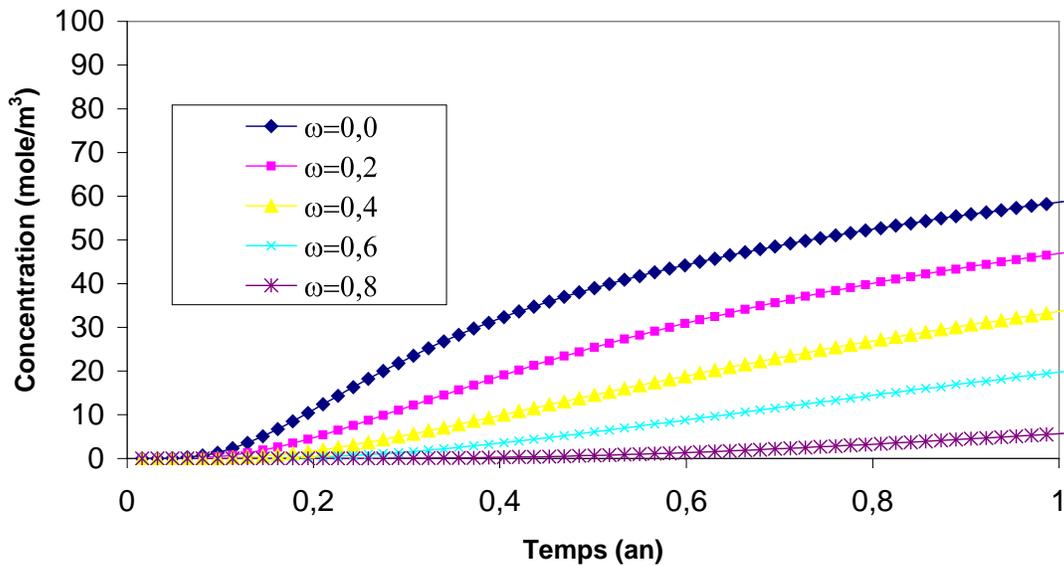


Figure 5-35 Variation sur un an de la concentration pour différentes efficacités osmotiques à $x=15$ cm de la source de soluté

La Figure 5-37 montre la variation de la concentration pour différentes efficacités osmotiques à une distance de 15 cm de la source du soluté pendant 10 ans. On voit que les courbes de variation de la concentration ont des pentes fortes jusqu'à un an, avec une diminution des pentes pendant les années suivantes. La différence entre les courbes avec différentes efficacités osmotiques augmente jusqu'à un an pour ensuite converger vers la valeur de la concentration imposée. On observe que plus l'efficacité osmotique augmente, plus on est en retard au niveau de la distribution de la concentration.

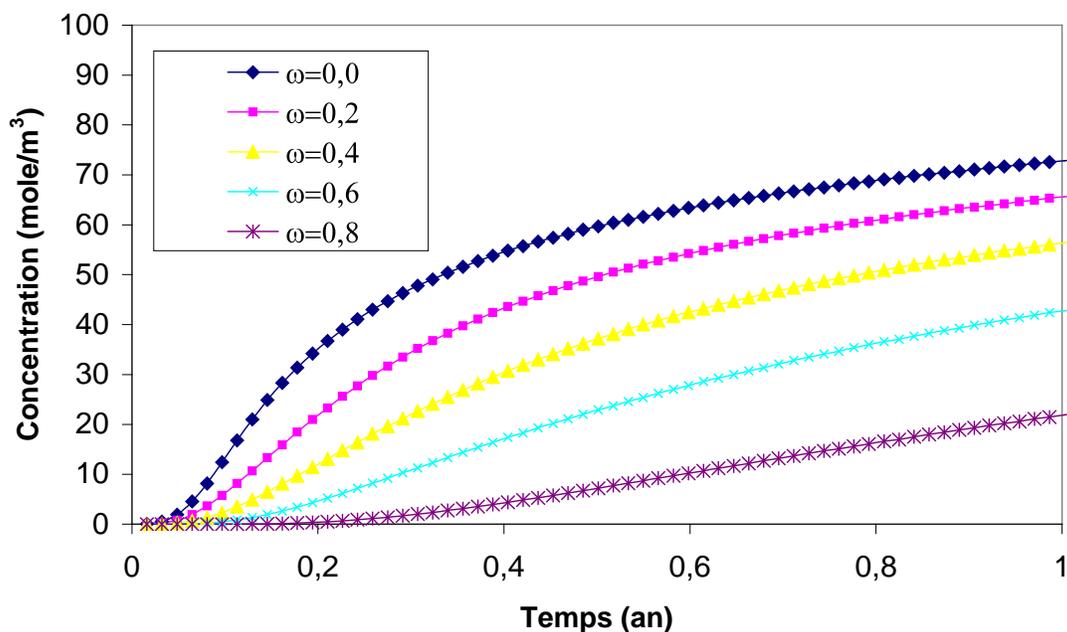


Figure 5-36 Variation sur un an de la concentration des différentes efficacités osmotiques à $x=10$ cm de la source de soluté

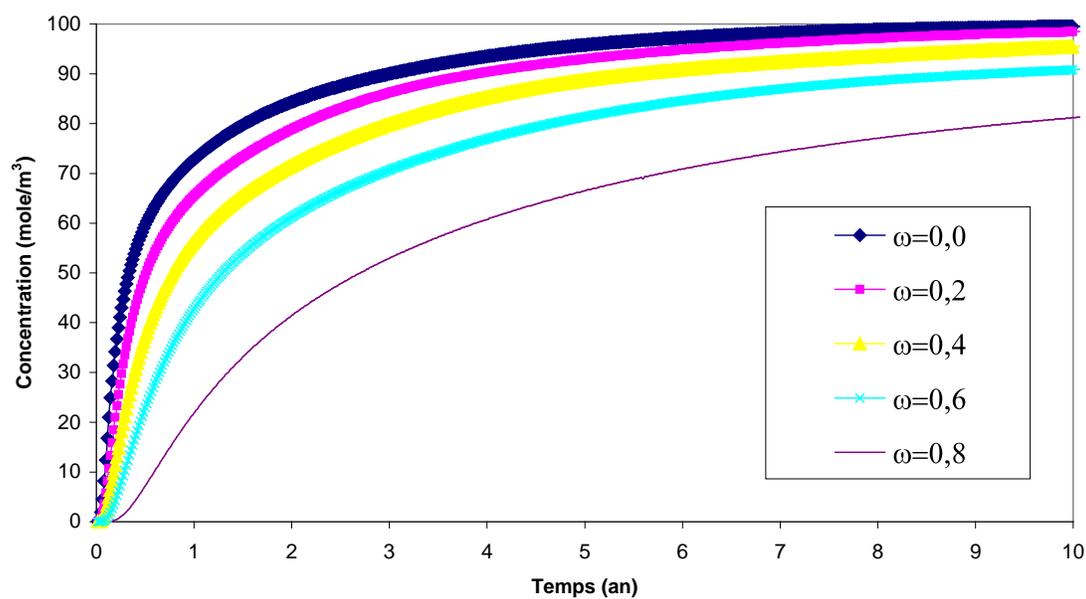


Figure 5-37 Variation de la concentration pour différentes efficacités osmotiques à $x=10$ cm de la source de soluté pendant dix ans

On considère à présent un exemple où l'efficacité osmotique est variable en fonction de la teneur en eau et de la concentration selon la relation suivante, illustrée par la Figure 5-38.

$$\omega = e^{(-\theta - 0.01c)} \quad \text{Eq. 5-10}$$

La Figure 5-39 montre la variation de concentration aux différentes distances de 10 à 20 cm de la source du soluté pendant 10 ans. Comme précédemment, on observe que la pente de la courbe de variation de la concentration à $x=10$ cm est plus forte que celle de $x=20$ cm. En comparant la courbe de la concentration à $x=10$ cm avec celle de la Figure 5-37, on constate que la courbe croise les différentes courbes de cette dernière figure du fait du changement d'efficacité osmotique dans le temps, suite aux variations de teneur en eau et de la concentration.

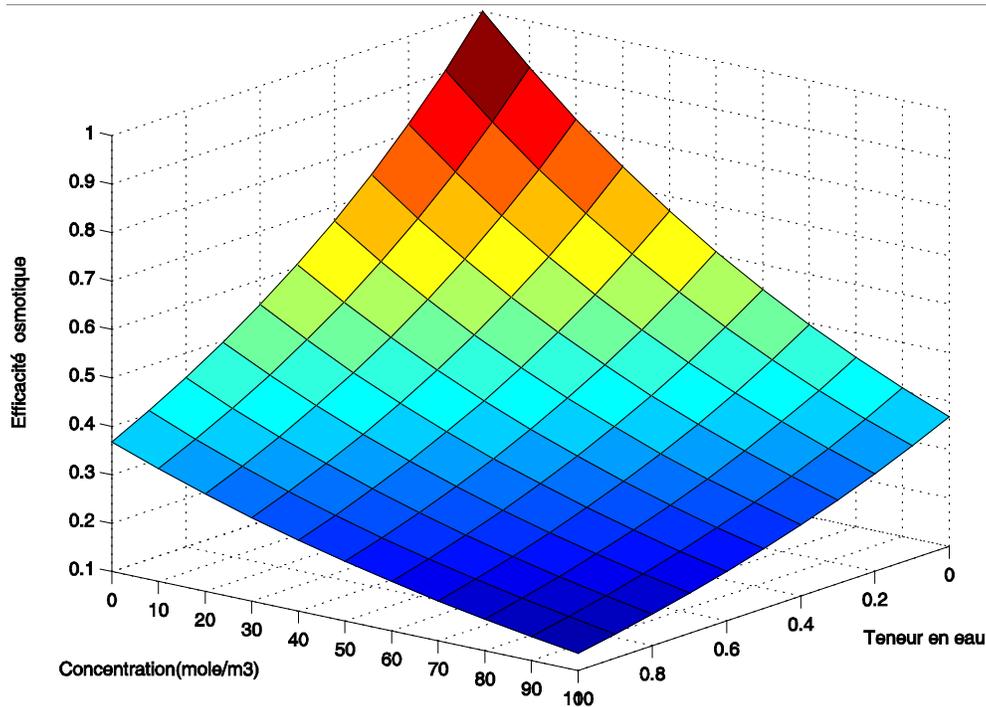


Figure 5-38 l'efficacité osmotique en fonction de concentration et teneur en eau

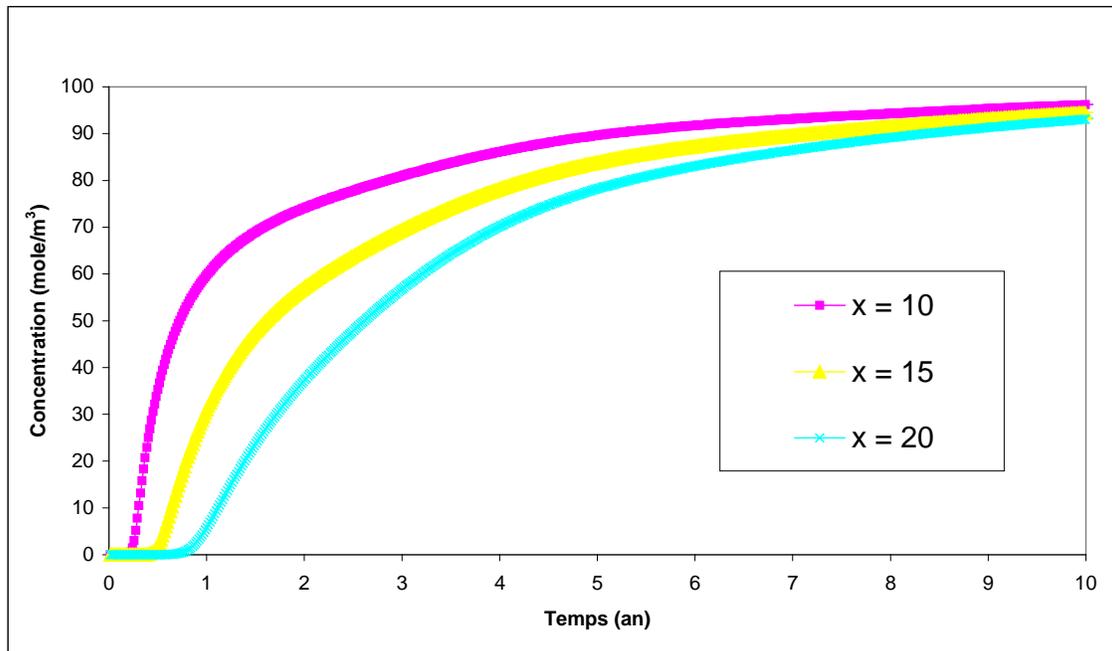


Figure 5-39 Variation avec le temps de la concentration pour les points situés à $x=10$ et $x=20$ cm de la source du soluté, avec une efficacité osmotique variable.

5.5.3 Concentration chimique et déplacement mécanique dans un milieu non saturé

Le but de cette partie est de montrer les effets de la concentration du soluté sur la déformation d'un milieu non saturé.

Une série d'exemples avec différents paramètres d'interaction soluté/déformation (ζ) a été résolue pour une colonne de sol en condition isotherme ($T=20^\circ\text{C}$). Une colonne de sol de 30 cm de longueur et de 0,5 cm d'épaisseur, maillé par 60 éléments carrés à 4 nœuds avec en tout 122 nœuds (Figure 5-40) à été utilisée. Le soluté entre dans le milieu avec une concentration de 100 mole/m^3 sur le bord droit. Le paramètre d'interaction soluté/déformation (ζ) varie de 0,02 à 0,1 pour les différents exemples. Pour simplifier, on ne considère que le transfert du soluté dans le milieu, sans tenir compte des phénomènes de sorption ou de désorption. Les caractéristiques du sol et du soluté sont données dans le Tableau 5-7. L'efficacité osmotique est égale à 0,3 pour tous les exemples.

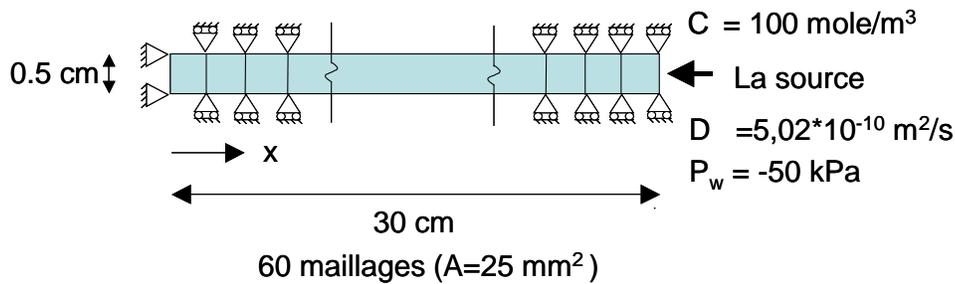


Figure 5-40 Maillage utilisé pour le calcul.

- **Conditions aux limites et conditions initiales :**

Sur le bord droit, on applique la concentration de 100 mole/m^3 . La concentration initiale est nulle. Sur le bord gauche, les déplacements sont bloqués dans les deux directions verticale et horizontale. Seul déplacement vertical pour les autres nœuds est bloqué. Sur tous les nœuds, la pression de l'eau initiale est de -50 kPa et la pression de l'air initiale est prise égale à la pression atmosphérique.

5.5.3.1 Résultats de la simulation

La Figure 5-41 montre les courbes de variation de la concentration à différentes distances de la source de soluté avec $\zeta=0,1$ et $\omega=0,3$. Pour le point à la distance de 5 cm de la source ($x=25 \text{ cm}$), la concentration augmente à partir de la concentration initiale ($C_0=0$) jusqu'à 77 mole/m^3 après un an et elle atteint la valeur de 100 mole/m^3 après 10 ans. Dans le cas où on est à 25 cm de la source de soluté ($x=5 \text{ cm}$), la concentration augmente jusqu'à 12 mole/m^3 après un an et elle atteint 100 mole/m^3 après 10 ans. En comparant ces figures, on observe que plus on est loin de la source, plus la concentration augmente tard pour atteindre la valeur de la concentration de la source. Une partie de la déformation du milieu est due à cette différence de la concentration. Dans la partie où la concentration est plus forte, on a une pression osmotique plus forte. Cette pression osmotique diminue la succion et engendre un gonflement dans l'échantillon.

La Figure 5-42 montre la pression d'eau à différentes distances de la source du soluté pour le cas où ζ est égal $0,1$. On voit une augmentation de pression d'eau de -50 kPa à -10 kPa juste à côté de la source ($x=30 \text{ cm}$), qui se stabilise à la pression d'eau initiale après 10 ans. La variation de pression au départ est purement numérique. A une distance de 7.5

cm de la source ($x=22.5$) on voit ce phénomène mais de façon moins marquée qu'au voisinage de la source. Au point à une distance de 30 cm de la source ($x=0$) on observe une diminution de la pression d'eau jusqu'à -70 kPa en un an, puis un retour avec stabilisation à la pression initiale après dix ans. A des distances de 22.5 cm et 15 cm de la source, on voit le même phénomène, moins marqué. Cette augmentation de pression d'eau à côté de la source et sa diminution loin de la source met en évidence une saturation dans les zones à côté de la source et une désaturation plus loin.

La Figure 5-43 montre le déplacement dans le temps, sur le bord droit, pour les différents paramètres d'interaction soluté/déformation (ζ). Pour $\zeta=0,02$, la courbe de déplacement (consolidation) commence à augmenter avec une pente faible et elle atteint une valeur de 0,08 mm après 10 ans. Pour $\zeta=0,1$, le déplacement commence à augmenter avec une pente raide, puis la pente diminue et se stabilise dans le temps à une valeur de 0.47 mm. On observe que plus le paramètre d'interaction soluté/déformation (ζ) augmente, plus le déplacement croît et plus la pente initiale devient forte.

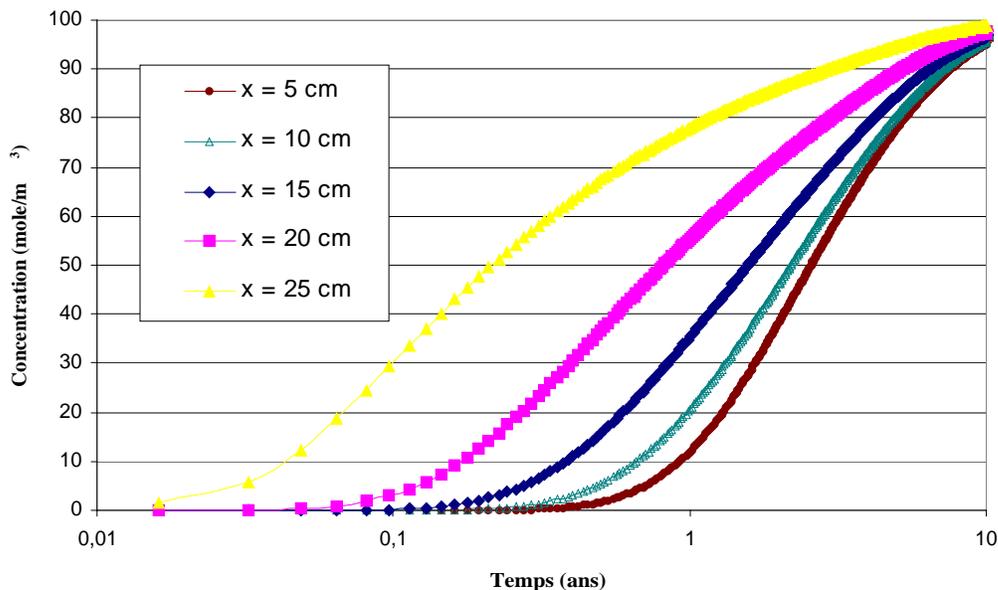


Figure 5-41 La concentration du soluté dans différente distance de la source du soluté ($\zeta=0,1$, $\omega=0,3$)

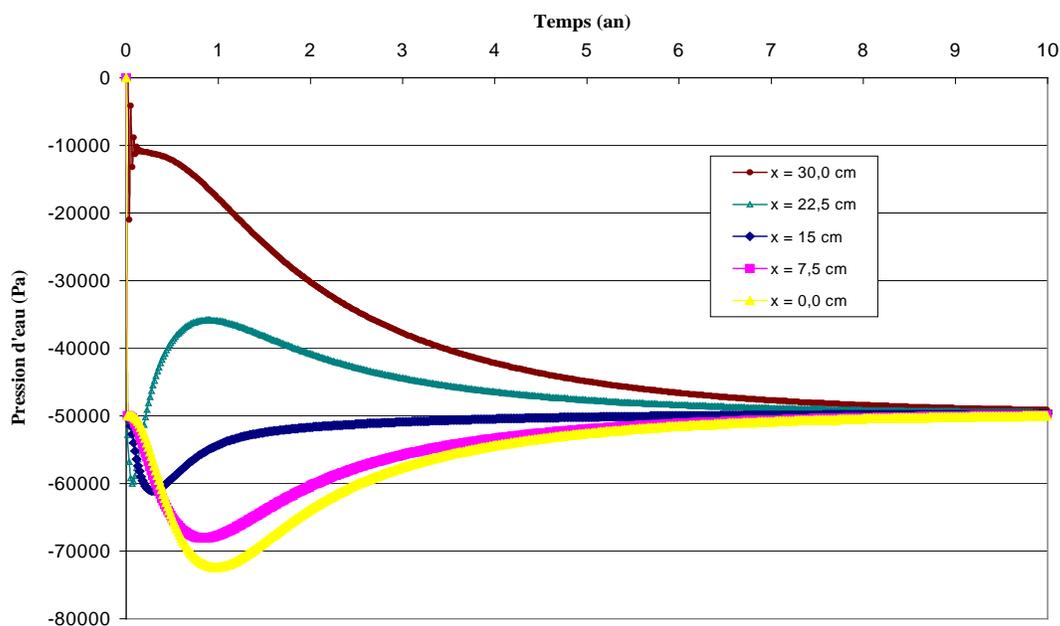


Figure 5-42 Pression d'eau dans différente distance de la source du soluté ($\zeta=0,1$, $\omega=0,3$)

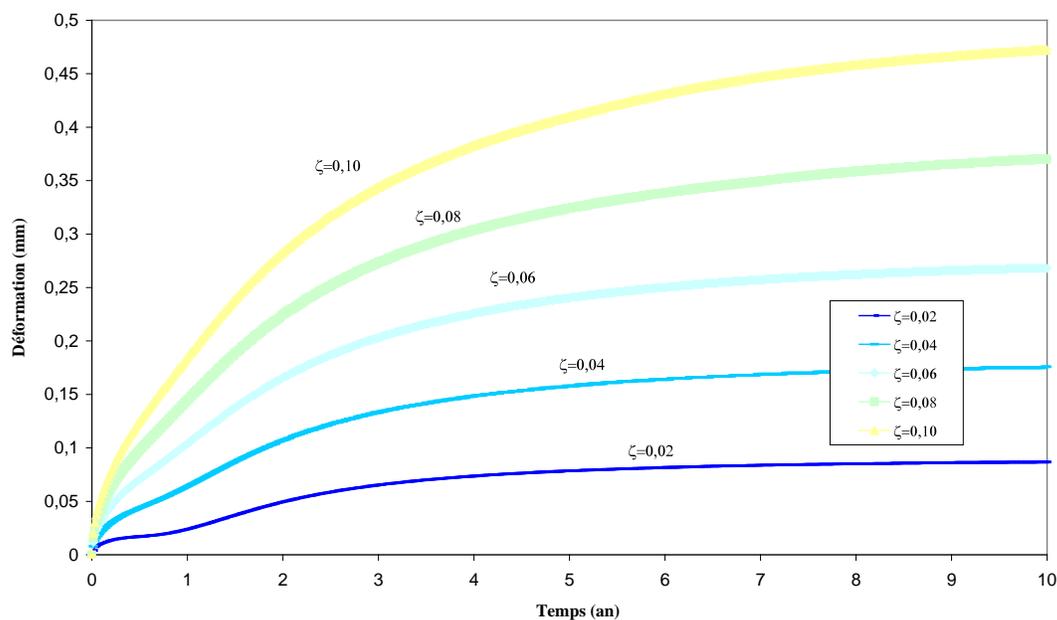


Figure 5-43 Effet de paramètre d'interaction soluté/ déformation (ζ) sur déplacement (efficacité osmotique égale à 0,3)

5.5.4 Transfert thermo-hydro-chimio-mécanique dans un milieu non saturé déformable

Le but de cette simulation est de montrer la capacité du code à résoudre des problèmes de transport couplés des polluants solubles en présence de chaleur dans les milieux non saturés.

5.5.4.1 Caractéristiques du matériau

On envisage un problème qui peut être considéré comme une extension de l'expérimentation de CIEMAT (Villar et al., 1993). Une source de chaleur et de soluté est placée au milieu du bord supérieur d'un échantillon de $15 \times 15 \text{ cm}^2$ (Figure 5-44).

La perméabilité à l'eau et à l'air du matériau en fonction de l'indice des vides (e) et du degré de saturation (S_r) sont données par les relations :

$$K_w = 1.2 \times 10^{-6} \cdot 10^{5e} \left[\frac{S_r - 0,05}{0,95} \right]^3 \quad (\text{m/s}) \quad \text{Eq. 5-11}$$

$$K_g = 3 \times 10^{-10} \frac{\gamma_g}{1,846 \times 10^{-5}} [e(1 - S_r)]^4 \quad (\text{m/s}) \quad \text{Eq. 5-12}$$

La surface d'état de l'indice des vides est déterminée par :

$$e = \frac{1,73}{\exp\left[\frac{[1,5 \left(\frac{\sigma - p_g}{p_{\text{atm}}} \right) + 0,15 \left(1 - \frac{\sigma - p_g}{80 \times 10^4} \right) \left(\frac{p_g - p_w}{p_{\text{atm}}} \right) + 0,015 \left(1 - \frac{\sigma - p_g}{80 \times 10^4} \right) \left(\frac{p_{\text{os}}}{p_{\text{atm}}} \right)]}{K_b} \right] \exp[-3 \times 10^{-4} (T - T_0)]} - 1 \quad \text{Eq. 5-13}$$

Et la surface d'état du degré de saturation prend la forme suivante

$$S_r = 1 - [1,0 + (-2,088 \times 10^{-8})(\sigma - p_g)] [1 - \exp((-2,08855 \times 10^{-4})(p_g - p_w))] \exp(-10^{-3}(C - C_0)) * \exp(10^{-5}(T - T_0)) \quad \text{Eq. 5-14}$$

5.5.4.2 Simulation numérique

Le maillage aux éléments finis utilisé afin de réaliser les simulations numériques est présenté sur la Figure 5-45. Les paramètres utilisés pour la simulation de transfert du soluté sont résumés dans le Tableau 5-8. Par ailleurs, les propriétés thermiques du milieu sont données sur le Tableau 5-2 et elles sont donc égales à celles de premier exemple. Les interactions sol/soluté sont simulées par modèle d'adsorption de Freundlich.

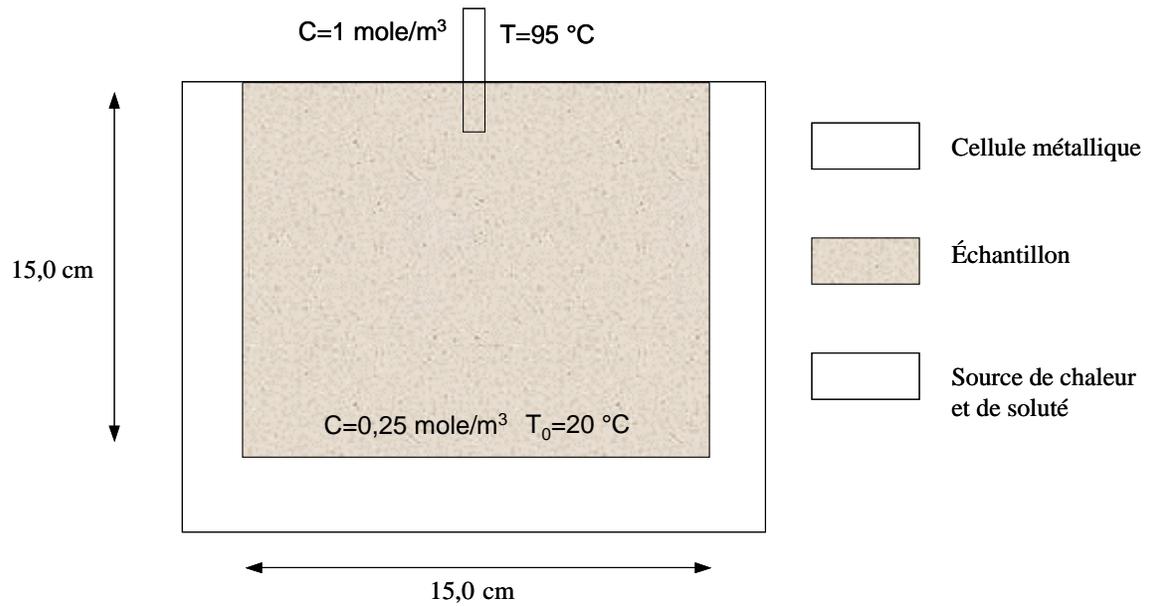


Figure 5-44 Schématique du problème.

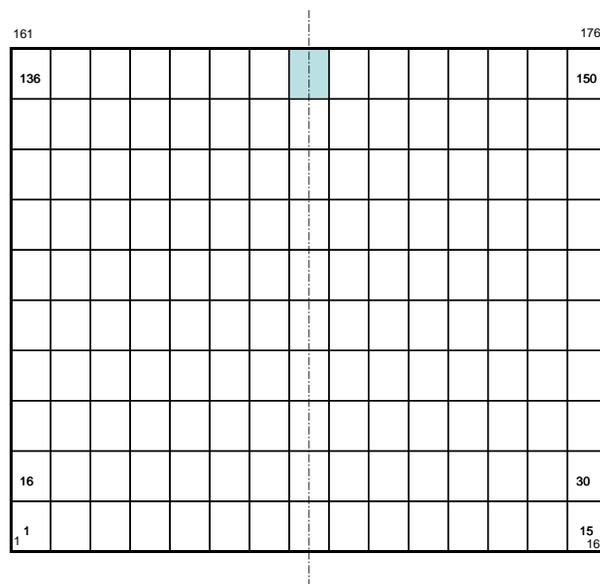


Figure 5-45 Maillage utilisé pour la simulation numérique

Tableau 5-8 Caractéristiques physiques du matériau

Propriétés	Unit	Valeurs
Coefficient de diffusion moléculaire	D_0 (m ² /s)	1,0 e-10
Degré de saturation initial	S_r (cm ³ /cm ³)	0,5
Porosité	n (cm ³ /cm ³)	0,73
Coefficient de décomposition du soluté	λ_1 (1/s)	1,0 e-4
Coefficient de décomposition du soluté adsorbée	λ_2 (1/s)	1,0 e-4
Coefficient de dispersion longitudinale	α_L (m)	2,0 e-2
Coefficient de dispersion transversale	α_{tv} (m)	2,0 e-2
Coefficient de Freundlich	K_p (m ³ /kg)	1,0 e-3
Coefficient de Freundlich	α	2,0
Masse volumique des grains	ρ (Mg/m ³)	2,78
Masse moléculaire du soluté	M (g/mole)	237
Capacité calorifique du soluté	C_{pc} (J/kg°C)	116
Concentration dissoute initiale	C_0 (mole/l)	0,25
Concentration adsorbée initiale	C_{s0} (mole/l sol)	0,00

- **Conditions aux limites :**

- Concentration

Sur tous les bords, la concentration est libre sauf l'élément au milieu du bord supérieur qui a une concentration de 1 mole/m³.

- Déplacement

Sur le bord inférieur, les déplacements sont bloqués dans les deux directions verticale et horizontale. Le bord supérieur est libre. Les limites des deux côtés droit et gauche sont uniquement bloquées dans le sens horizontal.

- Pression

Tous les bords sont imperméables à l'eau et à l'air sauf la limite supérieure qui est à l'air libre (pression atmosphérique).

- Température

La température des nœuds se trouvant sur les bords, est fixée à 28 °C. La température de dispositif d'échauffement est égale à 95° C.

- **Conditions initiales :**

- Concentration

Sur tous les nœuds, la concentration initiale est de $0,25 \text{ mole/m}^3$.

- Pression

La pression de l'air sur tous les nœuds est égale à la pression atmosphérique. La pression d'eau peut être calculée par la surface d'état du degré de saturation.

- Température

La température initiale de tous les nœuds du maillage est considérée comme étant égale à 20°C .

5.5.4.3 Résultat du calcul numérique

A la fin de l'essai, 2 heures après le début de l'échauffement et de la diffusion du soluté, les isovaleurs de température sont données sur la Figure 5-46. On observe que la température diminue de façon régulière de l'endroit où est placée le dispositif de l'échauffement jusque vers les bords. Cela est dû au fait que la température de ce dispositif est montée jusqu'à 95°C et que la température est maintenue constante à 28°C sur les limites. En comparant cette figure avec la Figure 5-3 du premier exemple, on s'aperçoit que les isovaleurs s'étendent plus vers le bas de l'échantillon. Cette observation est reliée à un écoulement plus rapide d'eau qui est dû à une perméabilité plus forte de l'échantillon de sol.

La valeur du degré de saturation est proche de 40% à côté de la source et d'environ 70% en bas d'échantillon. Les isovaleurs de degré de saturation ont une forme radiale à proximité du dispositif d'échauffement et de la source de soluté. Elles s'aplatissent au fur et à mesure que l'on s'approche du bas de la cellule (Figure 5-47).

La Figure 5-48 montre les isovaleurs de l'indice des vides au sein de milieu. L'indice des vides au voisinage de la source de chaleur et de soluté est égal à 0,77 alors qu'aux bords, il reste à peu près identique aux valeurs initiales (0,73), ce qui montre clairement les effets de chaleur et de la concentration sur le comportement mécanique du milieu.

La Figure 5-49 montre les isovaleurs de la succion. La succion au voisinage de la source de chaleur est environ égale à 4300 kPa contre 2700 en bas d'échantillon.

L'échantillon déformé est présenté en Figure 5-50. Le déplacement maximum de l'échantillon vaut environ 3 mm. On observe un déplacement quasiment rigide de l'élément de source par rapport à ses éléments latéraux, qui peut s'interpréter par une plus grande rigidité due à une succion plus forte dans cette zone par rapport aux zones plus lointaines. Cette succion peut engendrer une compression plus forte que la dilatation thermique.

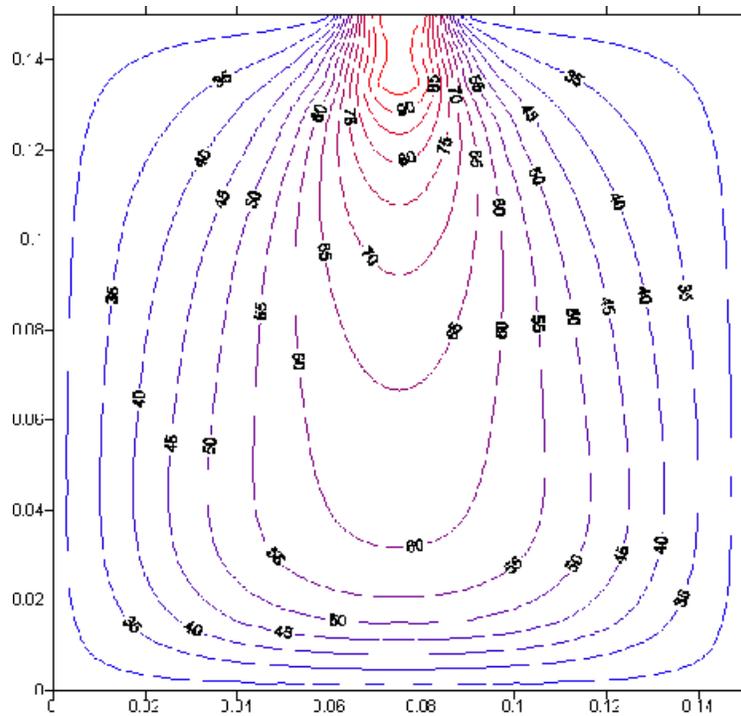


Figure 5-46 Iso valeurs de la température

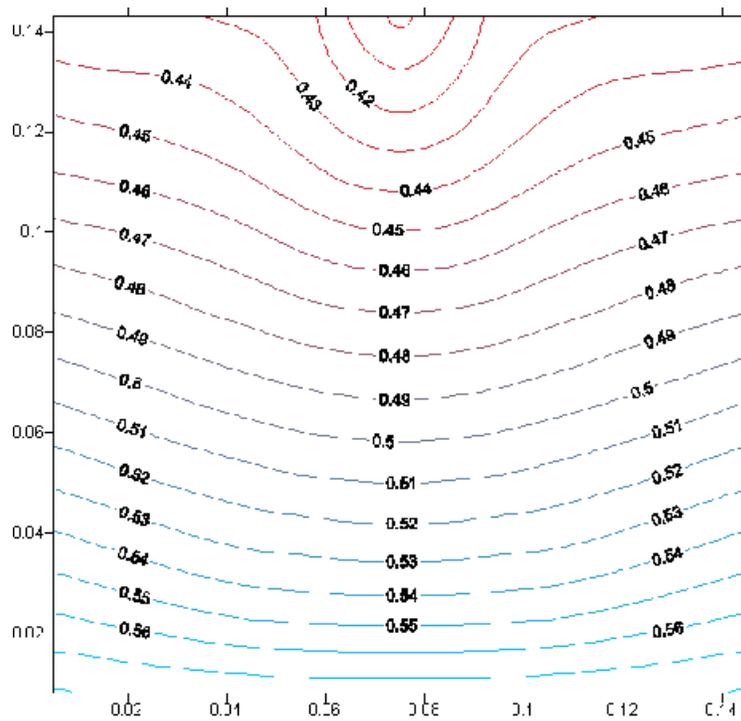


Figure 5-47 Iso valeurs du degré de saturation

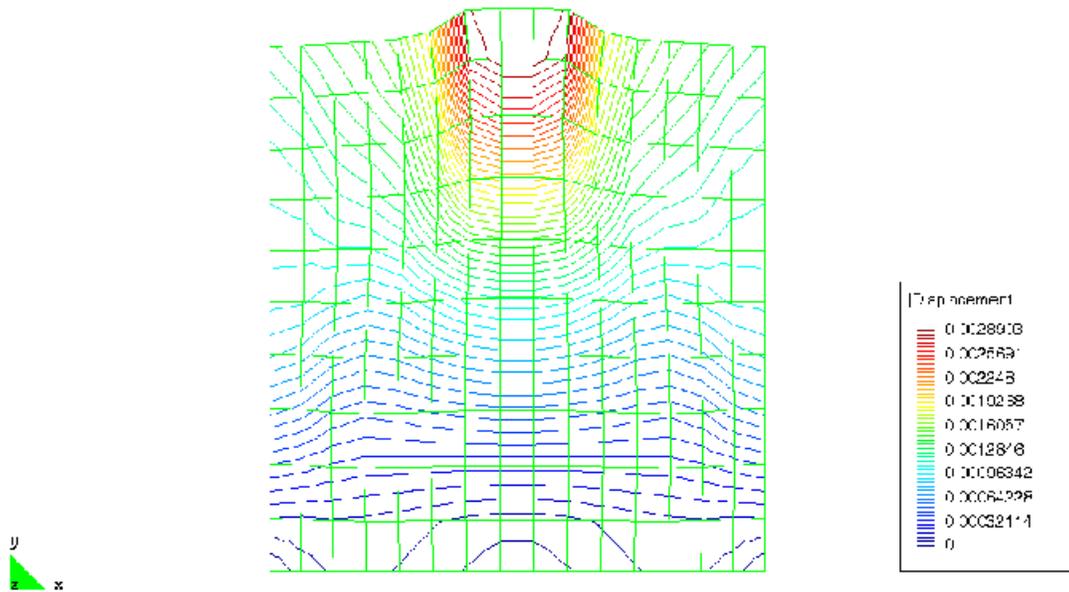


Figure 5-50 Iso valeurs de la déplacement (m).

La Figure 5-51 montre les isovaleurs de concentration du soluté dans l'échantillon. La concentration au voisinage de la source du soluté est de 1 mole/m³ et elle diminue dans le milieu avec une forme particulière ; des isovaleurs avec une forme radiale à proximité du dispositif d'échauffement et une forme en triangle en bas de l'échantillon. Les concentrations inférieures à la concentration initiale sont dues à l'adsorption et à la décomposition du composé soluble.

La Figure 5-52, qui présente le champ des vitesses, permet d'interpréter les résultats en concentration. On observe deux cycles symétriques de circulation de l'eau. L'eau est chauffée autour de la source de chaleur et de soluté et se déplace vers le bas. Après un refroidissement en bas et à côté les bords verticaux, l'eau se rapproche de la source de chaleur et de soluté. Cette circulation d'eau illustre la forme de la distribution des concentrations observée précédemment. La concentration se développe vers le bas, puis du fond vers le haut de l'échantillon (Figure 5-51).

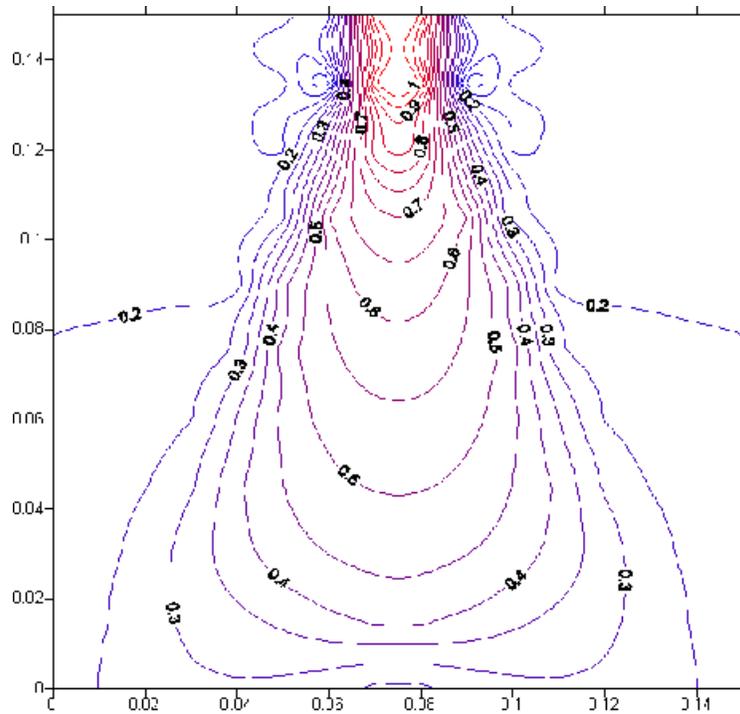


Figure 5-51 Iso valeurs de la concentration.

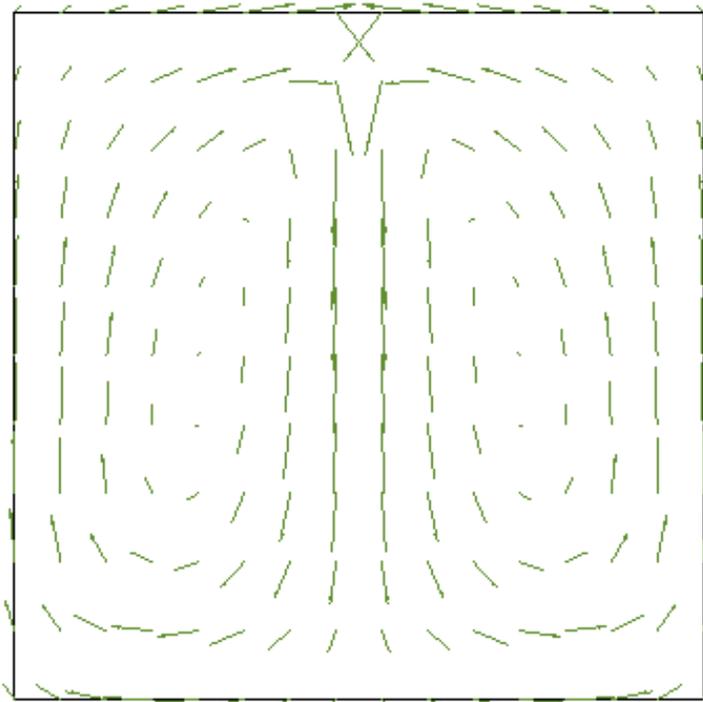


Figure 5-52 Champs de la vitesse.

5.6 Conclusion

Dans ce chapitre on a utilisé les développements du code θ – STOCK réalisés dans le cadre de ce travail pour simuler le comportement THCM dans les géomatériaux multiphasiques. Quatre aspects ont été abordés :

Premièrement, un exemple d'étude thermo-hydro-mécanique dans un sol non saturé qui a permis de vérifier le code développé en conditions THM.

Deuxièmement, les exemples correspondant aux conditions de transfert de polluant dans les milieux saturés sont examinés dans le cas du transfert de soluté, une bonne concordance avec les résultats analytiques.

Troisièmement, les exemples traitant les problèmes liés aux transferts de soluté dans les sols non saturés et l'interaction sol-soluté sont présentés, avec des résultats du code en bonne concordance avec les résultats expérimentaux et ceux d'autres codes aux éléments finis.

Enfin, des applications du code dans les milieux non saturés ont été présentés, pour montrer la capacité du code à simuler ces milieux sous chargement Thermo-Hydro-Chimico-Mécanique.

On a pu observer dans l'ensemble une bonne concordance des résultats obtenus par le code θ – STOCK avec les données de la littérature. L'apport nouveau de ce travail réside dans la capacité du code à traiter les aspects chimiques non isothermes dans les milieux non saturés.

CHAPITRE SIX: CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

L'objectif de ce travail était de modéliser et de simuler le comportement thermo-hydro-chimio-mécanique dans les sols non saturés. Dans certains cas, les composantes thermiques, hydriques, chimiques et mécaniques interagissent fortement. Le transport de soluté dans les sols non saturés en eau joue un rôle important dans les problèmes liés à la pollution du sol, de l'eau souterraine et même de l'air. Dans l'argile, les propriétés mécaniques sont aussi modifiées par les changements de concentration de cations. Le changement de température du milieu peut accélérer ou amoindrir ces effets. On perçoit ainsi que le couplage thermo-hydro-chimio-mécanique (THCM) prend une importance croissante.

Dans ce travail, nous avons présenté tout d'abord une revue biblio de différentes modélisations THM et des aspects chimiques dans les sols qui ont ensuite été abordés sous l'angle de la modélisation..

Après avoir présenté les formulations THM CERMES intégrées dans le Code_Aster dans le chapitre trois, on a vérifié le code à travers des analyses axisymétriques de puits de stockage de déchets nucléaires.

En utilisant une approche phénoménologique, une modélisation THCM théorique a été effectuée pour les sols non saturés. Les phases sont : le squelette solide, le gaz, le constituant chimique, l'eau sous forme liquide et vapeur. Les phénomènes de sorption, de pression osmotique et d'efficacité osmotique, de consolidation chimique et osmotique ont été envisagées. Cette modélisation est entièrement couplée dans laquelle toutes les inconnues du système sont obtenues simultanément. Le modèle a été intégré dans le code aux éléments finis θ -STOCK.

En dernier chapitre du mémoire, la validation, la vérification et l'application du code de calcul aux éléments finis θ -STOCK à travers des différents exemples analytiques, expérimentaux et numériques ont été étudiés. Les exemples portent sur le transfert d'éléments

chimiques dans les sols non saturés et ses interactions avec le sol ; ils mettent en évidence couplages entre les différentes composantes thermiques, hydriques, mécaniques et chimiques. A travers ces exemples, le bon fonctionnement du modèle THCM proposé ainsi que leurs développements effectués dans le code de calcul aux éléments finis θ -STOCK ont été mis en évidence.

Plusieurs perspectives peuvent être envisagées pour continuer ce travail. Il reste à effectuer un important travail expérimental pour tenter de valider les différentes hypothèses que nous avons introduites et qui ont permis de simplifier le modèle, en réduisant les besoins d'identification de paramètres. Il convient de noter qu'à ce sujet, les informations fournies par la littérature sont encore limitées.

Il y a aussi des développements théoriques et numériques à faire. Une modélisation plus approfondie prenant en compte les phénomènes intervenant en présence de plusieurs constituants chimiques peut être envisagée avec des modèles plus élaborés que ceux, volontairement simplifiés, qui ont été adoptés ici. On peut en plus ajouter une autre phase fluide immiscible comme l'huile. Il paraîtrait également très intéressant d'approfondir les modèles de comportement en prenant en compte l'anisotropie et l'hystérésis hydraulique. Enfin l'intégration dans le code d'autres types d'éléments et le passage de deux dimensions à trois dimensions dans le code seront très utiles.

CHAPITRE SEPT: REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Aboustit, B.L., Advani S.H., Lee J. K. et Sandhu, R.S. 1982, finite element evaluation of thermoelastic consolidation. *Issues on rock mechanics, 23 rd., sym. On rock mechanics(ASME)*. Etats-units, pp. 587-595.

Abriola, L. M., 1985. A multiphase approach to the modeling of porous media contamination by organic compounds, 1. Equation development. *Water resource res.*, 21(1), pp.11-18.

Abriola, L. M., 1988. Multiphase flow and transport models for organic chemicals: A review and assessment. *Technical report EPRI EA-5976, Electric power research institute, Palo Alto, CA*.

Adenekan, A. E., Patzek, T. W. & Pruess, K. 1993, Modeling of multiphase transport of multicomponent organic contaminants and heat in the subsurface: Numerical model formulation. *Water Resour. Res.*, 29, 3727- 40.

Albarède, F., 1995. *Introduction to geochemical modeling*. Cambridge university press.

Alonso, E.E., Batlle, F., Gens, A., et Lloret, A., 1988. & Lloret, A. (1988). Consolidation analysis of partially saturated soils: application to earthdam construction. Proc. Of the 6th int. Conf. On Numer. Methods in Geomec., Innsbruck, Autriche. pp. 1303-1308.

Alonso, E.E., Gens, A., Josa, A.A., 1990. A constitutive model for partly saturated soil. *Géotechnique* 40 (3), 405– 430.

Appelo, C., Postma, D. 1993. *Geochemistry, groundwater and pollution*. Balkema. 479 p.

Aziz, K. & Settari, A., 1979. Petroleum reservoir simulation. *Applied science publ., Ltd., London*.

Baehr, A. L. & Corapcioglu, M. Y. 1987, A compositional multiphase model for groundwater contamination by petroleum products, 2. Numerical solution. *Water Resour. Res.*, 23(1), 201-13.

Baldi G., Hueckel T. & Pellegrini R. 1988. Thermal volume changes of the mineral – water system in low – porosity clay soils. *Canadian Geotechnical Journal*. 25 : 807-825.

- Baden L. 1965.** Consolidation of compacted and unsaturated clays. *Géotechnique*. 15(3), 267-286.
- Baldi G., Hueckel T. et Pellegrini R. 1988.** Thermal volume change of mineral-water system in low-porosity clay soils. *Canadian Geotechnical Journal*. 25:807-825.
- Barbour S.L., et Fredlund D.G. 1989.** Mechanisme of osmotic flow and volume change in clay soils. *Canadian Geotechnical Journal*. 26 : 551-562.
- Bathe K.J. 1982.** Finite element procedures in engineering analysis. *Nez Jersey, Etats-unis : Printice hall, Inc.*
- Batu, V. 1989.** A generalized two-dimensional analytical solution for hydrodynamic dispersion in bounded media with the first-type boundary condition at the source. *Water Resources Research*, 25, 1125-1132.
- Batu, V. 1993.** A generalized two-dimensional analytical solute transport model in bounded media for flux-type finite multiple sources. *Water Resources Research*, 29, 2881-2892.
- Bear J. 1972.** *Dynamics of fluids in porous media. Elsevier Scientific publishing company. 744 pp.*
- Bear J. 1979.** *Hydraulics of groundwater McGraw-Hill, New York. 210 pp.*
- Bear J. et Verruijt A. 1987.** *Modeling groundwater flow and pollution. Kluwer academic publishers group.*
- Bear J. et Bachmat Y. 1991.** *Introduction to modeling of transport phenomena in porous media. Kluwer academic publishers group.*
- Bejan, A. 1997.** *Advanced engineering thermodynamics. Second edition Hydraulics of groundwater . New York: John Wiley & Sons.850 pp.*
- Bennethum L.S. et Cushman J.H. 1996.** Multiscale, hybrid mixture theory for swelling systems—I, II. *Int. J. Eng. Sci.* 34, No. 2, pp. 147-169.
- Bhuyan D., Lake L.W., Pope G.A. 1990.** Mathematical modeling of high-pH chemical flooding. *SPE Reservoir Engng*, 5, 213-20.
- Biot M. A. 1941.** General theory of three-dimensional consolidation, *J. Appl. Phys.*, 12, pp. 155-164,
- Biot M. A. 1956.** Thermo elasticity and irreversible thermodynamics, *J. Appl. Phys.*, 27, pp. 240-353.
- Biot M.A. 1972.** Theory of finite deformations of porous solids, *Indiana Univ. Math. Jour.* 21(7), 597-620.
- Biot M.A., 1973.** Nonlinear and semilinear rheology of porous solids, *Journal of Geophysical Research*, 78(23), pp.4924-4937.

Bishop A.W. 1959. The principle of effective stress. *Teknisk Ukeblad I Samarbeide Med Teknikk*, Oslo, Norway, 106(39), 859–863.

Bishop A.W. et Blight G.E. 1963. Some aspects of effective stress in saturated and unsaturated soils. *Géotechnique*, 3 pp. 177-197.

Bjerg, P. L., Ammentrop, H. C. & Christensen, T. H. 1993. Model simulations of field experiment on cation exchange-affected multicomponent solute transport in a sandy aquifer. *Journal of Contaminant Hydrology*, **12** :291–311.

Bolt G. H. 1956. Physico-chemical analysis of the compressibility of pure clays. *Géotechnique*. 6: 86-93.

Bouazza A., Delage P. & Wojnarowicz M. 2005. Nature et reconnaissance de la pollution des sols. in *Géomécanique environnementale sols pollués et déchets*. Delage et Schrefler (Ed.) HERMES, Paris, France.

Bowen R.M. 1980. Incompressible porous media models by use of the theory of mixtures. *Int. J. Eng. Sci.* 18, pp. 1129-1148, 1980.

Bresler E. 1973. Anion exclusion and coupling effects in nonsteady transport through unsaturated soils: I. Theory. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.* 37:663–669.

BRGM 2000. *Gestion des sites (potentiellement) pollués*. BRGM(<http://www.fasp.info>).

BRGM 2001. Guide sur le comportement des polluants dans le sol et les nappes. BRGM(<http://www.fasp.info>).

Brooks, R. H. & Corey, A. T. 1964, Hydraulic properties of porous media. *Clorado State University Hydraulic Paper*, 3-27.

Brooks, R. H. & Corey, A. T. 1966, Properties of porous media affecting fluid flow. *Journal of the Irrigation and Drainage Division, Proceedings of the American Society of Civil Engineers*, IR2 61-88.

Brown, C.L., Pope, G. A., Abriola, L. M. & Sepehrnocri, K. 1994, Simulation of surfactant enhanced aquifer remediation. *Water Resour. Res.*, 30(11), 2959-77.

BSI DD 175, 1988. *Code of practice for the investigation of potentially contaminated land and its investigation. Draft for development*, British Standard institution.

Buckingham, E. 1907, Studies of the movement of soil moisture. *U.S.D.A. Bur. Of Soils Bulletin*, 38, 157-164.

Burnett, R.D., Frind, E.O. 1987, An alternating direction galerkin technique for simulation of groundwater contaminant transport in three dimensions, 2, dimensionality effects. *Water Resour. Res.*, 23(4), 695-705.

- Camilleri, D., Engelsen, S., Lake, L. W., Lin, E. C., Ohno, T., Pope G. & Sepehrnoori, K. 1987**, Description of an improved compositional micellar/polymer simulator. *SPE Reservoir Engineering*, November, 427-32.
- Carnahan, C.L. 1990**: Simulation of reactive chemical transport in a varying thermal field with reaction-flow coupling, In: *Proc. 1st Int. Top Meet. High Level Radioactive Waste Manage*, Las Vegas, ASCE, pp. 143–147.
- Cekerevac C. et Laloui L. 2004**, Experimental study of the thermal effects on the mechanical behaviour of a clay. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, Vol 28, pp 209-228.
- Chebbo G. 1992**, Solides des rejets pluviaux urbains caractérisation et traitabilité. *Thèse de doctorat : l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées*, 413 p + annexes.
- Childs E.C. et Collis-George N. 1948**, Soil geometry and soil water equilibria. *Faraday Society (Discussion)* 3,78-85.
- Charlier R., Radu J.P., 1997**. Hydro-mechanical coupling and strain localisation. Final Proc. NAFEMS World Congress. Glasgow, pp. 299-310.
- Chocat B. 1997**, Encyclopédie de l'hydrologie urbaine. *Paris: Tec et Doc Lavoisier*, 1136 p.
- Coats K. H. 1980**, An equation of state compositional model. *SPE J.*, October, 363-76.
- Cohen R. M. & Mercer, J. W. 1993**, DNAPL site evaluation. *Technical report EPA/600/SR-93/022, US EPA Robert S. Kerr Environment research laboratory, Ada, OK.*
- Coleman J.D., Charlier R.. 2005**. Unified approach of coupled constitutive laws. *Revue européenne de génie civil, Coupled multiphysics processes in geomechanics*. Ed.
- Collin F., Laloui L., Charlier R.. 2005**. Unified approach of coupled constitutive laws. *Revue européenne de génie civil, Coupled multiphysics processes in geomechanics*. Ed. Laloui L., Charlier R. Gilles P.C. *volume 9 n°5-6/2005*. 713-723.
- Collin F., Li X.L., Radu J.P., Charlier R. 2002**, Thermo-hydro-mechanical coupling in clay barriers. *Engineering geology*, 64 (2-3), 179-193
- Condom N. 2000**, Analyse et modélisation couplée des processus hydro-géochimiques de la salinisation des sols. Application aux sols rizicoles irrigués de l'Office du Niger (Mali). *Thèse de doctorat : L'Ecole nationale supérieure agronomique de Montpellier*, 189 p + annexes.
- Connell D.W., G.J. Miller. 1984**. *Chemistry and Ecotoxicology of Pollution*. John Wiley & Sons, NY.
- Corapcioglu M.Y., Baehr A.L. 1987**, A compositional multiphase model for groundwater contamination by petroleum products, 1. Theoretical considerations. *Water Resour. Res.*, 23(1), 191-200.

- Corey A.T. 1957**, Measurement of water and air permeability in unsaturated soil. *Soil Sci. Soc. Amer. Proc.* 21, 7-10
- Corey A.T. 1977**, *Mechanics of heterogeneous Fluids in Porous Media*. Water Resources Publications
- Corey A.T. 1994**, *Mechanics of Immiscible Fluids in Porous Media*. Water Resources Publications, Highlands Ranch, CO,
- Corey A.T., Rathjens, C.H., Henderson, J.H., Wylie R.M.J., 1956**, Three-phase relative permeability. *AIME*, 207, 349-51.
- Coussy O. 1956**, *Mechanics of porous continua*. Wiley London, 1995.
- Crichlow H.B. 1997**, Modern reservoir engineering -- A simulation approach., *Printice Hall, Englewood cliffs NJ*.
- Croney D. 1952**, The movement and distribution of water in soil. *Géotechnique* 3, 1-16.
- Croney D., et Coeman J.D., 1948**, Soil thermodynamics applied to movement of moisture in road foundation. *Proc of the 7th Int. Cong. For Applied Mechanics, Volume 3*, 163-177.
- Cui Y.J. 1993**, *Etude du comportement d'un limon compacté non saturé et de sa modélisation dans un cadre élasto-plastique*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, Paris, France
- Cui Y.J. et Delage P. 1996**, Yielding and plastic behaviour of an unsaturated compacted silt. *Géotechnique* 46(2), pp. 291-311.
- Cui Y.J., Delage P., Alzoghbi P. 1997**, Etude du comportement des loess sur le trace du TGV Nord. Rapport final. 85p.
- Cui Y.J., Loiseau C., Delage P. 2001**, Water transfer through heavily compacted swelling soil. *Proc. 6th Int. Worckshop on Key Issues in Waste Isolation Reasearch*, Paris, 43-60.
- Danesh, A., 1998**. PVT and phase behaviour of petroleum reservoir fluids. *Elsevier, Amesterdam* , 300 p + annexes
- Darcy, H., 1856**. *les fontaines publiques de la ville Dijon*. Paris, Dalmont.
- Davis, J.A., James, R.O., Leckie, J.O., 1978**. Surface ionization and complexation at the oxide/water interface. I. Computation of electrical double layer properties in simple electrolytes. *Journal of Colloid and Interface Science* 63, 480-499.
- Dechesne M. 2002**, Connaissance et modélisation du fonctionnement des bassins d'infiltration d'eaux de ruissellement urbain pour l'évaluation des performances technique et environnementale sur le long terme. *Thèse de doctorat : L'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon*, 274 p + annexes.
- Degueldre, C., H. R. Pfeiffer, W. Alexander, B. Wernli and R. Bruetsch. 1996**. Colloid properties in granitic groundwater systems. I : Sampling and characterisation. *Appl. Geochem.* 11: 677-695.

- De Josselin de Jong, G. 1958.** Longitudinal and transverse diffusion in granular deposits. *Transactions, American Geophysical Union*, 39, 1-67.
- Delage P. Alonso E.E. 1995.** *Unsaturated Soils*. Proceeding of the first international conference on Unsaturated Soils, Paris, Balkema/Presses des Ponts et Chaussées. ISBN : 2-85978-241-9
- Delage P. et Schrefler B. 2005,** *Géomécanique environnementale sols pollués et déchets*. HERMES, Paris, France.
- Delolme C., Hebrard-Labit C., Spadini L. Gaudet J.P. 2004,** Experimental study and modelling of the transfer of zinc in a low reactive sand column in the presence of acetate. *J. Contaminant Hydrology*, 70, 205-224.
- Delshad M., Pope, G. & Sepchrnoori K.1996,** A compositional simulator for modeling surfactant enhanced aquifer remediation. *J. Contaminant Hydrology*, 23, 303-27.
- De Marsily, G.1986,** *Quantitative Hydrogeology: Groundwater Hydrology for Engineers*. Academic Press, San Diego, CA.
- Destribats J.H., Prez E., Soyez B. 1994,** La dépollution des sols en places - Techniques et exemples. *Etudes et recherches du LCPC, Série Environnement et Génie Urbain*, n'EG10, 120p.
- De Vries D.A, 1950** Some remarks on heat transfer by vapour movement in soils, *Trans. of the 4th Int. Cong. On Soil Sci.* 73(2), 38-41
- De Vries D.A., 1958** Simultaneous transfer of heat and moisture in porous media., *Trans. Amer. Geophys. Uni.* 39(5), 909-916
- De Vries D.A., 1963** Thermal properties of soils. Dans *The physics of plant environment*, Van Wijk W.R. (ED), North-Holland, Amesterdam, pp. 382.
- Dhatt G. et Touzot G. 1981,** Une présentation de la méthode des éléments finis. *Paris, France, Maloine S.A.*
- Di Maio C. 1996.** Exposure of bentonites to salt solutions : osmotic and mechanical effects. *Geotechnique*. 46, 695-707
- Di Maio C. et Onorati R. 1999.** Prove di laboratorio: influenza di composizione del liquido di cella. In : *Rendiconti del XX Convegno Nazionale di Geotecnica*, Parma, pp. 87-94.
- Domenico, P. A., et G. A. Robbins, 1985.** A new method of contaminant plume analysis. *Ground Water*, 23, 476-485.
- Doughty, C. et Pruess, K., 1988,** A semianalytical solution for heat pipe effects near high level nuclear waste packages buried in partially saturated geological media, *Int. Journal of Heat and Mass Transfer*, 31, 1, 79-90.

- Dzombak, D.A., Morel F.M.M, 1990**, La Surface complexation modeling : Hydrous ferric oxide., Wiley, New York , 393 pp.
- EDF 2000a**, Comportement THM des ouvrages souterrains sur le site de l'Est: Définition des Données du cas test. IH-AVCY-38-001-A, mai 2000.
- EDF 2000b**, Modélisation axisymétrique unidimensionnelle d'une tranche de sol (bi-matériau représentant une barrière ouvragée et la barrière géologique) soumise à un chargement thermique : couplage thermo-hydro-mécanique. Sellali n., Chavant C. et Debruyne G., HI-74/00/017/A, novembre 2000.
- Edlefson N.E. et Andersen A.B.C. 1943**. Thermodynamics of soil moisture. *Hilgardia* 15, 31-298.
- Einstein, A. (1905)**. Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. *Ann. Phys.* 17 (549-560). English translation "On the motion of small particles suspended in liquids at rest required by the molecular-kinetic theory of heat" in the book '*Einstein's Miraculous Year*' by Princeton Univ. Press 1998
- Elrick, D.E., and Smiles, D.E., Baumgartner, N., and Groenvelt, P.H. 1976**. Coupling phenomena in saturated homo-ionic montmorillonite: I. experimental, *Soil Science Society of America Proceeding*, Vol. 40, pp. 490-491.
- Enfield, C.G. et Bledsoe B.E., 1975**. Fate of wastewater phosphorus in soil. Journal of Irrigation and Drainage Division, *American Society of Civil Engineering* 101, no. IR3:pp. 145-55.
- Ewen J. et Thomas H.R, 1989**. Heating unsaturated medium sand. *Géotechnique* 89(3), 455-470.
- Fabriol, R., Sauty, J. P. & Ouzounian, G. 1993**. Coupling geochemistry with a particle tracking transport model. *Journal of Contaminant Hydrology*, 13 :117–129.
- Falta, R. W., Pruess, K., Javandel, I. & Witherspoon, P. A. 1992**, Numerical modeling of steam injection for the removal of nonaqueous phase liquids from the subsurface, 1. Numerical formulation. *Water Resour. Res.* 28(2), 433-49.
- Falta, R. W., Pruess, K., Javandel, I. & Witherspoon, P. A. 1992**, Numerical modeling of steam injection for the removal of nonaqueous phase liquids from the subsurface, 2. Code validation and application. *Water Resour. Res.*, 28(2), 451-65.
- Farouki, O. T. 1986**, Thermal properties of soil. Allemagne, *Trans Tech Publications*.
- Farrar D.M., Coleman J.D. 1967**, The correlation of surface area with other properties of nineteen British clay soils, *Journal of Soil Science*, 18(1), pp. 118-124

Faust, C. R. 1985, Transport of immiscible fluids within and below the unsaturated zone: A numerical model. *Water Resour. Res.*, 21(4), 587-96

Faust, C. R., Guswa, J. H. & Mercer, J. W. 1989, Simulation of three-dimensional flow of immiscible fluids within and below. The unsaturated zone. *Water Resour. Res.*, 25(12) 2449-64.

Feddes, R. A., Kabat, P., Van Bakel, P. J. T., Bronswijk, J. & Halbertsma, J. 1998. Effect of water content on solute transport in a porous medium containing reactive micro-aggregates. *Journal of Contaminant Hydrology*, 33 :211–230.

Fernandez F. et Quigley R.M. 1985. Hydraulic conductivity of natural clays permeated with simple liquid hydrocarbons, *Can. Geotech. J.* 22, 205–214.

Fernandez F. et Quigley R.M. 1988. Viscosity and dielectric constant controls on the hydraulic conductivity of clayey Soils permeated with water-soluble organics, *Can. Geotech. J.* 25, 582–589.

Fetter C.W. 1977, Attension of waste water elutriated through glacial outwash.. *Ground Water*, 15, no, 5, pp. 365-71.

Fesch, C., Lehmann, P., Haderlein, S. B., Hinz, C., Schwarzenbach, R.P., Fluhler, H. 1998, Attension of waste water elutriated through glacial outwash.. *Ground Water*, 15, no, 5, pp. 365-71.

Fetter C.W. 1999, Contaminant Hydrogeology. *Prentice Hall, second edition, New Jersey*.

Fiskell, J. G. A., R.S. Mansell, H. M. Selim, and F.G. Martin 1979. Journal of Kinetic behavior of phosphate sorption by acid, sandy soil. *Environmental Quality* 8, pp. 579-84.

Forsyth, P. A. 1988, Simulation of nonaqueous phase ground- water contamination. *Adv. Water Resour.*, 11, 74- 83.

Fredlund D.G. 1979, Appropriate concepts and technology for unsaturated soils. *Canadian geotech. J.* 16, 121-139.

Fredlund D.G. et Morgenstern N.R., 1977, Stress state variables for unsaturated soils, *Journal of the Geotechnical Engineering Division, ASCE.* 103: 447-466.

Fredlund D.G. et Rahardjo H. 1993, Soil mechanics for unsaturated soils. New York: John Wiley & Sons.

Fried, J. J., 1975. *Groundwater Pollution*. Elsevier, Amsterdam.

Freeze, R.A., and J.A. Cherry. 1979. *Ground Water*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.

Gaines, G. L. & Thomas, H. C. 1953. Adsorption studies on clay minerals : II. A formulation of the thermodynamics of exchange adsorption. *J. Chem. Phys.*, 21 :714–718.

Gapon, E. 1933. On the theory of exchange adsorption in soils. *J.Gen.Chem. USSR (Eng. Translation)*, 3 :144–163.

- Gardner, W.R. 1958.** Some steady state solutions of the unsaturated moisture flow equation with application to evaporation from a water-table. *J. Soil Science*, 85(4) 228–232.
- Gatmiri, B. 1992.** Evolution de code U-DAM ; Description détaillée et mode d'emploi. *Technical Rapport CERMES, ENPC.*
- Gatmiri, B. 1997.** Analysis of fully coupled behavior of unsaturated porous media under stress, suction and temperature gradient. Technical report, CERMES, ENPC.
- Gatmiri, B. 1999.** Thermo-hydro-mécanique en milieux poreux saturé, modèles élastique non linéaire et élastoplastique du CERMES . *Rapport final pour CIH-EDF.*
- Gatmiri, B. 2000.** Thermo-hydro-mécanique des sols saturés et non saturés dans le Code_Aster. *Rapport final pour CIH-EDF.*
- Gatmiri, B., Delage P. 1995.** Nouvelle formulation de la surface d'état en indices des vides pour un modèle non linéaire élastique des sols non saturés. *Proc. 1st int. Conf. On saturated Soils*, vol. 2, p. 1049-1056, Paris, Balkema/Presses des Ponts et Chaussées.
- Gatmiri, B., Delage P. et Fry J.J. 1997.** Numerical aspects of thermoelastoplastic behaviour of saturated soil. Dans *NUMOG IV*, Montreal, Canada, pp. 323-334.
- Gatmiri, B. et Hemmati S. 2002.** Modélisation du comportement THM de la barrière ouvragée et de la barrière géologique par le Code_Aster, Milieu non saturé . *Rapport pour CIH-EDF, Mars 2002.*
- Gatmiri, B. et Ghasemzadeh H. 2003.** Modélisation axisymétrique unidimensionnelle d'un massif composé des barrières ouvragée et géologique, par le modèle THM non saturé de Gatmiri (CERMES) intégré dans le Code_Aster, *Report of CERMES-EDF, September 2003.*
- Gatmiri, B., Jenab-Vossoughi B, 1998.** On the effects of parameters in a non linear thermo-hydro-mecanical soil model. *Pros. of the 4th Euro. Conf. On Num. Meth. In Geotech. Eng.(NUMGE98)*, Cividini A. (Ed.) : Application of numerical methods to geotechnical problems. Italy, pp.293-302.
- Gatmiri, B., Jenab-Vossoughi B, et Delage P. (1999).** Validation of θ -STOCK, A finite element software for the analysis of thermo-hydro mechanical behaviour of engineering clay barriers, *Proc. Of the NAFEMS World Congress*, Volume 1, Newport, Rhode Island, Etats-Unis, pp. 645-656.
- Gatmiri, B., Seyedi M. 2001.** Modélisation du comportement THM de la barrière ouvragée et de la barrière géologique par le Code_Aster, Calculs de la fiche N38 . *Rapport final pour CIH-EDF.*
- Gawin, D., Baggio, P., Schrefler, B.A, 1995,** "Coupled heat, water and gas flow in deformable porous media", *Int.J. Num. Methods in Fluids*, 20, 969-987.

- Geiser, F., 1998**, *Comportement mécanique d'un limon non saturé*. Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Suisse.
- Gens A., Alonso E.E. et Delage P. 1997**. Computer modeling and applications in unsaturated soils. Dans Houston S.L. et Fredlund D.G. (Ed.). *Unsaturated soil engineering practice* 299-330, ASCE.
- Gens A., Garcia-Molina A.J., Olivella S., Alonso E.E. et Huertas F. 1998**. Analysis of full scale in situ test simulating repository conditions. *Int. j. Numer. Anal. Meth. Geomech.* 22, 515-548.
- Gens A., Guimaraes L. do N., Garcia-Molina A., Alonso E.E. 2002**. Factors controlling rock-clay buffer interaction in a radioactive waste repository. *Engineering Geology* 64 / 2-3, 297-308.
- Gens A., Olivella S., 2000**. Non isothermal multiphase flow in deformable porous media. Coupled formulation and application to nuclear waste disposal. *Dans development in theoretical geomechanics*, Smith & Carter 5Eds.), Balkema, Rotterdam, pp. 619-640.
- Gens A., Olivella S., 2001**. THM phenomena in saturated and unsaturated porous media. *Revue française de génie civil*, volume 5 n°6/2001. 694-717.
- Gens A., Leonardo N.G. et Olivella S., 2002**. Coupled chemomechanical analysis for saturated and unsaturated soils. In *Environmental geomechanics* ed. Vulliet L., Laloui L. and Schrefler B. Switzerland.
- Geraminezad, M. et Saxena S.K. 1986**. A coupled thermoelastic model for saturated-unsaturated porous media. *Géotechnique* 36(4), 539-550.
- Gérard, F., Clément, A. & Fritz, B. 1998**. Numerical validation of a eulerian hydrochemical code using a 1D multisolute mass transport system involving heterogeneous kinetically controlled reactions. *Journal of Contaminant Hydrology*, 30, 201-216.
- Greenberg J., Mitchell J., Witherspoon P. 1973**. Coupled salt and water flows in a groundwater basin. *J. of Geophysical Reserves.* 78, 6341-6353.
- Greenkorn R.A. et Kessler D.P. 1972**. Transfer Operations. *McGraw-Hill, New York*.
- Guarnaccia J.F. et Pinder G.F. 1992**, A new two-phase flow and transport model with interphase mass exchange. In *Mathematical Modeling in Water Resources*, eds T. F. Russell, R. E. Ewing, C. A. Brebbia, W. G. Gray & G. F. Pinder. *Volume 2*. Southampton, UK, pp. 281-8. Computational Mechanics Publications.
- Guarnaccia J.F., Pinder, G.F., Fishman M. 1997a**, Simulator documentation, Final report, EPA cooperative agreement No. CR-820499.

Guarnaccia J.F., Pinder, G.F., Fishman M. 1997b, NAPL: Simulator documentation, EPA, EPA/600/r-97/102.

Hassanizadeh M. et Gray W.G., 1979a. General conservation equations for multi-phase systems: 1. Averaging procedure. *Advances in Water Resources*, 2, pp. 131-144.

Hassanizadeh M. et Gray W.G., 1979b. General conservation equations for multi-phase systems: 2. Mass, momenta, energy and entropy equations. *Advances in Water Resources*, 2, pp. 191-208.

Hassanizadeh M. et Gray W.G., 1980. General conservation equations for multi-phase systems: 3. Constitutive theory for porous media flow. *Advances in Water Resources*, 3, pp. 25-40.

Hayes, K.F., Redden, G., Ela, W., Leckie, J.O., 1991. Surface complexation models: an evaluation of model parameter estimation using FITEQL and oxide mineral titration data. *Journal of Colloid and Interface Science* 142, 448–469.

Hébrard-Labit C. 1998, Influence du compartiment bactérien sur le transfert du zinc en milieu poreux non saturé – expériences et modélisation. *Thèse de doctorat: L'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon*, 292 p + annexes.

Hohl, H., Stumm, W., 1976. Interaction of Pb²⁺ with hydrous α -Al₂O₃. *Journal of Colloid and Interface Science* 55, 281–288.

Huang, C.P., Stumm, W., 1973. Specific adsorption of cations on hydrous α -Al₂O₃. *Journal of Colloid and Interface Science* 22, 231–259.

Hueckel T. 1997. Chemo-plasticity of clays subjected to stress and flow of a single contaminant. *Int. J. for Num. and anal. Meth. In geomechanics*. 21, 1997 p. 43-72.

Hueckel T. 2005. Chemo-mechanics of geomaterials, coupled constitutive laws. *Revue européenne de génie civil, Coupled multiphysics processes in geomechanics*. Ed. Laloui L., Charlier R. Gilles P.C. volume 9 n°5-6/2005. 689-711.

Hueckel T., et Peano, A., 1987, Some Geotechnical Aspects of Radioactive Waste Isolation in Continental Clays, *Computers and Geotechnics, an International Journal*, 3, 157-182.

Hueckel T., et Borsetto, M., 1990, Thermoplasticity of Saturated Soils and Shales: Constitutive Equations, *Journal of Geotechnical Engineering, ASCE*, 116(12) 1765-1777

Hunter, R. J. 1986. *Foundations of Colloid Science. Vols. 1 and 2*, Oxford University Press, London.

Hustson, L. & Wagner, R. J. 1992. Leachm: Leaching Estimation And Chemistry Model. New

York State College of Agriculture and Life Sciences, Cornell University. Department of Soil, Crop and Atmospheric Sciences, Rapport technique.

Huyakorn, P. S., Panday, S. & Wu, Y. S. 1994, A three- dimensional multiphase flow model for assessing NAPL contamination in porous and fractured media, 1. Formulation. *J. Contaminant Hydrology*, 16(2), 109-30.

IH/AVCY-38-001-A, Comportement THM des ouvrages souterrains sur le site de l'Est : Définition des données du cas test

Irmay S. 1954 *On the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Trans. Amer. Geophys. Uni.* 35, 463-468.

Jenab-Vossoughi B, 2000. Etude numérique de la modélisation thermo-élasto-plastiqu des sols non saturés. *Thèse de doctorat : l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées*, 253 p + annexes.

Jennings J.B. et Burland J.B., 1962. Limitations to the use of effective stresses in partly saturated soils. *Geotechnique* 12(2), 125 – 144.

Kaczmarek M. et Hueckel T. 1998, Chemo-mechanical consolidation of clay: analytical solutions for a linearized one dimensional problem. *Transport in Porous Media* 32, 49-74.

Kaczmarek M., Hueckel T., Chawlai V., Imperiali P. 1997, Transport through a clay barrier with the contaminant concentration dependent permeability. *Transport in Porous Media* 29, 159-178.

Kaluarachchi, J.J. et Parker, J.C. 1990, Modeling multi- component organic chemical transport in three-fluid- phase porous media. *J. Contaminant Hydrology*, 5(4), 349-74.

Kaplan I., Bertsch P.M. et Adriano D.C. 1997. Mineralogical and physicochemical differences between mobile and nonmobile colloidal phases in reconstructed pedons. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 61: 641-649.

Kaye, G.W.C et Laby, T.H. 1973, *Table of chemical and physical constants.* 14th edition Longman.

Keijzer T.J., Kleingeld P., Loch J. 1997, *Chemical osmosis in compacted clayey material and the prediction of water transport*, Thomas Telford, London, pp. 199–204.

Kennish, M.J. 1992. *Ecology of Estuaries: anthropogenic effects.* Marine Science Series, CRC Press: Boca Raton, USA.

Kemper, W.D., and Quirk, J.P. 1972. Ionic mobilities and electric charges of external clay surfaces inferred from potential differences and osmotic flow, *Soil Science Society of America Proceeding*, Vol. 36, pp. 426-433.

Kemper, W.D., and Rollins, J.B. 1966. Osmotic efficiency coefficients across compacted clays, *Soil Science Society of America Proceeding*, Vol. 30, No. 5, pp. 529-534.

- Kezdi A. 1974.** Soil Physics. *Elsevier scientific publishing company, New York.*
- Khan, S. A., Pope, G. A. & Trangenstein, J. A. 1996,** Micellar/polymer physical property models for contaminant cleanup problems and enhanced oil recovery. *Transport in Porous Media*, 24 , 35-74.
- Kondner. R.L. 1963,** Hyperbolic stress-strain design response: cohesive soils. *Journal of the Soil Mechanics and Foundation Division. (ASCE)*, 94(SM4), 981-1001.
- Kool, J. B. & Parker, J. C. 1987,** Development and evaluation of closed-form expressions for hysteretic soil hydraulic properties. *Water Resour. Res.*, 23(1), 105-14.
- Koretsky, C. 2000,** The significance of surface complexation reactions in hydrologic systems: a geochemist's perspective. *Journal of hydrology.* 230, 127-171.
- Kovacs G. 1981,** *Seepage hydraulics.* Amsterdam, Pays-Bas; Elsevier Science Publishers B.V.
- Kueper, B. H. & Frind, E. O. 1991,** Two-phase flow in heterogeneous porous media, 1. Model development. *Water Resour. Res.*, 27(6), 1049-57.
- Kueper, B. H. & Frind, E. O. 1991,** Two-phase flow in heterogeneous porous media, 2. Model application. *Water Resour. Res.*, 27(6), 1059-70.
- Kutílek, M., and D.R. Nielsen.1994,** Soil hydrology, *Catena Verlag, Cremlingen-Destedt, Germany*
- Lafolie, F. 1991.** Modelling water flow, nitrogen transport and root uptake including physical nonequilibrium and optimization of the root water potential. *Fertilizer research*, (27) :215–231.
- Laloui L. et Cekerevac C. 2003,** Thermo-plasticity of clays : An isotropic yield mechanism soils. *Computers and Geotechnics*, 30, 649-660.
- Langfelder L.J., Chen C.F. et Justice J.A. 1968,** Air permeability of compacted cohesive soils. *J. Soil Mech. Found. Eng. Div. (ASCE)* 94(SM4), 981-1001.
- Lematre J. et Chaboch J.L. 1985,** *Mécanique des matériauxsolides.* Paris, France: Dunod.
- Lemière. B., Seguin. J.J Le Guern. C., Guyonnet. D., Baranger. Ph. 2001,** Guide sur le comportement des polluants dans les sols et les nappes, Application dans un contexte d'évaluation détaillée des risques pour les ressources en eau. *BRGM 300, Orléans* 120p.
- Lenhard, R. J., Oostrom, M. & White, M. D. 1995,** Modeling fluid flow and transport in variably saturated porous media with the STOMP simulator. 2. Verification and validation exercises. *Adv. Water Resour.*, 18(6), 365-73.
- Lenhard, R. J. & Parker, J. C. 1987,** Measurement and prediction of saturation-pressure relationships in three- phase porous media systems. *J. Contaminant Hydrology*, 1, 407-24.

Lenhard, R. J. & Parker, J. C. 1988, Experimental validation of the theory of extending two-phase saturation-pressure relations to three fluid phase systems for monotonic drainage paths. *Water Resour. Res.*, 24(3) 373-80.

Letey, J., Kemper, W.D., and Noonan L. 1969. The effect of osmotic pressure gradient on water movement in unsaturated soil, *Soil Science Society of America Proceeding*, Vol. 33, pp. 15-18.

Lewis, R.W., Majorana, C.E. et Schrefler, B.A. 1986. A coupled finite element model for the consolidation of non-isothermal elastoplastic porous media. *Transport in Porous Media*, 1, pp. 155-178.

Lewis R. W., Schrefler B. A. 1998, The finite element methode in the static and dynamic deformation and consolidation of porous media. *John Wiley & Sons, second edition, Chichester*.

Lide, D.R. (ed.), 2003, 'CRC Handbook of chemistry and physics', 84th Edn., CRC Press, Boca Raton, Florida, USA, 2003-2004, pp. 2475.

Lloret A., Alonso E.E. 1980, Consolidation of unsaturated soils including swelling and collapse. *Géotechnique* 30(4), 449-477.

Lloret A., Alonso E.E. 1985, State surfaces for partially saturated soils. *Dans 11th I.C.S.M.F.E.*, p. 557-562.

Loret B., Hueckel T., Gajo A. 2002, Chemo-mechanical coupling in saturated porous media: elasto-plastic behaviour of homoionic expansive clays, *International Journal of Solids and Structures*, 39, 2773-2806

Luckner, L., van Genuchten, M. T. & Nielsen, D. R. 1989, A consistent set of parametric models for the two-phase flow of immiscible fluids in the subsurface. *Water Resour. Res.*, 25(10) 2187-93.

Luikov, A.V., 1966. *Heat and Mass Transfer in Capillary Porous Body*, Pergamon Press, Oxford.

Madé B., Clément A. & Fritz B. 1994. Modeling mineral/solution interactions : the thermodynamic and kinetic code KINDIS. *Computers and Geosciences*, 20(9) :1347–1363.

Marcial D., Delage P., Cui Y.J. 2002. On the high stress compression of bentonites. *Canadian Geotechnical Journal* 39, 1-9.

Marcial D., Delage P., Cui Y.J. 2002. Effects of exchangeable cations on the compressibility of bentonite clays. *Chemo-mechanical coupling in clays ; from nano scale to engineering applications*, Di Maio, Hueckel & Loret (eds). Balkema Publishers, pp 177-187.

Marlet S., Vallés V., Barberio L. 1996. Field study and simulation of geochemical mechanisms of soil alkalisation in the Sahelian zone of Niger. *Arid Soil Research and Rehabilitation*, **10** :243–256.

Marlet S., Vallés V., Lafolie F., Condom N. 1998. Hydrogéochemical modeling : a suitable approach to predict the effect of irrigation on soil salinity, sodicity and alkalinity. Dans *16th ISSS World Congress*.

Malusis M. et Shackelford C. 2002. Chemicoosmotic efficiency of a geosynthetic clay liner, *ASCE J. of Geotechnical and GeoEnvironmental Eng.* 128(2), 97–106.

Martin P.L., Barcala J.M., 2005. Large scale buffer material test : Mock-up experiment at CIEMAT, *Engineering Geology*, 81, 298-316.

Mathew P.K. & Rao S.N. 1997. Influence of cations on compressibility behavior of a marine clay. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*. Vol. 123, No 11, pp 1071-1073.

Mayer, A. S. & Miller, C. T. 1992, Simulating nonaqueous phase liquid dissolution in heteragencous porous media. In *Procoedings of Computationli Methods in Water Resources IX, VoL 2: Mathematical Modeling in Water Resources*, eds T. F. Russell, R. E. Ewing, C. A. Brebbia, W. G. Gray & G. F. Pinder. Southampton, UK, pp. 247-54. Computational Mechanics Publications.

Matyas E.L. 1967 Air and water permeability of compacted soils. *Permeability and capillary of soils of compacted soils ASTM STP 417 Amer. Soc. Testing and Materials 2*, pp. 160-175.

Matyas, E.L. & Radhakrishna, H.S., 1968. Volume Change Characteristics of Partially Saturated Soils, *Géotechnique*, Vol. 18(4), pp. 432-448.

Miller Cass T., George Christakos, Paul T. Imhoff, John F. McBride, Joseph A. Pedit, John A. Trangenstein, 1998 : Multiphase flow and transport modelling in heterogeneous porous media: challenges and approaches, *Advances in water resources* 21(2), pp. 77-120

Miller C.T., Weber Jr. 1984, Modeling organic contamination partitioning in ground-water systems. *Ground Water*, 22, no, 5, pp. 584-92.

Millington, R.J., et J.M. Quirk. 1961, Permeability of porous solid. *Trans. Faraday Soc.*, 57:1200-1207.

Milly P.C.D.. 1982, Moisture and heat transport in hysteretic, inhomogeneous porous media: A matric heat-based formulation and a numerical model. *Water Resource Res.* 148(3), 489-498

Mitchell, J.K 1993, Fundamentals of Soil Behavior. *W & S Eds. New York.* pp 473.

Manassero et dominijanni, 2003, Modelling the osmosis effect on solute migration through porous media. *Geotechnique*, 53(5), 481-492.

Munnus, D.N. and R.L. Fox 1976. the slow reactions that continue after phosphate adsorption: kinetics and equilibrium in tropical soils. *Soil Science Society of America Proceedings* 40:46-51

Murray E.J. 2002. An equation of state for unsaturated soils. *Can. J. Geotech.* 39, 125–140

Nielsen D.R. et Biggar Y.W. 1961. Measuring capillary conductivity. *J. Soil Sci.* 92, 192-193.

Ninham B.W. 1999. On progress in forces since the DLVO theory. *Advances in colloid and interface science, Elsevier.* 83 : 1-17.

Nordstrom, D. K., Plummer, L. N., Langmuir, Busenberg, D., May, E., Jones, B. F. & Parkhurst, D. L. 1990. Revised chemical equilibrium data for major water-mineral reactions and their limitations. *Chemical modelling of aqueous systems /Melchior, D. C. & Bassett, R. L. (réds.), tome II, p. 398–413.*

Nobuo T., Mitsuhiro I., Feike J. L. 2003. Hydrodynamic dispersion in an unsaturated dune sand. *Soil Science Society of America Journal* 67:703-712

Nova R., Castellanza R., Tamagnini C. 2003. A constitutive model for bonded geomaterials subjected to mechanical and/or chemical degradation. *Int. J. Num. Anal. Meth. Geomech.*, vol. 27(9), 2003, P. 705-732.

Nova R., Parma M. 2005. An instructive chemo-mechanical model for bonded geomaterials. *Revue européenne de génie civil, Coupled multiphysics processes in geomechanics.* Ed. Laloui L., Charlier R. Gilles P.C. volume 9 n°5-6/2005. 671-688.

Neuman S.P. 1984. Adaptive Eulerian-Lagrangian finite element method for advection-dispersion, *J. Numer. Methods Eng.*, 20, 321-337.

Nützmann, G., Maciejewski, S., Joswing, K., 2002. Estimation of water saturation dependence of dispersion in unsaturated porous media: experiments and modelling analysis. *Advances in Water Resources*, 25. 565–576.

Ogata, A. & Banks, R. B. 1961, A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media. U.S. Geological Survey Professional. *Paper* 411-A.

Olsen H.W., 1969. Simultaneous fluxes of liquid and charge in saturated kaolinite, *Soil Science Society of America Proceeding*, Vol. 33, No. 3, pp. 338-344.

Onsager L. 1931, Reciprocal relations in irreversible process, I. *Phys. Rev.* 37, p.405-426, II. *Phys. Rev.*, 38, p.2265-2279

Parker J.C. et Lenhard R.J. 1987, A model for hysteretic constitutive relations governing multiphase flow 1, Saturation-pressure relations. *Water Resour. Res.*, 23(12) 2187-96.

- Parker J.C., Lenhard R.J., Kuppusamy T. 1987**, A parametric model for constitutive properties governing multiphase flow in porous media. *Water Resour. Res.*, 23(4) 618-324.
- Penman, H. L. 1940**. Gas and vapour movement in soil. *J Agric. Sci.* 30, 437-462
- Peters G.P., Smith W.D. 2004**. The influence of advective transport on coupled chemical and mechanical consolidation of clays. *Mechanics of materials*, 36 :467–486.
- Pfannkuch, H.O. 1963**, Contribution a l'étude des déplacements de fluides miscibles dans un milieu poreux. *Revue de l'institut Français du Pétrole*. 18, 215-70.
- Phannkuch H.O., 1963**, Contribution a l'étude déplacement de fluides miscibles dans un milieu poreux. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, No 2-18.
- Philip J.R., De Vries D.A., 1957** Moisture Movement in porous materials under temperature gradients, *Trans. Am. Geophys. Un.* 38, 222-232
- Pilgrim, D. H. and D. D. Huff. 1983**. Suspended sediment in rapid subsurface storm flow on a large field plot. *Earth Surf. Proc. Landforms* 8: 451-463.
- Plum R.L. et Esrigig M.I. 1969**. Some temperature effects on soil compressibility and pore water pressure. Dans *Effects of temperature and heat on engineering behaviour of soil, Special report 103, Highway research Board. P. 213-242.*
- Pollock, D.W., 1986**, Simulation of fluid flow and energy transport processes associated with high-level radioactive waste disposal in unsaturated alluvium, *Water Resources Research*, 22(5), p.p. 765-775
- Pope, G.A, & Nelson, R. C. 1978**, A chemical flooding compositional simulator. *Soc. PerroL Engrs J.*, October , 339-47.
- Preece, R.J. 1975**, The measurement and calculation of physical properties of cable bedding sand. Part 2: Specific thermal capacity, thermal conductivity and temperature ratio across 'air' filled pores. Technical Report Laboratory note RD/L/N/74, Central Electricity Generating Board, Londre, Royaume-Uni.
- Prickett T.A., Naymik T.G. et Lonquist C.G. 1981**. A Random Walk solute transport model for selected groundwater quality evaluations. *Bulletin Illinois State Water Survey*, 65.
- Prigogine I. 1968**, Introduction à la thermodynamique des processus irréversibles, *Trad. J. Chanu, Monographie Dunod, Paris*,
- Reeves, H.W. & Abriola, L. M. 1994**, An iterative compositional model for subsurface multiphase flow. *J. Contaminant Hydrology*, 15(4), 249-76.
- Review Panel 1965**, Engineering concepts of moisture equilibria and moisture changes in soils. *Moisture Equilibria and Moisture Changes in Soils Beneath*, Butterworth; Sidney, 7-21.

- Richards, B.G. et Chan C.Y. 1969**, Prediction of pore pressure in earth dams. *Proc. Of 7th ICSMF*. 355-362.
- Rice, J.R. et Cleary, M.P. 1976**. Some basic stress-diffusion solutions for fluid-saturated elastic porous media with compressible constituents. *Reviews of Geophysics and Space Physics*, 14, 227-241.
- Richards, L.A. 1931**, Capillary conduction of liquids through porous medium. *J. Physics I*, 318-333.
- Rollins, R.L., Spangler M.G., et Kirkham D., 1954**, movement of soil moisture under a thermal gradient. *Highw. Res. Bull.*, 33, 492-508.
- Saad, N., Pope, G. A. & Sepehrnoori, K. 1989**, Simulation of Big Muddy surfactant pilot. *SPE Reservoir Engng*, 4(1) , 24-34.
- Santamarina J. et Fam M. 1995**. Changes in dielectric permittivity and shear wave velocity during concentration diffusion. *Canadian Geotechnical Journal* 32, 647-659.
- Sauty, J.-P., 1980**. An analysis of hydrodispersive transfer in aquifers. *Water Resources Research*, 16, 145-158.
- Sauty, J. P., Bourg, A. C. M., Jean, P. & Richard, F. 1989**. Miss : a coupled model of water chemistry and hydrodispersive transports in aquifers. Dans *Groundwater Contamination : use of models in decision making* / Jousna, G. & al. (réds.), p. 395-405, Kluwer Academic Publishers.
- Scheidegger, A. E., 1961**. General theory of dispersion in porous media, *J. Geophys. Res.*, Vol. 66, pp. 3273-3278.
- Schiffman, R.L. 1971**, A thermoelastic theory of consolidation, Environmental and Geophysical heat transfer, *Heat transfer division(ASME)*, 1(4), 78-84
- Schneebeli, G. 1968**. *Computational inelasticity*. Eyrolles.
- Schrefler B.A. 1995**. F.E. in environmental engineering: coupled thermohydro-mechanical processes in porous media including pollutant transport. *Arch. Comput. Meth. Eng.* 2:1-54.
- Schrefler B.A. 2001**. Computer modelling in environmental geomechanics. *Computers and Structures*. 79, 2209-2223.
- Schrefler B.A. 2002**. Geomechanics and quantitative solutions: Application to environmental problems, *Environmental. geomechanics*, Ed. Vulliet, Laloui, Schrefler. 137-159.
- Schrefler B.A., Simoni L., Xikui Li., Zienkiewicz O.C. 1990**. Mechanics of partially saturated porous media. *Numerical Methods and Constitutive Modelling in Geomechanics* vol. 311, pp. 169-209.
- Simo, J.C, et Hughes T.J.R. 1998**. *Computational inelasticity*. Springer Verlag.

Simunek, J. & Suarez, D. L. 1994. Two dimensional transport model for variably saturated porous media with major ion chemistry. *Water Resources Research*, **30**(4) :1115–1133.

Sleep, B. E. & Sykes, J. F. 1989, Modeling the transport of volatile organics in variably saturated media. *Water Resour. Res.*, 25(1), 81-92.

Sleep, B. E. & Sykes, J. F. 1993, Compositional simulation of groundwater contamination by organic compounds, 1. Model development and verification. *Water Resour. Res.*, 29(6) , 1697-708.

Sleep, B. E. & Sykes, J. F. 1993, Compositional simulation of groundwater contamination by organic compounds, 2. Model applications. *Water Resour. Res.*, 29(6), 1709-18.

Sleep, B. E. 1995, A method of characteristics model for equation of state compositional simulation of organic compounds in groundwater. *J. Contaminant Hydrology*, 17(3), 189-212.

Sophocleous M. 1979. Analysis of water and heat flow in unsaturated-saturated porous media. *Water Resource Res.* 15(5), 1195-1206

Sposito G. 1984. The surface chemistry of soils. *Oxford Press, New York.*

Sposito, G. & Mattigod, S. V. 1979. *GEOCHEM : a computer program for calculating chemical equilibria in soil solutions and other natural water systems.* University of California. 210 p.

Sposito G. & Prost R. 1982. Structure of water adsorbed on smectites. *Chemical Reviews*, USA. 82: 552-573.

Sridharan A. & Jayadeva P. 1982. Double layer theory and compressibility of clays. *Géotechnique*.32: 133-144.

Steefel C.I. et Lasaga A. 1989. Evolution of dissolution patterns, In: D.C. Melchior and R.L. Basset (ed.), *Chemical Modeling in Aqueous Systems II, Amer. Chem. Soc. Symposiums, Ser.* 416, pp. 212–225.

Stone, H. L. 1970, Probability model for estimating three- phase relative permeability. *J. Petrol Technol.*, 22, 214-8.

Stumm, W., Huang, C.P., Jenkins, S.R., 1970. Specific chemical interactions affecting the stability of dispersed systems. *Croatica Chemica Acta* v. 42, pp. 223–244.

Sultan N. 1997, Etude du comportement thermo-mécanique de l'argile de Boom : Experiences et modélisation. *Thèse de doctorat : l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées*, 310 p.

Tang A.M. 2005, Effet de la température sur le comportement des barrières de confinement. *Thèse de doctorat : l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées*, 201 p.

Terzaghi, K., 1925, *Erdbaumechanik*, Franz Deuticke, Vienna

- Tessier D., 1990.** Organisation des matériaux argileux en relation avec leur comportement hydrique. Matériaux Argileux, Structure, Propriétés et Applications. Ed. A. Decarreau, Société Française de Minéralogie et Cristallographie. Paris, France. 1 : 387-445.
- Thomas H.R., Cleall P.J., 2001.** Pollutant transport and chemical effects. Dans Environmental Geomechanics, *Revue française de génie civil*, volume 5 n°6/2001. 743-775.
- Thomas H.R., Cleall P.J., Chandler N., Dixon D., Mitchell H.P. 2003.** Water infiltration into a large-scale in-situ experiment in an underground research laboratory. *Géotechnique*, 53(2), 207-224.
- Thomas H.R., He Y. 1995.** Analysis of coupled heat, moisture and air transfer in a deformable unsaturated soil. *Géotechnique*, 40(4) :677-689
- Thomas H.R., He Y. 1997.** A coupled heat-moisture transfer theory for deformable unsaturated soil and its algorithmic implementation. *Int. J. Numerical Methods. Eng.*, 40 : 3421-3441
- Thomas H.R., He Y. 1998.** An examination of the validation of a model of the hydro/thermo/mechanical behaviour of engineered clay barriers. *Int. J. Num. Anal. Meth. In Geotech. Eng.*, 22 : 49-71
- Thomas H.R., He Y., Ramesh A. Zhou Z., Villar M.V. et Cuveas J. 1994.** Heating unsaturated clay – An experimental and numerical investigation. *Proc. Of the Numer. Meth. In Geotech. Eng.*, 181-186.
- Thomas H.R., King S.D. 1992.** Coupled heat and mass transfer in unsaturated soil- A potential-based solution. *Int. J. Num. Anal. Meth. In Geotech. Eng.*, 16 : 757-773.
- Thomas H.R., Sanson M.R. 1995.** Fully coupled analysis of heat, moisture and air transfer in un saturated soil. *J. Eng. Mech. Div. ASCE.*, 121(3), 392-405.
- Thomas H.R., Yong R.N., and Hashm A.A. 1999.** Transport of lead in partially saturated soil. Proc. 2nd Int. BGS Conf. On Geoenvironmental Engineering, Thomas Telford, p 310-317
- Vallés, V. & Bourgeat, F. 1988.** Geochemical determination of the gypsum requirement of cultivated sodic soils. I. Development of the thermodynamic model GYPSOL simulating the irrigation water-soil chemical interaction. *Arid Soil Research and Rehabilitation*, 44(3) :157–163.
- Van Den Broek, J. B., Van Dam, J. C., Elbers, J. A., Feddes, R., Huygen, J., Kabat, P.& Wesseling, J. G. 1994.** SWAP 93, input instructions manual. Department of water resources.
- Van Geel, P. J. & Sykes, J. F. 1994,** Laboratory and model simulations of a LNAPL spill in a variably-saturated sand, 2. Comparison of laboratory and model results. *J. Contaminant Hydrology*, 17(1), 27-53.

- Van Genuchten M.Th. 1980**, A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 44 892-8.
- Van Genuchten M.Th. 1981**. Analytical solutions for chemical transport with simultaneous adsorption, zero-order production and first-order decay. *Journal of Hydrology*, 49, 213-233.
- van Genuchten M.Th. et Alves W.J. 1982**. Analytical solutions of the one-dimensional convective-dispersive solute transport equation. USDA ARS *Technical Bulletin Number 1661*. U.S. Salinity Laboratory, 4500 Glenwood Drive, Riverside, CA 92501.
- Van Genuchten M.Th, Wierenga P.J. 1976**, Mass transfer studies in sorbing porous media. I: Analytical solutions. *Soil Sci Soc Am J.*, 40. 473-80.
- Van't Hoff J. 1887**. Die Rolle des Osmotischen Druckes in der Analogie Zwischen L^osungen and Gasen, *Zeitschrift f^{ur} Physikalische Chemie* 1, 481–493. translated “The role of osmotic pressure in the analogy between solutions and gases”.
- Van Wijk, W.R. 1963**. Physics of plant environment. Amsterdam, Pays-Bas: North Holland Publishing Company.
- Vauclin M. 1994**. Modélisation du transport de solutés dans la zone non saturée du sol. *Revue des sciences de l'eau*, 7, 81–102.
- Villar M.V., Cuevas J., Fernandez A.M., Martin, P.L. 1993**. Effects of the interaction of heat and water flow in compacted bentonite. *Proceedings of International workshop thermomechanics of clays and clay barriers*, Bergamo : ISMES.
- Vohralik M. 2004**. Méthodes numériques pour des équations elliptiques et paraboliques non linéaires, Application à des problèmes d'écoulement en milieux poreux et fracturés. *Proc. Of the 29th Annual Conf. Eng. Group Geol. Soc Lond.*, 337–342
- Warfvinge, P. & Sverdrup, H. 1989**. Modeling limestone dissolution in soils. *Soil Science Society America Journal*, 53 :44–55.
- Wheeler, S. J. & Sivakumar, V., 1992**. Critical state concepts for unsaturated soils. *proc. Of the 7th conf. En expansive soils*, Dalas, etats-unis, pp. 167-172.
- Wheeler, S. J. & Sivakumar, V., 1995**. An elasto-plastic Critical State Framework for Unsaturated Soil. *Géotechnique*, vol. 45(1), 35 – 53.
- White, M. D., Oostrom, M. & Lenhard, R. J. 1995**, Modeling fluid Flow and transport in variably saturated porous media with the STOMP simulator. 1. Nonvolatile three phase model description. *Adv. Water Rejour.*, 18(6), 353-64.
- Winterkorn H. F., 1936**. *Studies on the surface behaviour of bentonites and clays. Soil Science.* 41 : 25-32.

Wilson J.L., et Miller P.G.. 1978. Two-dimensional plume in uniform ground-water flow. *ASCE Journal of the Hydraulics Division*, 104, 503–514.

Wolery T.J., Jacson J.K., Bourcier W.L., Burton C., Viani B.E., Knauss K.G. & Delany J.M. 1990. Current status of the eq 3/6 software package for geochemical modeling. Dans *Chemical Modeling of aqueous systems* / Melchior, D. C. & Bassett, R. L. (réds.), tome 416, p. 104–116, Assoc. Chem. Soc. Symp. Series.

Yates D.E., Levine S., Healy T.W., 1974. Site-binding model of the electrical double layer at the oxide/water interface. *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions I* 70, 1807–1818.

Yeh G. & Tripathi V.S. 1991. A model for simulating transport of reactive multispecies components: model development and demonstration. *Water Resources Research*, 27(12) :3075–3094.

Yoshimi Y. & Osterberg J.O. 1964, Compression of partially saturated cohesive soils. *J. Soil Mech. Found. Eng. Div. (ASCE) SM4*, 1-24.

Young L. C. & Stephenson R.E. 1983, A generalized compositional approach for reservoir simulation. *SPE J.* 727-42.

Yong R.N. & Mohamed A.M.O. 1992. A study of particle interaction energies in wetting of unsaturated expansive clays. *Canadian Geotechnical Journal*. 29: 1060-1070.

Zienkiewicz O.C. 1977. *The finite element method*. London, Royaume-Uni: McGraw-Hill.

Zienkiewicz O.C., Taylor R.L. 2000. *The Finite Element Method: Volume 1 The Basis*, 5th Edition, Butterworth-Heinemann.

Zienkiewicz O.C., Taylor R.L. 2000. *The Finite Element Method: Volume 2 Solid Mechanics*, 5th Edition, Butterworth-Heinemann.

Zienkiewicz O.C., Taylor R.L. 2000. *The finite element method: Volume 3 Fluid Dynamics*. 5th Edition, Butterworth-Heinemann.

Zienkiewicz O.C., Xie, Y.M., Schrefler B.A., Ledesma A. et Bicanic N., 1990, Static and dynamic behaviour of soils: a rational approach for quantitative solutions. II Semi-saturated problems, *Proc. R. Soc. London. A* 429, pp. 311-321

Zhan X.Y., Schrefler B.A., Simoni L. 1995. Finite Element simulation of multiphase flow, heat flow and solute transport in deformable porous media, *Proc. Int. Conf. Finite Elements in Fluids*, (M.Morandi Cecchi, K. Morgan, J. Periaux, B.A. Schrefler, O.C. Zienkiewicz, eds.) Dip. Matematica Pura e Applicata, University of Padua, part II, 1283-1290.

Zhang R., Huang k. et van Genuchten M.T. 1993. An efficient Eulerian-Lagrangian method for solving solute transport problems in steady and transient flow fields. *Water Res. Research.* 29 (12), 4131-4139.

Zheng C. et Bennett G.D. 1995. *Applied Contaminant Transport Modeling: Theory and Practice.* Van Nostrand Reinhold (now Wiley), New York, 440 pp.

Annexe A : Formulation théorique

Les différentes dérivées temporelles s'écrivent (correspond à §4.2.2, §4.3) :

- $\frac{\partial(n)}{\partial t}$:

En négligeant la déformation du squelette solide, par la définition, on obtient :

$$\frac{\partial(n)}{\partial t} = (1-n) \frac{\partial(\varepsilon_v)}{\partial t} \quad \text{Eq. 15}$$

- $\frac{\partial(S_r)}{\partial t}$:

S_r est une fonction de la contrainte, la succion, la température et la concentration chimique, donc sa variation temporelle est :

$$\frac{\partial(S_r)}{\partial t} = g_1 \frac{\partial(\sigma - p_g)}{\partial t} + g_2 \frac{\partial(p_g - p_w)}{\partial t} + g_3 \frac{\partial T}{\partial t} + g_4 \frac{\partial C}{\partial t} \quad \text{Eq. 16}$$

avec

$$g_1 = \frac{\partial(S_r)}{\partial(\sigma - p_g)}, \quad g_2 = \frac{\partial(S_r)}{\partial(p_g - p_w)}, \quad g_3 = \frac{\partial(S_r)}{\partial T}, \quad g_4 = \frac{\partial(S_r)}{\partial C} \quad \text{Eq. 17}$$

Et aussi la variation temporelle de la contrainte nette peut être calculée à partir de la relation contrainte-déformation (§4.7) :

$$\frac{\partial(\sigma - mP_g)}{\partial t} = D \frac{\partial e}{\partial t} - F \frac{\partial(P_g - P_w)}{\partial t} - C_T \frac{\partial T}{\partial t} - L_c \frac{\partial C}{\partial t} \quad \text{Eq. 18}$$

En remplaçant cette équation dans l'équation Eq. 16 on détermine la variation temporelle du degré de saturation comme :

$$\frac{\partial(S_r)}{\partial t} = g_1 D \frac{\partial e}{\partial t} + (g_1 F - g_2) \frac{\partial(P_w)}{\partial t} + (g_2 - g_1 F) \frac{\partial(P_g)}{\partial t} + (g_3 - g_1 C_T) \frac{\partial T}{\partial t} + (g_4 - g_1 L_c) \frac{\partial C}{\partial t} \quad \text{Eq. 19}$$

- $\frac{\partial p_w}{\partial t}$:

Pour les solutions diluées, on néglige l'effet de la concentration chimique sur la variation de la densité d'eau c'est pour quoi on envisage la température et la pression et on utilise la relation suivante :

$$\frac{\partial \rho_w}{\partial t} = \frac{\partial \rho_w}{\partial P_w} \frac{\partial P_w}{\partial t} + \frac{\partial \rho_w}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \beta_p \dot{P}_w + \beta_T \dot{T} \quad \text{Eq. 20}$$

- $\frac{\partial \rho_v}{\partial t}$:

ρ_v est fonction de la porosité, du degré de saturation et de la température donc pour les solutions diluées sa variation temporelle est :

$$\frac{\partial \rho_v}{\partial t} = \frac{\partial \rho_v}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial \rho_v}{\partial S_r} \frac{\partial S_r}{\partial t} + \frac{\partial \rho_v}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \quad \text{Eq. 21}$$

en considérant :

$$A_n = \frac{1}{S_r} \frac{\partial \rho_v}{\partial n} = \frac{1}{n} \frac{\partial \rho_v}{\partial S_r}, \quad A_{\rho_0} = \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \rho_0}{\partial T} \quad \text{Eq. 22}$$

la variation temporelle de ρ_v s'exprime par :

$$\frac{\partial \rho_v}{\partial t} = S_r A_n \frac{\partial n}{\partial t} + n A_n \frac{\partial S_r}{\partial t} + \rho_v A_{\rho_0} \frac{\partial T}{\partial t} \quad \text{Eq. 23}$$

dans laquelle il faut déterminer $\frac{\partial \rho_a}{\partial t}$.

On suppose que l'air, la vapeur et le mélange de ces gaz sont le gaz parfait donc, en utilisant la *loi des gaz parfait*, pour chacun de ces gaz on a :

$$\rho_f = P_f / (R_f T), \quad \text{Eq. 24}$$

avec :

$$R_f = R / (M_f), \quad \text{Eq. 25}$$

où l'indice f peut être substitué par l'air(a), la vapeur(v) ou le gaz mélange de ces gaz(g), ρ_f est le poids spécifique du gaz, M_f est la masse molaire du gaz, T est la température, R_f est la constante individuelle du gaz, R est la constante universelle des gaz et P_f est la pression partielle de chaque gaz. Les pressions partielles d'un mélange de gaz peuvent être reliées par la *loi de Dalton* :

$$P_g = P_a + P_v \quad \text{Eq. 26}$$

En remplaçant les pressions partielles par l'équation Eq. 24 dans cette équation, on trouve le poids spécifique de l'air :

$$\rho_a = \frac{P_g}{R_a T} - \frac{R_v}{R_a} \rho_v \quad \text{Eq. 27}$$

et la dérivée temporelle de cette équation est :

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} = \alpha_p \frac{\partial P_g}{\partial t} - \alpha_T \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{R_v}{R_a} \frac{\partial \rho_v}{\partial t} \quad \text{Eq. 28}$$

avec :

$$\alpha_p = \frac{1}{R_a T} \quad \text{et} \quad \alpha_T = -\frac{P_g}{R_a T^2} \quad \text{Eq. 29}$$

$\frac{\partial \rho_v}{\partial t}$ peut être substitué par l'équation Eq. 23 donc :

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} = \alpha_p \frac{\partial P_g}{\partial t} - \alpha_T \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{R_v}{R_a} (S_r A_n \frac{\partial n}{\partial t} + n A_n \frac{\partial S_r}{\partial t} + \rho_v A_{\rho_0} \frac{\partial T}{\partial t}) \quad \text{Eq. 30}$$

En remplaçant les équations Eq. 15, Eq. 19 dans cette équation, on trouve:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_a}{\partial t} = & (\alpha_p + \frac{R_v}{R_a} n A_n (g_2 - g_1 F)) \frac{\partial P_g}{\partial t} - (\alpha_T + \frac{R_v}{R_a} (\rho_v A_{\rho_0} + n A_n (g_3 - g_1 C_T))) \frac{\partial T}{\partial t} \\ & - \frac{R_v}{R_a} S_r A_n (1-n) \frac{\partial \varepsilon_v}{\partial t} + \frac{R_v}{R_a} n A_n (g_1 D \frac{\partial e}{\partial t} + (g_1 F - g_2) \frac{\partial (P_w)}{\partial t} + (g_4 - g_1 L_c) \frac{\partial C}{\partial t}) \end{aligned} \quad \text{Eq. 31}$$

La constituante chimique (correspond à §4.4.2) :

L'équation de conservation de la masse de soluté s'écrit :

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = -\text{div}(q_{\text{tot}}) - \frac{\partial(\rho_b C_s)}{\partial t} - \lambda_1 \theta C - \lambda_2 \rho_s C_s \quad \text{Eq. 32}$$

Le terme gauche peut être développé comme :

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = \frac{\partial(n S_r C)}{\partial t} = n S_r \frac{\partial(C)}{\partial t} + S_r C \frac{\partial(n)}{\partial t} + n C \frac{\partial(S_r)}{\partial t} \quad \text{Eq. 33}$$

et le terme $\frac{\partial(\rho_b C_s)}{\partial t}$ peut être développé comme :

$$\frac{\partial(\rho_b C_s)}{\partial t} = \rho_b \frac{\partial(C_s)}{\partial t} + C_s \frac{\partial(\rho_b)}{\partial t} \quad \text{Eq. 34}$$

en considérant :

$$\rho_b = (1-n) \rho_s \quad \text{Eq. 35}$$

le terme $\frac{\partial(\rho_b C_s)}{\partial t}$ peut être réécrit comme:

$$\frac{\partial(\rho_b C_s)}{\partial t} = \rho_b \frac{\partial(C_s)}{\partial(C)} \frac{\partial(C)}{\partial t} - \rho_s C_s \frac{\partial(n)}{\partial t} \quad \text{Eq. 36}$$

en remplaçant l'équation Eq. 15 dans celle -ci, on obtient :

$$\frac{\partial(\rho_b C_s)}{\partial t} = \theta(R_{re} - 1) \frac{\partial(C)}{\partial t} - \rho_s C_s (1-n) \frac{\partial(\varepsilon_v)}{\partial t} \quad \text{Eq. 37}$$

où R_{re} est le facteur de retard :

$$R_{re} = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial C_s}{\partial C} \quad \text{Eq. 38}$$

On note que le facteur de retard, R_{re} , peut être déterminé facilement pour les différents modèles d'adsorption. On substitue l'équation Eq. 37 et l'équation Eq. 33 dans l'équation Eq. 0-35 qui nous fournit donc :

$$\begin{aligned} \theta R_{re} \frac{\partial(C)}{\partial t} + S_r C \frac{\partial(n)}{\partial t} + n C \frac{\partial(S_r)}{\partial t} = \\ \text{div}(\mathbf{q}_{\text{tot}}) - \rho_s C_s (1-n) \frac{\partial(\varepsilon_v)}{\partial t} - \lambda_1 \theta C - \lambda_2 \rho_s C_s \end{aligned} \quad \text{Eq. 39}$$

La résumé de formulation théorique (correspond à §4.8.1) :

➤ Le squelette solide :

$$\text{div}(\mathbf{D} \mathbf{d} \mathbf{e} - \mathbf{F} \mathbf{d}(\mathbf{P}_g - \mathbf{P}_w)) - C_T \mathbf{d}T - L_C \mathbf{d}C + \text{grad}(\mathbf{d}P_g) + \mathbf{b} = 0 \quad \text{sur } \mathbf{O} \times [0, \infty) \quad \text{Eq. 136}$$

Ω est le domaine de frontière Γ considéré

➤ L'humidité :

$$\begin{aligned} c_{wu} \dot{\varepsilon} + b_{f1} (1-n) \dot{\varepsilon}_v + c_{ww} \dot{P}_w + c_{wg} \dot{P}_g + c_{wT} \dot{T} + c_{ws} \dot{C} = \\ \text{div}(D_p \nabla P_w) + \text{div}(D_{p'} \nabla P_g) + \text{div}(D_w \nabla Z) + \text{div}(D_T \nabla T) + \text{div}(D_s \nabla C) \\ = -\text{div}(\rho_w \mathbf{U} + \rho_w \mathbf{V}) \quad \text{sur } \mathbf{O} \times [0, \infty) \end{aligned} \quad \text{Eq. 137}$$

avec

$$\begin{aligned}
c_{wu} &= b_{f2} Dg_1 \\
c_{ww} &= nS_r \beta_p + b_{f2} (Fg_1 - g_2) \\
c_{wg} &= b_{f2} (g_2 - Fg_1) \\
c_{wT} &= nS_r \beta_T + b_{f3} + b_{f2} (g_3 - C_T g_1) \\
c_{ws} &= b_{f2} (g_4 - L_c g_1) \\
b_{f1} &= \rho_w S_r + \rho_v (1 - S_r) + nS_r A_n (1 - S_r) \\
b_{f2} &= n(\rho_w - \rho_v) + n^2 A_n (1 - S_r) \\
b_{f3} &= n\rho_v A_{\rho_0} (1 - S_r)
\end{aligned} \tag{Eq. 42}$$

et

$$\begin{aligned}
D_p &= \rho_w (D_{pw} + D_{pv}) \\
D_{p'} &= -D_p \\
D_w &= K_w \\
D_T &= \rho_w (D_{Twc} + D_{Tv}) \\
D_s &= -\rho_w D_{cw}
\end{aligned} \tag{Eq. 43}$$

➤ L'air :

$$\begin{aligned}
c_{gu} \dot{\epsilon} + a_{f1} (1 - n) \dot{\epsilon}_v + c_{gw} \dot{P}_w + c_{gg} \dot{P}_g + c_{gT} \dot{T} + c_{gc} \dot{C} = \\
\text{div}(D_{2p} \nabla P_w) + \text{div}(D_{2p'} \nabla P_g) + \text{div}(D_{2w} \nabla Z) + \text{div}(D_{2T} \nabla T) + \text{div}(D_{2s} \nabla C) \\
= -\text{div}(\rho_a V_g + \rho_a HU) \quad \text{sur } O \times [0, \infty)
\end{aligned} \tag{Eq. 140}$$

avec

$$\begin{aligned}
c_{gu} &= a_{f2} Dg_1 \\
c_{gw} &= a_{f2} (Fg_1 - g_2) \\
c_{gg} &= a_{f2} (g_2 - Fg_1) + n(1 - S_r + HS_r) \\
c_{gT} &= a_{f3} + a_{f2} (g_3 - C_T g_1) \\
c_{gs} &= a_{f2} (g_4 - L_c g_1) \\
a_{f1} &= (1 - S_r + HS_r) (\rho_a - n \frac{R_v}{R_a} S_r A_n) \\
a_{f2} &= n\rho_a (H - 1) - n^2 A_n \frac{R_v}{R_a} (1 - S_r + HS_r) \\
a_{f3} &= n(1 - S_r + HS_r) (\alpha_r - \rho_v A_{\rho_0} \frac{R_v}{R_a})
\end{aligned} \tag{Eq. 45}$$

➤ La chaleur

$$\begin{aligned}
& c_{Tu} \dot{\varepsilon} + a_{T1}(1-n)\dot{\varepsilon}_v + c_{Tw} \dot{P}_w + c_{Tg} \dot{P}_g + c_{TT} \dot{T} + c_{Ts} \dot{C} = \\
& \text{div}(\lambda \text{grad}(T) - (C_{pw} \rho_w U + C_{pv} \rho_w V + C_{pv} \rho_v V_g + C_{pa} \rho_a V_g + C_{pc} M_c q_{tot})) \\
& (T - T_0) + h_{fg} (\rho_w V + \rho_v V_g) \quad \text{sur } O \times [0, \infty)
\end{aligned} \tag{Eq. 142}$$

avec

$$\begin{aligned}
c_{Tu} &= c_{f5} Dg_1 \\
c_{Tw} &= c_{f5} (Fg_1 - g_2) + c_{f7} \\
c_{Tg} &= c_{f5} (g_2 - Fg_1) + c_{f8} \\
c_{TT} &= c_{f5} (g_3 - C_T g_1) + c_{f6} \\
c_{Ts} &= c_{f5} (g_4 - L_c g_1) + c_{f9}
\end{aligned} \tag{Eq. 47}$$

et

$$\begin{aligned}
c_{f1} &= -\rho_s C_{ps} + S_r \rho_w C_{pw} + (1 - S_r) \rho_v C_{pv} + (1 - S_r) \rho_a C_{pa} + CS_r M_c C_{pc} + \\
& n(1 - S_r) C_{pv} S_r A_n - n S_r (1 - S_r) C_{pa} (R_v / R_a) A_n \\
c_{f2} &= n \rho_w C_{pw} - n \rho_v C_{pv} + n \rho_a C_{pa} + n C M_c C_{pc} + n^2 (1 - S_r) C_{pv} A_n - \\
& n^2 (1 - S_r) C_{pa} (R_v / R_a) A_n \\
c_{f3} &= \theta C_{pw} \beta_T + n(1 - S_r) \rho_v C_{pv} A_{\rho 0} + n(1 - S_r) C_{pa} (\alpha_T \dot{T} - (R_v / R_a) \rho_v A_{\rho 0}) \\
c_{f4} &= c_{f1} (T - T_0) + (1 - S_r) \rho_v h_{fg} + n(1 - S_r) h_{fg} S_r A_n \\
c_{f5} &= c_{f2} (T - T_0) + n^2 (1 - S_r) h_{fg} A_n - n \rho_v h_{fg} \\
c_{f6} &= c_{f3} (T - T_0) + C_{tot} n(1 - S_r) h_{fg} \rho_v h_{fg} A_{\rho 0} \\
c_{f7} &= \theta C_{pw} \beta_p (T - T_0) \\
c_{f8} &= n(1 - S_r) C_{pa} \alpha_p (T - T_0) \\
c_{f9} &= n S_r M_c C_{pc} (T - T_0)
\end{aligned} \tag{Eq. 48}$$

➤ La concentration chimique :

$$\begin{aligned}
& c_{su} \dot{\varepsilon} + (CS_r - C_s \rho_s)(1-n)\dot{\varepsilon}_v + c_{sw} \dot{P}_w + c_{sg} \dot{P}_g + c_{sT} \dot{T} + (c_{ss} + R_{re}) \dot{C} = \\
& \text{div}(D_{3p} \nabla P_w) + \text{div}(D_{3p'} \nabla P_g) + \text{div}(D_{3w} \nabla Z) + \text{div}(D_{3T} \nabla T) + \text{div}(D_{3c} \nabla C) \\
& - \lambda_1 \theta C - \lambda_2 \rho_s C_s \quad \text{sur } O \times [0, \infty)
\end{aligned} \tag{Eq. 145}$$

avec

$$\begin{aligned}
c_{su} &= nCDg_1 \\
c_{sw} &= nC(Fg_1 - g_2) \\
c_{sg} &= nC(g_2 - Fg_1) \\
c_{sT} &= nC(g_3 - C_T g_1) \\
c_{ss} &= nC(g_4 - L_c g_1) \\
R_{re} &= 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial C_s}{\partial C}
\end{aligned}
\tag{Eq. 50}$$

et

$$\begin{aligned}
D_{3P} &= CD_{Pw}(1 - \omega) \\
D_{3P'} &= -CD_{Pw}(1 - \omega) \\
D_{3w} &= CK_w(1 - \omega) \\
D_{3T} &= CD_{Twc}(1 - \omega) \\
D_{3c} &= (\theta D_{diff} - CD_{cw})(1 - \omega)
\end{aligned}
\tag{Eq. 51}$$

Annexe B : Forme matricielle

la forme matricielle semi discrétisée du problème thermo- hydro- chimio- mécanique est comme suit (correspond à §4.8.4) :

$$\begin{bmatrix} [R] & [C_w] & [C_g] & [C_T] & [C_s] \\ [C_{wu}] & [C_{ww}] & [C_{wg}] & [C_{wT}] & [C_{ws}] \\ [C_{gu}] & [C_{gw}] & [C_{gg}] & [C_{gT}] & [C_{gs}] \\ [C_{Tu}] & [C_{Tw}] & [C_{Tg}] & [C_{TT}] & [C_{Ts}] \\ [C_{su}] & [C_{sw}] & [C_{sg}] & [C_{sT}] & [C_{ss}] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \{\dot{u}\} \\ \dot{P}_w \\ \dot{P}_g \\ \dot{T} \\ \dot{C} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} [0] & [0] & [0] & [0] & [0] \\ [0] & [K_{ww}] & [K_{wg}] & [K_{wT}] & [K_{ws}] \\ [0] & [K_{gw}] & [K_{gg}] & [K_{gT}] & [K_{gs}] \\ [0] & [K_{Tw}] & [K_{Tg}] & [K_{TT}] & [K_{Ts}] \\ [0] & [K_{sw}] & [K_{sg}] & [K_{sT}] & [K_{ss}] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \{u\} \\ P_w \\ P_g \\ T \\ C \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \{F_\sigma\} \\ \{F_w\} \\ \{F_g\} \\ \{F_T\} \\ \{F_s\} \end{Bmatrix} \quad \text{Eq. 52}$$

avec les termes de couplage correspondant à la partie mécanique :

$$\begin{aligned} [R] &= \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} d\Omega \\ [C_w] &= \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{F} \mathbf{N} d\Omega \\ [C_g] &= \int_{\Omega} \mathbf{B}^T (\mathbf{m} - \mathbf{F}) \mathbf{N} d\Omega \\ [C_T] &= \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{C}_T \mathbf{N} d\Omega \\ [C_c] &= \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{L}_c \mathbf{N} d\Omega \\ \{F_\sigma\} &= \int_{\Gamma} \mathbf{N}^T \bar{\sigma} d\Gamma + \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \dot{b} d\Omega \end{aligned} \quad \text{Eq. 53}$$

les termes de couplage correspondant à l'eau :

$$\begin{aligned} [K_{ww}] &= \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N})^T \mathbf{D}_p (\nabla \mathbf{N}) d\Omega \\ [K_{wg}] &= \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N})^T \mathbf{D}_{p'} (\nabla \mathbf{N}) d\Omega \\ [K_{wT}] &= \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N})^T \mathbf{D}_T (\nabla \mathbf{N}) d\Omega \\ [K_{ws}] &= \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N})^T \mathbf{D}_c (\nabla \mathbf{N}) d\Omega \end{aligned} \quad \text{Eq. 54}$$

et

$$\begin{aligned}
[C_{wu}] &= \int_{\Omega} N^T (c_{wu} + b_{f1} (1-n) m^T) d\Omega \\
[C_{ww}] &= \int_{\Omega} N^T c_{ww} N d\Omega \\
[C_{wg}] &= \int_{\Omega} N^T c_{wg} N d\Omega \\
[C_{wT}] &= \int_{\Omega} N^T c_{wT} N d\Omega \\
[C_{ws}] &= \int_{\Omega} N^T c_{ws} N d\Omega \\
\{F_w\} &= - \int_{\Gamma} N^T (\bar{q}_w + \bar{q}_v) d\Gamma - \int_{\Omega} \nabla N^T (D_w) \nabla Z d\Omega
\end{aligned}
\tag{Eq. 55}$$

les termes de couplage correspondant à l'air :

$$\begin{aligned}
[K_{gw}] &= \int_{\Omega} (\nabla N)^T D_{2p} (\nabla N) d\Omega \\
[K_{gg}] &= \int_{\Omega} (\nabla N)^T D_{2p'} (\nabla N) d\Omega \\
[K_{gT}] &= \int_{\Omega} (\nabla N)^T D_{2T} (\nabla N) d\Omega \\
[K_{gs}] &= \int_{\Omega} (\nabla N)^T D_{2c} (\nabla N) d\Omega
\end{aligned}
\tag{Eq. 56}$$

et

$$\begin{aligned}
[C_{gu}] &= \int_{\Omega} N^T (c_{gu} + a_{f3} (1-n) m^T) d\Omega \\
[C_{gw}] &= \int_{\Omega} N^T c_{gw} N d\Omega \\
[C_{gg}] &= \int_{\Omega} N^T c_{gg} N d\Omega \\
[C_{gT}] &= \int_{\Omega} N^T c_{gT} N d\Omega \\
[C_{gs}] &= \int_{\Omega} N^T c_{gs} N d\Omega \\
\{F_g\} &= - \int_{\Gamma} N^T \bar{q}_a d\Gamma - \int_{\Omega} \nabla N^T (D_{2w}) \nabla Z d\Omega
\end{aligned}
\tag{Eq. 57}$$

les termes de couplage thermique s'expriment de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
[\mathbf{K}_{T_w}] &= \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N})^T [(T - T_0)(C_{pw} \rho_w D_{\rho_w} + C_{pv} \rho_w D_{\rho_v} \\
&+ C_{pc} M_c CD_{\rho_w}) + h_{fg} D_{\rho_v} \rho_w] (\nabla \mathbf{N}) d\Omega \\
[\mathbf{K}_{T_g}] &= \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N})^T [(T - T_0)(-C_{pw} \rho_w D_{\rho_w} - C_{pv} \rho_w D_{\rho_v} \\
&+ K_g (C_{pa} \rho_a + C_{pv} \rho_v) / \gamma_g - C_{pc} M_c CD_{\rho_w}) - h_{fg} D_{\rho_v} \rho_w + h_{fg} K_g / \gamma_g] (\nabla \mathbf{N}) d\Omega \\
[\mathbf{K}_{T_T}] &= \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N})^T [(T - T_0)(-C_{pw} \rho_w D_{T_{wc}} + C_{pv} \rho_w D_{T_v} - C_{pc} M_c CD_{T_{wc}}) \\
&- h_{fg} D_{T_v} \rho_w + \lambda] (\nabla \mathbf{N}) d\Omega \\
[\mathbf{K}_{T_s}] &= \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N})^T [(T - T_0)(-C_{pw} \rho_w D_{c_w} + C_{pc} M_c (CD_{c_w} + \theta D_{diff}))] (\nabla \mathbf{N}) d\Omega
\end{aligned} \tag{Eq. 58}$$

et :

$$\begin{aligned}
[\mathbf{C}_{T_u}] &= \int_{\Omega} \mathbf{N}^T (c_{T_u} + c_{f4} (1 - n) m^T) d\Omega \\
[\mathbf{C}_{T_w}] &= \int_{\Omega} \mathbf{N}^T c_{T_w} N d\Omega \\
[\mathbf{C}_{T_g}] &= \int_{\Omega} \mathbf{N}^T c_{T_g} N d\Omega \\
[\mathbf{C}_{T_T}] &= \int_{\Omega} \mathbf{N}^T c_{T_T} N d\Omega \\
[\mathbf{C}_{T_s}] &= \int_{\Omega} \mathbf{N}^T c_{T_s} N d\Omega \\
\{\mathbf{F}_T\} &= - \int_{\Gamma} \mathbf{N}^T \bar{q}_h d\Gamma - [(T - T_0)(C_{pw} \rho_w K_w + K_g (C_{pa} \rho_a + C_{pv} \rho_v) \\
&+ C_{pc} M_c CK_w) + h_{fg} \rho_v K_g] \nabla Z d\Omega
\end{aligned} \tag{Eq. 59}$$

les termes de couplage chimique s'expriment de la façon suivantes :

$$\begin{aligned}
[\mathbf{K}_{sw}] &= \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N})^T D_{3p} (\nabla \mathbf{N}) d\Omega \\
[\mathbf{K}_{sg}] &= \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N})^T D_{3p'} (\nabla \mathbf{N}) d\Omega \\
[\mathbf{K}_{sT}] &= \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N})^T D_{3T} (\nabla \mathbf{N}) d\Omega \\
[\mathbf{K}_{ss}] &= \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N})^T D_{3c} (\nabla \mathbf{N}) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \lambda_1 \theta N d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \lambda_2 \theta \rho_b K_{sorp} N d\Omega
\end{aligned} \tag{Eq. 60}$$

et :

$$\begin{aligned}
[C_{su}] &= \int_{\Omega} N^T (c_{su} - C_s \rho_s (1-n) m^T + CS_r (1-n)) d\Omega \\
[C_{sw}] &= \int_{\Omega} N^T c_{sw} N d\Omega \\
[C_{sg}] &= \int_{\Omega} N^T c_{sg} N d\Omega \\
[C_{sT}] &= \int_{\Omega} N^T c_{sT} N d\Omega \\
[C_{ss}] &= \int_{\Omega} N^T (R_{re} \theta + c_{ss}) N d\Omega \\
\{F_s\} &= \int_{\Gamma} N^T \bar{q}_{\partial c} d\Gamma - \int_{\Omega} \nabla N^T (CK_w) \nabla Z d\Omega
\end{aligned}$$

Eq. 61

Annexe C : Mode d'emploi du code "θ-STOCK"

(Ver. THCM 2006)

I. Données principales :

1- TITRE (I) (20A4)

Titre du problème traité

2- NNP, NE4D, NE4C, NE4U, NE4S

NNP : nombre total des nœuds.

NE4D : nombre des éléments drainés.

NE4C : nombre des éléments consolidés.

NE4U : nombre des éléments non saturés.

NE4S : nombre des éléments non saturés chimiques.

3- M4D, M4C, M4U (315)

M4D : nombre de couches d'éléments drainés.

M4C : nombre de couches d'éléments consolidés.

M4U : nombre de couches d'éléments non saturés.

M4S : nombre de couches d'éléments non saturés chimiques.

4- NLOAD, NTIME, ISOLVE, DTMEI, DTMEM, TETA, ICONEPS, IPLAS

NLOAD : nombre d'étape de chargement.

NTIME : nombre de pas de temps.

ISOLVE : indicateur du type de résolution (1: pour cas symétrique, 3: pour cas non symétrique).

DTMEI : pas de temps minimum.

DTMEM : pas de temps maximum.

TETA : constant d'intégration dans le temps.

ICONEPS : choix de loi de comportement

0 : avec le choix adéquat des autres paramètres, le cas élastique linéaire

1 : le nouveau Model avec la surface d'état

Note : pour ISOLVE = 3, TETA est supérieur à 0.5.

IPLAS : code pour la solution élasto-plastique

0 : avec le choix adéquat des autres paramètres, le cas élastique linéaire

1 : avec le choix adéquat des autres paramètres, le cas élasto-plastique

5- NBCX, NBCY, NBCT, NBCW, NBCA, NBCS

NBCX : nombre de conditions aux limites introduites pour la direction X.

NBCY : nombre de conditions aux limites introduites pour la pression Y.

NBCT : nombre de conditions aux limites introduites pour la température.

NBCW : nombre de conditions aux limites introduites pour la pression d'eau.

NBCA : nombre de conditions aux limites introduites pour la pression d'air.

NBCS : nombre de conditions aux limites introduites pour la concentration..

Note : Cas conditions aux limites présentent des valeurs nulles pour chaque variable. Elles resteront nulles pendant différentes étapes.

6- MTYP4D, MTYP4C, MTYP4U, MTYP4S

MTYP4D : indicateur pour les éléments drainés inactifs normalement (M4D + 1).

MTYP4C : indicateur pour les éléments consolidés inactifs normalement (M4C + 1).

MTYP4U : indicateur pour les éléments non saturés inactifs normalement (M4U + 1).

MTYP4S : indicateur pour les éléments non saturés inactifs normalement (M4S + 1).

7- INIT, INICAM, IRAW, IPRINT, ITERP

INIT : type des conditions initiales.

0: données à lire de la précédente analyse.

1: les contraintes normales sont calculées à partir du poids du sol.

2: les contraintes normales sont calculées en considérant les propriétés du sol au repos.

3 : pour matériau uniforme et surface horizontale uniquement (Si IRAW est différent des nombres indiqués, cas standard)

INICAM : initial stress code for les éléments consolidés.

IRAW : contrôle pour lecture et écriture sur disque.

0: lire et écrire sur le disque, 1: lire depuis le disque, -1: écrire sur le disque.

IPRINT : contrôle pour le fichier donné et le fichier sorti.

0 : données de maillage ne seront pas imprimées.

1 : données de maillage seront imprimées.

2 : données de maillage seront imprimées pour GID.

ITERP : nombre des pas de temps dans lesquelles on imprime les résultats.

8- (ITPR(I) = 1, ITERP)

ITPRI(I) : numéros des pas de temps dans lesquelles on imprime les résultats.

Note : dans le cas ITERP= NTIME cette ligne est supprimée.

9- GAMMAW, GAMMAS, GRAV, ATMP

GAMMAW : poids spécifique de l'eau.

GAMMAS : poids spécifique du solide.

GAMMAA : poids spécifique de l'air.

GAMMCS : poids spécifique du constituant chimique.

GRAV : g, accélération due à la pesanteur.

ATMP : pression atmosphérique (constante).

HENRY : coefficient de Henry

II. données de maillage

Si INIT = 0 et IRAW = 1 ou 0. Aller au 15

10 - (M, X(1, M), X(2, M), M = 1, NNP)

M : numéros des noeuds.

X(1, M) : coordonnée X.

X(2, M) : coordonnée Y.

11 - (M(IE4D(I, M), I = 1,5), M = 1, NE4D)

M : numéros des éléments drainés.

IE4D(1, M) - IE4D(4, M) : numéros des noeuds d'élément considéré.

IE4D(5, M) : numéros du type d'élément.

Si NE4D = 0, éliminer ces données

12 - (M,(IE4C(I, M), I = 1,5), M = 1, NE4C)

M : numéros des éléments consolidés.

IE4C(1, M) - IE4C(4, M) : numéros des noeuds d'éléments considérés.

IE4C(5, M) : numéro du type d'éléments.

Si NE4C = 0, éliminer ces données.

13 - (M,(IE4U(I, M), I = 1,5), M = 1, NE4U)

M : numéros des éléments non saturés.

IE4U(1, M) - IE4U(4, M) : numéros des noeuds d'élément considéré.

IE4U(5, M) : numéro du type d'élément.

Si NE4U = 0, éliminer ces données.

14 - (M,(IE4S(I, M), I = 1,5), M = 1, NE4S)

M : numéros des éléments non saturés chimique.

IE4S(1, M) - IE4S(4, M) : numéros des noeuds d'élément considéré.

IE4S(5, M) : numéro du type d'élément.

Si NE4S = 0, éliminer ces données.

III. caractéristiques des matériels

Données concernant les éléments drainés. Si NE4D = 0. Aller au 18.

15 - ((SM4D(J, I) J = 1,8), I = 1, M4D)

SM4D(1 + I) : angle de frottement (degré).

SM4D(2, I) : cohésion.

SM4D(3, I) : K_1 , module de chargement.

SM4D(4, I) : K_u , module de déchargement.

SM4D(5, I) : n

SM4D(6, I) : R_f

SM4D(7, I) : K_b , module de déformation volumique.

SM4D(8, I) : m.

16 - ((SM4D(J, I), J = 9, 16), I = 1, M4D)

SM4D(9, I) : valeur minimale de module.

SM4D(10, I) : k_0

SM4D(11, I) : poids spécifique du sol.

SM4D(12, I) : résistance à la traction.

SM4D(13, I) : conductivité thermique

SM4D(14, I) : coefficient de dilatation thermique du solide

SM4D(15, I) : chaleur spécifique du solide

SM4D(16, I) : indice des vides initial

17 - ((SM4D(J, I), J = 17-20), I = 1, M4D)

SM4D(17, I) : constante

SM4D(18, I) : constante

SM4D(19, I) : constante

SM4D(20, I) : constante

Données concernant les éléments consolidés :

Si NE4C = 0. Aller au 23.

18 - (SM4C(J, I), J = 1,8), I = 1, M4C)

Si Iplas = 0

SM4C(1, I) : angle de frottement (degré).

SM4C(2, I) : cohésion.

SM4C(3, I) : K_1 , module de chargement.

SM4C(4, I) : K_u , module de déchargement.

SM4C(5, I) : n

SM4C(6, I) : Rf

SM4C(7, I) : K_b , module de déformation volumique.

SM4C(8, I) : m.

19 - (SM4C(J, I), J = 9, 16), I = 1, M4C)

SM4C(9, I) : valeur minimale de module.

SM4C(10, I) : K_0

SM4C(11, I) : résistance à la traction.

SM4C(12, I) : perméabilité verticale.

SM4C(13, I) : K_x/K_z , le rapport d'anisotropie hydraulique

SM4C(14, I) : taux de sur consolidation (OCR)

SM4C(15, I) : compressibilité (si on donne 0 et SM4C(16, I) _ 0.999, 1 compressibilité sera calculée à partir d'équation de Bishop).

SM4C(16, I) : degré de saturation

20 - (SM4C(J,I), J = 17,24), 1,M4C)

SM4C(17, I) : coefficient de dilatation thermique du solide

SM4C(18, I) : coefficient de dilatation thermique du fluide

SM4C(19, I) : chaleur spécifique du solide

SM4C(20, I) : chaleur spécifique du fluide

SM4C(21, I) : Module de compressibilité volumique

SM4C(22, I) : Conductivité thermique du solide

SM4C(23, I) : Conductivité thermique du fluide

SM4C(24, I) : viscosité dynamique du fluide

21 - (SM4C(J, I), J = 25,32), I = 1, M4C)

SM4C(25, I) : compressibilité des grains du solide (1/ K_s)

SM4C(26, I) : indice des vides initial

SM4C(27, I) : α_0 , constante

SM4C(28, I) : α_1 , constante

SM4C(29, I) : α_2 , constante

SM4C(30, I) : α_3 , constante

SM4C(31, I) : m_1 , constante

SM4C(32, I) : m_2 , constante

22 - (SM4C(J, I), J = 33,33), I = 1, M4C)

SM4C(33, I) : m_3 , constante

Données concernant les éléments non saturés :

Si NE4U = 0. Aller au 29.

23 - (SM4U(J, I), J = 1,8), I = 1, M4U)

SM4U(1, I) : angle de frottement (degré).

SM4U(2, I) : cohésion.

SM4U(3, I) : K_1 , module de chargement.

SM4U(4, I) : K_u , module de déchargement.

SM4U(5, I) : n

SM4U(6, I) : Rf

SM4U(7, I) : K_b , module de déformation volumique.

SM4U(8, I) : m.

24 - (SM4U(J, I), J = 9, 14), I = 1, M4U)

SM4U(9, I) : K_0

SM4U(10, I) : résistance à la traction.

SM4U(11, I) : indice des vides minimale .

SM4U(12, I) : taux de sur consolidation (OCR)

SM4U(13, I) : température référence

SM4U(14, I) : degré de saturation

25 - (SM4U(J,I), J = 15,22), 1,M4U)

SM4U(15, I) : paramètre a de perméabilité à l'eau.

SM4U(16, I) : paramètre a_w de perméabilité à l'eau.

SM4U(17, I) : degré de saturation résiduelle.

SM4U(18, I) : coefficient de perméabilité au gaz.

SM4U(19, I) : coefficient c de perméabilité au gaz.

SM4U(20, I) : coefficient d de perméabilité au gaz.

SM4U(21, I) : viscosité du gaz.

SM4U(22, I) : perméabilité maximum à l'eau.

SM4U(23, I) : perméabilité maximum au gaz.

26 - (SM4U(J, I), J = 24,32), I = 1, M4U)

SM4U(24, I) : paramètre a_e de la surface d'état de l'indice des vides

SM4U(25, I) : paramètre b_e de la surface d'état de l'indice des vides

SM4U(26, I) : paramètre c_e de la surface d'état de l'indice des vides

SM4U(27, I) : paramètre d_e de la surface d'état de l'indice des vides (indice des vides initiale)

SM4U(28, I) : σ_e de la surface d'état de l'indice des vides

SM4U(29, I) : paramètre a_s de la surface d'état du e degré de saturation.

SM4U(20, I) : paramètre b_s de la surface d'état du e degré de saturation.

SM4U(31, I) : paramètre c_s de la surface d'état du e degré de saturation.

SM4U(32, I) : paramètre d_s de la surface d'état du e degré de saturation.

27 - (SM4U(J, I), J = 33,37), I = 1, M4U)

SM4U(33, I) : coefficient sucM.

SM4U(33, I) : coefficient succ.

SM4U(33, I) : coefficient sup1.

SM4U(33, I) : coefficient sup2.

SM4U(33, I) : coefficient tm1.

28 - (SM4U(J, I), J = 38,45), I = 1, M4U)

SM4U(38, I) : chaleur spécifique du solide

SM4U(39, I) : chaleur spécifique de l'eau

SM4U(40, I) : chaleur spécifique de la vapeur.

SM4U(41, I) : chaleur spécifique du gaz

SM4U(42, I) : conductivité thermique du solide

SM4U(43, I) : conductivité thermique de l'eau.

SM4U(44, I) : conductivité thermique du gaz.

SM4U(45, I) : chaleur latente d'évaporation.

Données concernant les éléments non saturés chimiques :

Si NE4S = 0. Aller au 41.

30 - (SM4S(J, I), J = 1,8), I = 1, M4S)

SM4S(1, I) : angle de frottement (degré).

SM4S(2, I) : cohésion.

SM4S(3, I) : K_1 , module de chargement.

SM4S(4, I) : K_u , module de déchargement.

SM4S(5, I) : n

SM4S(6, I) : R_f

SM4S(7, I) : K_b , module de déformation volumique.

SM4S(8, I) : m.

31 - (SM4S(J, I), J = 9, 14), I = 1, M4S)

SM4S(9, I) : K_0

SM4S(10, I) : résistance à la traction.

SM4S(11, I) : indice des vides minimale .

SM4S(12, I) : taux de sur consolidation (OCR)

SM4S(13, I) : température référence

SM4S(14, I) : degré de saturation

32 - (SM4S(J,I), J = 15,22), 1,M4S)

SM4S(15, I) : paramètre a de perméabilité à l'eau.

SM4S(16, I) : paramètre a_w de perméabilité à l'eau.

SM4S(17, I) : degré de saturation résiduelle.

SM4S(18, I) : coefficient de perméabilité au gaz.

SM4S(19, I) : coefficient c de perméabilité au gaz.

SM4S(20, I) : coefficient d de perméabilité au gaz.

SM4S(21, I) : viscosité du gaz.

SM4S(22, I) : perméabilité maximum à l'eau.

SM4S(23, I) : perméabilité maximum au gaz.

33 - (SM4S(J, I), J = 24,32), I = 1, M4S)

SM4S(24, I) : paramètre a_e de la surface d'état de l'indice des vides

SM4S(25, I) : paramètre b_e de la surface d'état de l'indice des vides

SM4S(26, I) : paramètre c_e de la surface d'état de l'indice des vides

SM4S(27, I) : paramètre d_e de la surface d'état de l'indice des vides (indice des vides
initiale

SM4S(28, I) : σ_e de la surface d'état de l'indice des vides

SM4S(29, I) : paramètre a_s de la surface d'état du e degré de saturation.

SM4S(20, I) : paramètre b_s de la surface d'état du e degré de saturation.

SM4S(31, I) : paramètre c_s de la surface d'état du e degré de saturation.

SM4S(32, I) : paramètre d_s de la surface d'état du e degré de saturation.

34 - (SM4S(J, I), J = 33,37), I = 1, M4S)

SM4S(33, I) : coefficient sucM.

SM4S(33, I) : coefficient succ.

SM4S(33, I) : coefficient sup1.

SM4S(33, I) : coefficient sup2.

SM4S(33, I) : coefficient tm1.

35 - (SM4S(J, I), J = 38,45), I = 1, M4S)

SM4S(38, I) : chaleur spécifique du solide

SM4S(39, I) : chaleur spécifique de l'eau

SM4S(40, I) : chaleur spécifique de la vapeur.

SM4S(41, I) : chaleur spécifique du gaz

SM4S(42, I) : conductivité thermique du solide

SM4S(43, I) : conductivité thermique de l'eau.

SM4S(44, I) : conductivité thermique du gaz.

SM4S(45, I) : chaleur latente d'évaporation.

36 - (SM4S(J, I), J = 46,54), I = 1, M4S)

SM4S(46, I) : paramètre α d'efficacité osmotique .

SM4S(47, I) : paramètre β d'efficacité osmotique .

SM4S(48, I) : paramètre γ d'efficacité osmotique .

SM4S(49, I) : paramètre α_L de tenseur de diffusion.

SM4S(50, I) : paramètre α_{Tv} de tenseur de diffusion.

SM4S(51, I) : paramètre D_0 de tenseur de diffusion.

SM4S(52, I) : K_d , le coefficient de distribution de soluté (m^3/kg).

SM4S(53, I) : λ_1 , le coefficient de décomposition de soluté soluble .

SM4S(54, I) : λ_2 , le coefficient de décomposition de soluté adsorbé .

37 - (SM4S(J, I), J = 55,58), I = 1, M4S)

SM4S(55, I) : ζ , coefficient de l'interaction soluté/déformation.

SM4S(56, I) : paramètre f_s de la surface d'état du e degré de saturation.

SM4S(57, I) : concentration chimique initiale.

SM4S(58, I) : chaleur spécifique du soluté.

Les autres données concernant les éléments non saturés chimiques sont :

38- imodsat, imoddif, ieffect, imodsorp

imodsat=0 : le cas non saturé et imodsat=1 : le cas saturé

imoddif=1 : D_0 constant, imoddif=2 : $D_0 = D_0 \frac{\theta^{10/3}}{n^2}$, imoddif=4 : $D_0 = D_0 \theta$,

imoddif=3 : $\alpha_L = \alpha_{Tv} = \alpha \theta^b$ et on ajoute la ligne suivante pour définir ces paramètres :

39- adisp, bdisp, cdisp

adisp= a , bdisp= b et si cdisp=2 D_0 est $D_0 = D_0 \frac{\theta^{10/3}}{n^2}$

imodsorp=0 : sans adsorption, imodsorp=1 : modèle linéaire isotherme, imodsorp=2 : modèle Freundlich, imodsorp=3 : modèle Langmuir, imodsorp=4 : modèle Lungmuir bilinéaire,

40- reaclogk,ph,eh,unthalpy,stoich1,stoich2

reaclogk : log(k) de réaction

ph : pH de système

eh : Eh de système

unthalpy : unthalpy de système

stoich1 : stœchiométrie coefficient 1

stoich2 : stœchiométrie coefficient 2

IV. conditions aux limites :

41 - (KODEX(I), I = 1, NBCX)

KODEX (I) : numéros des nœuds pour lesquels les déplacements horizontaux sont zéro.

42- (KODEY(I), 1, NBCY)

KODEY (I) : numéros des nœuds pour lesquels les déplacements verticaux sont zéro.

43 - (KODET(I), I = 1, NBCT)

KODET(I) : numéros des nœuds pour lesquels les températures sont zéro.

44 - (KODEW(I), I = 1, NBCW)

KODEW(I) : numéros des nœuds pour lesquels les pressions interstitielles sont zéro.

45 - (KODEA(I), I = 1, NBCA)

KODEA(I) : numéros des nœuds pour lesquels les pressions de l'air sont zéro.

46 - (KODES(I), I = 1, NBCS)

KODES(I) : numéros des nœuds pour lesquels les concentrations chimiques sont zéro.

Si les conditions aux limites d'une variable n'existent pas éliminer les données correspondantes.

47- (ICONST(1, I), J = 1,3), I = 1, NLOAD)

ICONST(1, I) : nombre de pas de temps dans lesquels la couche est chargée.

ICONST(2, I) : nombre de sous étapes de chaque étape de chargement.

ICONST(3, I) : nombre d'itération dans chaque sous étape.

V. données concernant les conditions initiales

48 - NP TI, NP WI, NP AI, NP AS

NP TI : nombre des nœuds avec une température initiale imposée.

NP WI : nombre des nœuds avec une pression d'eau initiale imposée.

NP AI : nombre des nœuds avec une pression d'air initiale imposée.

NP AS : nombre des nœuds avec une concentration chimique initiale imposée.

49 - NNPTI(I), I = 1, NP TI

NNPTI(I) : numéros des nœuds avec une température initiale.

50 - VNPTI(I), I = 1, NP TI

VNPTI(I), I : valeur initiale de la température pour les nœuds définis en 49.

51 - NNPWI(I), I = 1, NP WI

NNPWI(I) : numéros des nœuds avec une pression d'eau initiale.

52 - VNPWI(I), I = 1, NP WI

VNPWI(I), I : valeur initiale de la pression d'eau pour les nœuds définis en 51.

53 - NNPAI(I), I = 1, NP AI

NNPAI(I) : numéros des nœuds avec une pression d'air initiale.

54 - VNPAI(I), I = 1, NP AI

VNPAI(I) : valeur initiale de la pression d'air pour les nœuds définis en 53.

55 - NNPSI(I), I = 1, NP SI

NNPSI(I) : numéros des nœuds avec une concentration chimique initiale.

56 - VNPSI(I), I = 1, NP SI

VNPSI(I) : valeur initiale de la concentration chimique pour les nœuds définis en 55.

VI. données de chargement et des flux:

57 - NNZB, NNZTB, NNZWB, NNZAB, NNZSB, DTIME, XINC

NNZB : nombre de nœuds avec un déplacement nul.

NNZTB : nombre de nœuds avec une température temporairement nulle.

NNZWB : nombre de nœuds construits avec une pression d'eau temporairement nulle.

NNZAB : nombre de nœuds construits avec une pression d'air temporairement nulle.

NNZSB : nombre de nœuds construits avec une concentration temporairement nulle.

DTIME : pas de temps.

XINC : coefficient de la modification de pas de temps.

Note : pour les nœuds avec une pression temporairement nulle, il ne faut pas rentrer les nœuds déjà introduits dans les données concernant les conditions aux limites. Les nœuds désignés ici avec les valeurs nulles ne sont fixés que pour l'étape courante. 100 surfaces chargées (côté d'élément) et 100 surfaces avec un débit imposé peuvent être introduites à chaque étape du temps.

58 - NNLOAD, NNT, NNW, NNA, NNS.

NNLOAD : nombre de surfaces chargées.

NNT : nombre de surfaces pour lesquelles on introduit un débit de chaleur imposé.

NNW : nombre de surfaces pour lesquelles on introduit un débit d'eau imposé.

NNA : nombre de surfaces pour lesquelles on introduit un débit d'air imposé.

NNS : nombre de surfaces pour lesquelles on introduit un débit de concentration imposé.

Chaque surface est une côte d'un élément.

Si on n'impose pas les forces ou les débits, on donne zéro.

59 - NPT, NPW, NPA, NPS.

NPT : nombre de nœuds avec la température imposée.

NPW : nombre de nœuds avec la pression d'eau imposée.

NPA : nombre de nœuds avec la pression d'air imposée.

NPS : nombre de nœuds avec la concentration imposée.

60 - (NNNZB (I), I = 1, NNZB)

NNNZB(I) : numéros des nœuds avec un déplacement nul. Si NNZB = 0, éliminer 60.

61 - (NNNZTB(I), I = 1, NNZTB)

NNNZTB(I) : numéros des nœuds construits avec une température temporairement nulle.

Si NNZTB = 0, éliminer 61.

62 - (NNNZWB(I), I = 1, NNZWB)

NNNZWB(I) : numéros des nœuds construits avec une pression d'eau temporairement nulle. Si NNZWB = 0, éliminer 62.

63- (NNNZAB(I), I = 1, NNZAB)

NNZAB(I) : numéros des nœuds construits avec une pression d'air temporairement nulle.

Si NNZAB = 0, éliminer 63.

64 - (NNNZSB(I), I = 1, NNZSB)

NNZSB(I) : numéros des nœuds construits avec une concentration temporairement nulle.

Si NNZSB = 0, éliminer 64.

65 - NNPT(I), I = 1, NPT

NNPT (I) : numéros des nœuds avec une température imposée.

66 - VNPT(I), I = 1, NPT

VNPT(I) : valeur imposée de la température pour les nœuds définis en 65

Si NPT = 0, éliminer 65 et 66.

67 - NNPW (I), I = 1, NPW

NNPW(I) : numéros des nœuds avec une pression d'eau imposée.

68 - VNPW(I), I = 1, NPW

VNPW(I) : valeur imposée de la pression d'eau pour les nœuds définis en 67

Si NPW = 0, éliminer 67 et 68.

69 - NNPA(I), I = 1, NPA

NNPA(I) : numéros des nœuds avec une pression d'air imposée.

70 - VNPA(I), I = 1, NPA

VNPA(I) : valeur imposée de la pression d'air pour les nœuds définis en 69.

Si NPA = 0, éliminer 69 et 70.

71 - NNPS(I), I = 1, NPS

NNPS(I) : numéros des nœuds avec une concentration chimique imposée.

72 - VNPS(I), I = 1, NPS

VNPS(I) : valeur imposée de la concentration chimique pour les nœuds définis en 71.

Si NPS = 0, éliminer 71 et 72.

Si NNLOAD ≠ 0 NNLOAS fois

73 - N_1 , N_2 , F_x , F_y , F_y

N_1 : numéro de nœud 1.

N_2 : numéro de nœud 2.

F_x : valeur de la contrainte horizontale appliquée en N_1 .

F_x : valeur de la contrainte horizontale appliquée en N_1 .

F_y : valeur de contrainte verticale appliquée en N_2 .

F_y : valeur de la contrainte verticale appliquée en N_2 .

On peut introduire également une force appliquée uniquement sur un nœud(N_1).

Si NNT≠0 NNT fois :

74 - N , N , q_t

N_1 : numéro de nœud 1.

N_2 : numéro de nœud 2.

q_t : débit de chaleur.

Si NNW \neq 0 NNW fois :

75 - N_1, N_2, q_w

N_1 : numéro de nœud 1.

N_2 : numéro de nœud 2.

q_w : débit surfacique (eau).

Si NNA \neq 0 NNA fois :

76 - N_1, N_2, q_a

N_1 : numéro de nœud 1.

N_2 : numéro de nœud 2.

q_a : débit surfacique (air).

Si NNS \neq 0 NNS fois :

77 - N_1, N_2, q_s

N_1 : numéro de nœud 1.

N_2 : numéro de nœud 2.

q_s : débit surfacique (concentration chimique).

Annexe D: Lexique

- CAV ou BTEX** **hydrocarbures aromatiques volatils**
Famille de composés contenant un cycle benzénique C₆, sur lequel se branche une large variété de substituants. L'acronyme BTEX est formé des initiales des CAV les plus usuels : Benzène, Toluène, Ethyl-benzène, Xylène
- COV ou VOCs** **Non-Halogenated Volatile Organic Compounds**
Groupe hétérogène de composés organiques défini par les propriétés physiques (forte volatilité) et/ou le comportement hydrochimique (circulation sous la double forme liquide et vapeur dans la prosité du sol).
- DNAPL :** **Dense Non-Aqueous Phase Liquids**
Cet acronyme courant n'a pas d'équivalent français usuel. Il regroupe tous les composés organiques de densité supérieure à 1, se séparant de l'eau, et formant une phase distincte au fond des nappes phréatiques
- HAP ou PAH :** **Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques**
Groupe de composés comportement au moins deux noyaux benzéniques fusionnés entre eux et renfermant seulement des atomes d'hydrogène et de carbone. Ils sont difficilement biodégradables et très stables.
- LNAPL :** **Light Non--Aqueous Phase Liquids**
Cet acronyme regroupe tous les composés organiques de densité inférieure à 1, se séparant de l'eau, et formant une phase distincte en surface des nappes phréatiques.
- NAPL :** **Non--Aqueous Phase Liquids**
Contaminant liquide des organiques insolubles (dans l'eau) ou immiscible. Il regroupe donc tous les composés organiques se séparant de l'eau, et formant une phase distincte des nappes.
- Activité :** coefficient thermodynamique propre à une entité chimique.
- Adsorption:** accumulation de molécules ou d'ions à l'interface sol-eau.

Advection : transfert d'une solution à vitesse constante.

Aérobic: transformation chimique ou biologique se produisant uniquement en présence d'oxygène; se dit des micro-organismes qui ont besoin d'oxygène pour se développer.

Anaérobic : transformation chimique ou biologique se produisant en absence d'oxygène; se dit d'un milieu dans lequel il n'y a pas d'oxygène libre; s'applique aux micro-organismes qui peuvent se développer sans oxygène.

Biofilm: film composé de molécules organiques et de bactérie ; il se forme à l'interface solide-liquide.

Biosorption : terme regroupant l'accumulation intracellulaire et l'association à la membrane d'entités chimiques.

Capacité d'échange cationique (CEC) : quantité maximale de cations que peut adsorber un sol.

Colloïde - substance généralement gélatineuse ayant de très petites dimensions ; au contact de l'eau, les colloïdes s'agglomèrent. Les principaux colloïdes du sol sont l'argile, les composés humiques, la silice, les hydroxydes de fer et d'aluminium.

Colmatage : phénomène causé par l'accumulation de particules dans les pores du sol. Il modifie la porosité et la perméabilité du sol.

Complexation : formation d'entités chimiques (appelées complexes) possédant au moins une liaison de coordination.

Composés humiques - acides organiques présents dans les sols ; ils sont issus de la biodégradation de la matière organique par les bactéries.

Conductivité hydraulique : paramètre qui exprime la résistance du milieu poreux à l'écoulement de l'eau. Ce paramètre intervient dans la relation, appelée loi de Darcy, entre le débit spécifique et le gradient hydraulique qui provoque le mouvement.

Constituant : L'un quelconque des corps purs que contient un système en équilibre physico-chimique.

Convection : transfert d'une solution à vitesse constante.

Décantation : séparation des phases liquide et solide sous l'effet de la gravitation

Désintégration : réduction de l'activité d'une substance radioactive, par suite de l'émission continue de particules; la réduction est telle qu'une substance donnée perd la moitié de son pouvoir radioactif en un temps défini, qui est caractéristique de la substance et qu'on appelle « demi-vie » ou « période » de l'élément.

Désorption - réaction inverse de l'adsorption.

Dioxane: Liquide incolore, d'odeur agréable, très mobile. Dioxane est un composé organique de type éther cyclique utilisable comme solvant dans les domaines variés.

Dispersion: résultat de la diffusion moléculaire, due à l'agitation des molécules, et de la dispersion cinématique, due à l'hétérogénéité des vitesses d'écoulement dans le milieu poreux.

Dissolution : réaction inverse de la précipitation.

Fluides miscibles : liquides qui peuvent se mélanger avec homogénéité, par exemple l'alcool et l'eau, le gaz humide.

Immiscible : Propriété réciproque de deux corps tels que par exemple l'eau et l'huile qui fait qu'on ne peut pas les mélanger de façon homogène et stable.

Isotherme d'adsorption : relation empirique entre la fraction en phase liquide et la fraction en phase solide d'un composé ; elle est déterminée à température constante.

Lessivage - transport convectif de particules ou de colloïdes par la solution de sol.

Liaison covalente : résultat de la mise en commun d'un doublet d'électron par deux atomes.

Liaison de coordination - liaison où les deux électrons de liaison sont donnés par le même atome.

Ligand : molécules mise en jeu lors de la formation d'un complexe.

Matières en suspension (MES) - matières non dissoutes contenues dans l'eau et maintenues en suspension dans le liquide sous l'action de la turbulence.

Métaux lourds : éléments chimiques métalliques de numéros atomiques élevés, susceptibles d'être toxiques. Les métaux lourds les plus dangereux et les plus fréquents dans les eaux urbaines sont le cadmium, le chrome, le cuivre, le mercure, le plomb et le zinc.

Micro-organisme : être vivant microscopique tel qu'un virus, une bactérie ou un champignon ; il joue un rôle essentiel dans les cycles naturels.

Mobilité : capacité des substances chimiques à être transférées vers et par la solution de sol.

Nitrification : transformation de l'ammonium (NH_4^+) en nitrate (NO_3^{2-})

pH: logarithme décimal de l'inverse de la concentration d'ions H^+ en solution.

Potentiel d'oxydoréduction : expression en millivolts du potentiel électrique résultant du transfert d'électrons d'un donneur vers un accepteur d'électrons.

Pouvoir tampon: résistance d'un sol au changement de pH.

Précipitation: passage d'une espèce chimique de l'état dissous à l'état solide.

Relargage : remise en circulation de polluants initialement piégés par le sol.

Soluble : Se dit d'un corps solide ou gazeux qui peut se dissoudre dans un liquide ou un solvant en formant un mélange homogène.

Sorption : terme adopté pour regrouper les phénomènes d'adsorption, de précipitation et de complexation dans le milieu poreux.

Solution tampon : Solution assez concentrée dont le pH reste sensiblement constant malgré l'addition d'un acide ou d'une base ou malgré sa dilution.

Surface spécifique : rapport surface totale des grains d'un sol par unité de masse.