

Contribution de la mécanique à l'étude des bassins sédimentaires : modélisation de la compaction chimique et simulation de la compaction mécanique avec prise en compte d'effets tectoniques

Anne-Lise Guilmin

▶ **To cite this version:**

Anne-Lise Guilmin. Contribution de la mécanique à l'étude des bassins sédimentaires : modélisation de la compaction chimique et simulation de la compaction mécanique avec prise en compte d'effets tectoniques. Autre. Université Paris-Est, 2012. Français. NNT : 2012PEST1053 . pastel-00763547

HAL Id: pastel-00763547

https://pastel.hal.science/pastel-00763547

Submitted on 11 Dec 2012

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.

UNIVERSITÉ PARIS-EST

Thèse présentée pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université Paris-Est

Spécialité : Géomatériaux

par

Anne-Lise Guilmin

Ecole Doctorale : Sciences, Ingénierie et Environnement

Contribution de la mécanique à l'étude des bassins sédimentaires : modélisation de la compaction chimique et simulation de la compaction mécanique avec prise en compte d'effets tectoniques.

Soutenance le 10 septembre 2012 à l'Ecole des Ponts ParisTech devant le jury composé de :

Behrouz Gatmiri	*Rapporteur*
Laurent Jeannin	*Rapporteur*
Pierre Berest	*Examinateur*
Jean-Marc Daniel	*Examinateur*
Jean-François Barthélémy	*Examinateur*
Luc Dormieux	*Directeur de thèse*

Résumé

Avec l'augmentation de la demande énergétique et la raréfaction des réserves prouvées de pétrole, l'exploration pétrolière se tourne vers des sites de plus en plus difficiles, notamment les bassins géologiquement complexes. Pour évaluer les paramètres clés de l'exploration-production, des logiciels de simulation sont utilisés pour reconstituer l'historique du bassin. La modélisation physique et la formulation numérique sur lesquelles ils s'appuient doivent alors être enrichies pour mieux appréhender (voire prédire) le développement des surpressions. Cette thèse comporte deux volets : l'amélioration de la modélisation du géomatériau grâce à la micromécanique et le développement d'un outil de simulation hydromécanique gérant les spécificités de notre problème.

Une nouvelle modélisation micromécanique du géomatériau est proposée pour tenir compte du mécanisme de pression-dissolution (compaction chimique). L'intérêt de la micromécanique est d'obtenir une loi macroscopique calibrée avec des données microscopiques mesurables en laboratoire.

Depuis les travaux d'Athy (1930), modéliser l'évolution de la porosité aux grandes échelles de temps reste une problématique majeure. Aujourd'hui elle est estimée à l'aide de courbes empiriques de porosité-profondeur, qui hélas présentent une grande variabilité. Notre approche consiste à calculer la porosité au cours de l'enfouissement à l'aide de la déformation du squelette et de la pression de pore, ces deux variables couplées étant issues de la résolution d'équations mécaniques fondamentales. Une formulation originale a été conçue selon cette approche pour traiter la sédimentation et le déséquilibre de compaction, tensoriellement, en grandes déformations, suivant un mécanisme de compaction mécanique, avec un comportement évoluant dans le temps. L'implémentation numérique est quasiment aboutie et a déjà été validée partiellement avec des résultats analytiques. Une fois finalisé, cet outil de simulation devrait permettre de traiter des situations non oedométriques (contrairement aux simulateurs actuels) et permettre l'étude des bassins à histoire tectonique complexe.

Abstract

With the rise of energy demand and the growing scarcity of proved reserves of oil, the oil industry explores areas of extreme conditions and geologically complex basins. To estimate the key parameters for exploration-production, simulation softwares are used to reconstitute the history of the basin. The physical modelling and the numerical formulation on which they lean must be enriched to understand (even predict) overpressures. This thesis work contains two items : the improvement of the modelling of geomaterials using micromechanics and the development of a hydromechanical simulation tool handling the specificities of our problem.

A new micromechanical modelling of geomaterials is designed to take into account the mechanism of pressure-dissolution (chemical compaction). The asset of micromechanics is to produce a macroscopic law calibrated with microscopic data which can be measured in laboratory.

Since the work of Athy (1930), modelling the evolution of porosity over geological time-scale remains a major challenge. Today it is estimated by means of empirical curves of porosity-depth, which regrettably present a large variability. Our approach consists in evaluating the porosity during burial relatively to the strain of the skeleton and the pore pressure - these two coupled variables resulting from fundamental mechanical equations. An original formulation is designed according to this approach in order to treat the sedimentation and the desequilibrium compaction, tensorially, in large strains, following a mechanism of mechanical compaction, with a time-dependent behavior. Its numerical encoding is almost finished and has already been partially validated with analytical solution. Once finished, this simulation tool should allow to treat not only oedometrical situations but more general situations (contrary to current simulators) and study basins with complex tectonic history.

Remerciements

Tout d'abord, je suis reconnaissante envers Jean-François Barthélémy pour avoir partagé son ambition, enseigné personnellement certaines notions clés pour ce sujet et contrôlé ce travail avec une rigueur scientifique qui n'enlève rien à sa chaleur humaine. Je l'en remercie sincèrement.

Je remercie aussi Luc Dormieux pour s'être penché sur ce sujet et avoir partagé ses bonnes idées. Nos réunions de travail ont toujours été stimulantes.

Je remercie tout autant William Sassi qui a accompagné la rédaction de cette thèse avec un optimisme communicatif, et m'a soutenue avec constance.

Je dois une grande part de ce travail à la communauté qui m'a entourée. Je remercie donc :

- mes collaborateurs, qui ont patiemment répondu à mes questions (scientifiques ou administratives) : Laurent, Marie-Christine, Jean-Luc, Xavier, Jean-François, Marc-Olivier, Youri, Marta, Fadi, Sylvie, Odile, Claude et Cécile.
- les doctorants d'IFPEN, pour leur sympathie quotidienne, en particulier Edwin, Adeline, Felipe, Emanuelle, Maximilien, Jean-Baptiste et Betty parmi tant d'autres.
- et tous ceux qui créent et entretiennent des produits libres de droits comme GetFEM++, LaTeX et Wikipédia.

Je remercie évidemment mes parents pour leur soutien affectif inconditionnel.

Merci enfin à Martin Handford pour la série de livres *Où est Charlie ?*, qui m'ont permis d'acquérir très tôt les compétences indispensables pour repérer les coquilles dans les nuées de symboles que contiennent les annexes de ce rapport.

Table des matières

1 Présentation de la problématique **3**
- 1.1 Contexte industriel . . . 4
  - 1.1.1 Les hydrocarbures dans la problématique énergétique . . . 4
  - 1.1.2 Intérêt de l'industrie pétrolière pour la connaissance du sous-sol . . . 4
  - 1.1.3 Apports de la simulation dans l'étude des bassins sédimentaires . . . 5
- 1.2 Défis scientifiques . . . 6
  - 1.2.1 La mécanique du bassin sédimentaire : un sujet complexe . . . 6
  - 1.2.2 Capacité des outils de simulation actuels . . . 7
  - 1.2.3 Difficultés de prédire l'évolution de la porosité . . . 12
- 1.3 Introduction du sujet . . . 14
  - 1.3.1 Modélisation mécanique et chimique à l'aide de la micromécanique . . . 14
  - 1.3.2 Construction d'un outil de simulation . . . 16
  - 1.3.3 Cadre de travail . . . 18
  - 1.3.4 Suite de la thèse . . . 18

2 Les mécanismes de compaction, des observations aux modèles **21**
- 2.1 Mécanismes constatés en géologie . . . 22
  - 2.1.1 Génération de surpression . . . 22
  - 2.1.2 Compaction mécanique . . . 24
  - 2.1.3 Pression-dissolution . . . 26
- 2.2 Modèle mécanique macroscopique . . . 29
  - 2.2.1 Mécanique des fluides . . . 29
  - 2.2.2 Traitement de la plasticité . . . 31
  - 2.2.3 Poroplasticité en transformations finies . . . 32
- 2.3 Techniques d'homogénéisation micromécanique existantes . . . 32
  - 2.3.1 Description poromécanique . . . 32
  - 2.3.2 Séparation d'échelles . . . 33
  - 2.3.3 Méthodes d'homogénéisation . . . 33
  - 2.3.4 Equations d'état de la poroplasticité issues de la micromécanique . . . 35
- 2.4 Modèles issus de la micromécanique . . . 35
  - 2.4.1 Modèles de compaction mécanique . . . 35
  - 2.4.2 Modèle de compaction chimique . . . 35

3 Nouveaux modèles de compaction chimique **39**
3.1 Modèle de sphères à interface élasto-visqueuse 40
3.1.1 Description microscopique 40
3.1.2 Introduction d'un problème élastique équivalent 41
3.1.3 Homogénéisation du milieu aléatoire dans l'espace de Laplace-Carson . . 42
3.1.4 Equations d'état dans le domaine temporel 44
3.1.5 Réponse à un échelon dans l'espace temporel 46
3.1.6 Discussion 49
3.2 Approche en déformation libre 50
3.2.1 Objectifs 50
3.2.2 Homogénéisation du milieu aléatoire 50
3.2.3 Procédé de résolution 52
3.2.4 Modèle rhéologique dans une configuration simplifiée 55
3.2.5 Etude oedométrique dans une configuration simplifiée 55
3.2.6 Conclusion 57
3.3 Cas numérique unidimensionnel 58
3.3.1 Traitement simplifié 58
3.3.2 Résultats de simulation 59
3.3.3 Conclusion 61

4 Formulation faible du problème couplé hydromécanique **63**
4.1 Ecriture du problème hydromécanique 64
4.1.1 Système d'équations 64
4.1.2 Conditions aux limites 65
4.1.3 Démarche de résolution 66
4.2 Méthode des éléments finis 66
4.2.1 Discrétisation géométrique 67
4.2.2 Approximation nodale 67
4.2.3 Ecriture du système d'équations discret 68
4.2.4 Résolution 68
4.2.5 Utilisation de GetFEM++ 68
4.3 Discrétisation temporelle du système à résoudre 69
4.3.1 Différences finies en temps 69
4.3.2 Traitement de la sédimentation 69
4.3.3 Transformations finies 69
4.4 Formulation faible 70
4.4.1 Formulation faible de la conservation des moments 70
4.4.2 Formulation faible de la conservation de la masse fluide 71
4.5 Evaluation sur la géométrie connue 72
4.5.1 Evaluation de la conservation des moments sur Ω_t 72
4.5.2 Evaluation de la conservation de la masse fluide sur Ω_t 73
4.6 Conclusion 74
4.6.1 Système à résoudre 74
4.6.2 Suite de la résolution 74

5 Résolution numérique dans le cas isotrope poro-élasto-plastique 77
5.1 Intégration en temps . . . 78
5.1.1 Lois d'état . . . 78
5.1.2 Schéma d'intégration en temps . . . 81
5.1.3 Système à résoudre . . . 83
5.2 Méthode de résolution . . . 83
5.2.1 Algorithme de Newton-Raphson . . . 83
5.2.2 Algorithme d'intégration locale de la plasticité . . . 85
5.2.3 Algorithme général . . . 85
5.3 Evaluation du second membre . . . 86
5.4 Evaluation de la matrice tangente . . . 87
5.4.1 Ecriture de la matrice tangente . . . 87
5.4.2 Contribution de la plasticité . . . 90
5.4.3 Expression des Jacobiennes . . . 91

6 Conclusion 93
6.1 Retour sur la conception du code . . . 94
6.1.1 Réflexions sur l'implémentation numérique . . . 94
6.1.2 Cas d'applications limites . . . 95
6.2 Capacités de calcul actuelles . . . 96
6.3 Perspectives de développement . . . 99
6.4 Conclusion générale . . . 100

A Détails des développements limités 101
A.1 A court-terme ($t \to 0^+$, $\bar{\tau} \to \infty$) . . . 101
A.2 A long-terme ($t \to \infty$, $\bar{\tau} \to 0$) . . . 103

B Retour dans l'espace temporel 105
B.1 Calculs pour une contrainte générale . . . 105
B.1.1 A court-terme ($t \to 0$, $\bar{\tau} \to \infty$) et pour $\varphi < 1/3$ . . . 105
B.1.2 A court-terme ($t \to 0$, $\bar{\tau} \to \infty$) et pour $\varphi > 1/3$ . . . 105
B.1.3 A long-terme ($t \to \infty$, $\bar{\tau} \to 0$) et pour $\varphi < 1/3$ . . . 106
B.1.4 A long-terme ($t \to \infty$, $\bar{\tau} \to 0$) et pour $\varphi > 1/3$ . . . 106
B.2 Calculs pour un échelon de contrainte : $\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \underline{\underline{\Sigma}}_0 H(t)$ . . . 106

C Contribution de la plasticité au comportement tangent 109
C.1 Expression de $\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}}$ . . . 110
C.2 Expression de $\mathrm{d}\lambda_j$ . . . 110
C.3 Expression de $\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P$ . . . 111

D Ecriture finale des paramètres tangents 113

E Résumé pour l'implémentation **115**
E.1 Synthèse 115
E.2 Jacobiennes détaillées terme à terme 117
E.3 Notations utilisées 118
E.4 Simplifications 120

F Article pour le congrès de l'A.R.M.A. 2012 **123**

Table des figures

1.1 Captures d'écrans de TemisFlow™. 7
1.2 Données porosité-profondeur pour des argilites en compaction mécanique pure. . 9
1.3 Données porosité-profondeur pour des silico-clastiques en compaction mécanique pure. 10
1.4 Données porosité-profondeur pour des carbonates en compaction mécanique pure. 11
1.5 Profils porosité-profondeur calculés pour différentes perméabilités. 13
1.6 Mesures porosité-profondeur pour des carbonates et des grès. 14
1.7 Distinction des échelles d'étude 15
1.8 Compaction d'un domaine sédimentaire subaquatique 17

2.1 Profil porosité-profondeur présentant des surpressions. 22
2.2 Deux structures de roches observées au MEB. 23
2.3 Coupe transversale du Brunei. Source : Tingay et al, 2009 [Tingay et al. 2009] . 24
2.4 Cartes de densité d'échantillons de différentes porosités. 25
2.5 Même type de matériau avec ou sans compaction. Source : Youri Hamon (IFPEN). 25
2.6 Surface stylolitique. Source : Schmittbuhl et al., 2004 [Schmittbuhl et al. 2004] . 27
2.7 Microstylolite. Source : Youri Hamon 27
2.8 Structures de déformation dans un réservoir carbonaté 28
2.9 Solubilité du CO_2 en fonction de la température 29
2.10 Solubilité du CO_2 en fonction de la pression 29
2.11 Les différents points de vue du matériau 33
2.12 Démarche d'une étude micromécanique avec conditions aux limites uniformes en déformation. 34
2.13 Modèles locaux de pression-dissolution 37

3.1 Illustration du modèle microscopique et schéma rhéologique équivalent de l'interface 41
3.2 Paramètres de notre problème d'Eshelby 42
3.3 Illustration d'un chargement quelconque sur le V.E.H. 46
3.4 Illustration d'un chargement par un échelon de contrainte 47
3.5 Illustration d'un chargement oedométrique sur le V.E.H. 48
3.6 Modèle en déformation libre appliqué à la dilatation de Lehner and Leroy [2003]. 50
3.7 Décomposition du problème pour l'application du théorème de Levin. 51
3.8 Décomposition du problème pour l'évaluation du taux de déformation du fluide. . 53
3.9 Décomposition du problème pour l'évaluation du taux de déformation du solide. 53
3.10 Modèle rhéologique viscoélastique de Maxwell. 55

3.11 Porosité-profondeur en fonction du processus d'enfouissement et de la lithologie. 58
3.12 Calcul de porosité d'une pile sédimentaire de 3000 m de hauteur. 59
3.13 Profil de porosité d'un argile 60
3.14 Profil de porosité d'un grès 60
3.15 Profil de porosité d'un assemblage argile-grès-argile 61

4.1 Conditions aux limites mixtes de notre étude 66
4.2 Illustration du schéma Lagrangien réactualisé 70

5.1 Parties réversible et irréversible de la transformation 79
5.2 Interpretation géométrique pour une fonction scalaire g à une variable scalaire. . 84
5.3 Algorithme général pour traiter l'instant t' 86

6.1 Comparaison numérique-analytique des contraintes en fonction de la profondeur . 97
6.2 Comparaison numérique-analytique du tassement au cours du temps 98

E.1 Arborescence d'implémentation des termes de la matrice tangente 122

Notations

Objets mathématiques

Les vecteurs sont soulignés une fois ($\underline{v}$).
Les matrices sont soulignées deux fois ($\underline{\underline{M}}$).
Les tenseurs d'ordre 4 sont notés en majuscule avec une double barre ($\mathbb{T}$).

Opérateurs mathématiques

$\otimes$	produit tensoriel
$\cdot$	produit tensoriel contracté
:	produit tensoriel doublement contracté
∇	gradient (aussi noté $grad$)
$\nabla\cdot$	divergence (aussi noté div)
$tr()$	trace d'une matrice
$det()$	déterminant d'une matrice
$\{\}_s$	partie symétrique d'une matrice
$\{\}_a$	partie antisymétrique d'une matrice
$\underline{\underline{x}}^T$	transposée de la matrice $\underline{\underline{x}}$
$\frac{\partial y}{\partial x}$	dérivée partielle de y par rapport à x
$\dot{x}$	dérivée temporelle de x
$x^{(i)}$	dérivée $i^{\text{ème}}$ de x par rapport au temps
$< x >_\Omega$	moyenne de x sur le domaine Ω
$\|\underline{x}\|$	norme euclidienne du vecteur $\underline{x}$

Fonctions mathématiques

H	Heaviside
$\mathcal{L}$	transformée de Laplace
$\mathcal{C}$	transformée de Carson
$\mathcal{O}(x)$	grand O de x (notation de Landau)

Indices, exposants et accents

x_0	relatif à l'état initial (état au moment du dépôt)
x^d	donnée d'entrée (constante ou renseignée en tout instant)
x^s	relatif à la partie solide du matériau poreux
x^f	relatif à la partie fluide du matériau poreux
x^e	relatif à la partie élastique de la transformation
x^P	relatif à la partie plastique de la transformation
$x^\star$	exprimé dans l'espace de Laplace-Carson
$\hat{x}$	virtuel (dans le cadre du principe des travaux virtuels)

Conventions

Pour les quantités relatives à un état de référence comme le déplacement, on considère que l'état de référence est l'état de sédimentation. Comme la sédimentation est progressive, cet état correspond pas à un instant unique pour l'ensemble du domaine et nous ne l'utiliserons que de façon locale. Les paramètres initiaux portent l'indice 0 (p_0).

Dans toute cette thèse, on adopte la convention mécanique pour parler de la contrainte. Ainsi elle est positive en traction et négative en compression. Cette convention s'oppose à la convention géologique selon laquelle la contrainte est positive en compression et négative en traction.

Paramètres (par ordre alphabétique latin puis grec)

$\underline{\underline{B}}$	tenseur de Biot
$\mathbb{C}$	tenseur de comportement
$\underline{e_i}$	vecteur décrivant une base orthonormée du référentiel (i variant de 1 à 3)
$\underline{g}$	vecteur force gravitationnelle
J	Jacobien de la déformation (déterminant du gradient de déformation)
$\underline{\underline{K}}$	tenseur de perméabilité divisé par la viscosité
M	module de Biot
$\underline{n}$	normale unitaire extérieure au domaine
p	pression de pore
$\underline{u}$	déplacement
$\underline{w}$	flux de fluide
$\underline{\underline{\varepsilon}}$	tenseur de déformation
μ^f	viscosité du fluide
ϕ	porosité Lagrangienne
φ	porosité Eulérienne
ρ	densité totale
ρ^f	densité du fluide
$\underline{\underline{\sigma}}$	tenseur de contraintes (lequel ?)
$\underline{\underline{\sigma'}}$	tenseur de contraintes effectives
$\underline{\underline{\sigma}}_*$	tenseur de contraintes candidates (dans l'algorithme de plasticité)
Ω	domaine d'étude

Lexique

Voici les définitions de termes non explicités dans le texte. Celles relatives à la géologie proviennent de [Foucault and Raoult 1995]. Ils sont classés par ordre d'apparition et la section où ils ont été employés est signalée à gauche.

Section	*Terme*	*Définition*
1.1.3	crustal	relatif à la croûte, la couche la plus superficielle de la Terre (épaisse de quelques km en moyenne)
1.1.3	graben	structure tectonique constituée par des failles normales de même direction et limitant des comportement de plus en plus abaissés en allant vers le milieu de la structure
1.1.3	diapir	anticlinal dont les couches les plus internes ont percé l'enveloppe, un anticlinal étant un pli où les éléments situés à l'intérieur de la courbure étaient, avant la déformation, les plus bas
1.2	migration primaire	migration des hydrocarbures depuis la roche-mère vers une roche magasin (réservoir)
1.2	migration secondaire	migration des hydrocarbures au sein de la roche magasin vers la surface. Ils n'y parviennent qu'en l'absence de piège structural.

Introduction

Cadre de la thèse

Ce travail de doctorat a été encadré par **Jean-François Barthélémy** et conduit à IFP Energies nouvelles (IFPEN). IFPEN a également assuré le financement de ce projet. Cette thèse a également été dirigée par **Luc Dormieux** et dépend du laboratoire Navier qui fait partie de l'Ecole des Ponts ParisTech et donc de l'Université Paris-Est .

IFPEN est un organisme public de recherche, d'innovation et de formation intervenant dans les domaines de l'énergie, du transport et de l'environnement. Sa mission est d'apporter aux acteurs publics et à l'industrie des technologies performantes, économiques, propres et durables pour relever les défis sociétaux liés au changement climatique, à la diversification énergétique et à la gestion des ressources en eau. Son expertise est internationalement reconnue http ://www.ifpenergiesnouvelles.fr/ [2012].

Le **Laboratoire Navier** est une unité mixte de recherche commune à l'Ecole des Ponts ParisTech, à l'Institut Français des Sciences et Technologies des Transports, de l'Aménagement et des Réseaux (IFSTTAR) et au CNRS (UMR 8205). Les recherches menées concernent la mécanique et la physique des matériaux et des structures, les géomatériaux et leurs applications à la géotechnique, au génie civil, à la géophysique et à l'exploitation pétrolière. Elles répondent à de multiples enjeux sociétaux : la construction durable, les risques naturels, l'environnement et l'énergie http ://navier.enpc.fr/ [2012].

Thématique de recherche

L'un des champs de recherche de la modélisation de bassin est la caractérisation et la modélisation du rôle des états de contraintes sur les déplacements de fluides dans les bassins sédimentaires. Ce projet de doctorat s'inscrit dans cette thématique de recherche et propose en particulier d'aborder la compaction sédimentaire avec une vision mécanique.

Les phénomènes en jeu ont lieu à des échelles de temps et d'espace différents et sont pourtant concurrents, alors nous faisons appel à la micromécanique pour traiter ce problème multi-échelle.

Le **sujet** de cette thèse est la *contribution de la mécanique à l'étude des bassins sédimentaires : modélisation de la compaction chimique et simulation de la compaction mécanique avec prise en compte d'effets tectoniques.*

Cette introduction est développée dans le chapitre 1 et la démarche de la thèse est présentée dans la section 1.3.4.

Chapitre 1

Présentation de la problématique

Sommaire

1.1 Contexte industriel 4
1.1.1 Les hydrocarbures dans la problématique énergétique 4
1.1.2 Intérêt de l'industrie pétrolière pour la connaissance du sous-sol 4
1.1.3 Apports de la simulation dans l'étude des bassins sédimentaires 5
1.2 Défis scientifiques 6
1.2.1 La mécanique du bassin sédimentaire : un sujet complexe 6
1.2.2 Capacité des outils de simulation actuels 7
1.2.3 Difficultés de prédire l'évolution de la porosité 12
1.3 Introduction du sujet 14
1.3.1 Modélisation mécanique et chimique à l'aide de la micromécanique . . . 14
1.3.2 Construction d'un outil de simulation 16
1.3.3 Cadre de travail 18
1.3.4 Suite de la thèse 18

Avec l'augmentation de la demande énergétique et la raréfaction des réserves prouvées de pétrole, l'exploration pétrolière se tourne vers des sites de plus en plus difficiles. Il peut s'agir de bassins géologiquement complexes (chaînes plissées), ou bien de bassins dont le pétrole est délicat à extraire (viscosité faible, présence importante de H_2S, ...) ou encore ceux dont l'accessibilité est périlleuse pour des raisons politiques ou naturelles (comme la région Arctique, périodiquement prise par les glaces, ou les marges continentales en eaux profondes comme la mer du Nord et la mer du Labrador).

Dans cette thèse, nous nous intéressons aux bassins ayant subi une histoire tectonique complexe ([Roure et al. 2005], [Tingay et al. 2009]). Il est essentiel de pouvoir simuler la formation de tels bassins avec le meilleur réalisme et un minimum de données.

Ce chapitre présente l'intérêt porté à ce sujet par l'industrie, les capacités et perspectives d'amélioration des simulations actuelles, et les spécifications de ce travail de thèse.

Les termes signalés par cet exposant• sont définis dans le lexique au début de cette thèse.

1.1 Contexte industriel

1.1.1 Les hydrocarbures dans la problématique énergétique

Pour garantir la sécurité des approvisionnements en énergie, l'exploitation des ressources en hydrocarbures reste aujourd'hui indispensable : le rapport WEO 2010 (World Energy Outlook) de l'Agence Internationale de l'Energie table sur une croissance constante de la production d'hydrocarbures jusqu'en 2025.

Certes, les *ressources ultimes* en hydrocarbures sont limitées et non renouvelables (environ 10 000 à 12 000 milliards de barils) ; mais les *réserves*, c'est-à-dire les volumes que notre capacité technique et économique permet de produire (estimés à 1000 milliards de barils aujourd'hui), varient dans le temps au fil des découvertes, des progrès technologiques et de notre capacité économique à produire (liée au prix du pétrole).

Ainsi, repousser les limites actuelles des réserves d'hydrocarbures est un des axes prioritaires du programme de recherche et développement d'IFPEN inscrit dans son contrat d'objectifs avec l'Etat. Pour cela, IFPEN développe des outils de simulation avancés pour la connaissance du sous-sol et des procédés de gestion plus efficace des ressources en énergie fossile. Ce travail de thèse réalisé au coeur du département Géologie structurale d'IFPEN s'inscrit dans ce cadre.

Notons que les travaux de modélisation du sous-sol peuvent aussi être utilisés pour d'autres applications, comme la gestion de l'eau, le stockage de CO_2 ou la géothermie par exemple.

1.1.2 Intérêt de l'industrie pétrolière pour la connaissance du sous-sol

Pour l'industrie pétrolière, connaître le sous-sol signifie être capable d'évaluer :

- **les propriétés pétrophysiques des roches** et en particulier :
  - la porosité, car elle est nécessaire au calcul du volume d'hydrocarbures dans un champ
  - la perméabilité, car elle permet d'évaluer la difficulté d'extraction. Pour exploiter un réservoir dans une roche peu perméable, on aura besoin d'établir une stratégie d'extraction : par exemple mettre des puits très proches, creuser des puits horizontaux ou bien utiliser la fracturation hydraulique.

- **l'état et l'évolution géologique des bassins sédimentaires** pour comprendre la formation des gisements d'hydrocarbures. Cela passe par l'estimation :
  - des surpressions et des contraintes, car elles sont déterminantes pour le dimensionnement du matériel de forage et de la densité des boues de forages, tous deux essentiels à la sécurité du puits. En effet, une boue trop dense risque d'engendrer de la fracturation de la roche réservoir et donc une *venue* (fuite d'hydrocarbures pressurisés). A l'inverse, une boue trop peu dense ne permettra pas d'établir l'équilibre du puits dans le champ de contraintes initial ce qui provoquera l'effondrement du puits.
  - de la déformation de la roche dans le temps, pour valider les scénarios géologiques par la méthode du backstripping et évaluer où sont localisés les hydrocarbures qui ont migré depuis leur zone de formation (*roche mère*).

1.1.3 Apports de la simulation dans l'étude des bassins sédimentaires

Evolution des méthodes d'étude

En comparaison avec les autres sciences de l'ingénieur, la géologie a pour originalité d'étudier des phénomènes à des échelles de temps et d'espace que l'on ne peut pas reproduire en laboratoire : les espaces considérés s'étalent sur des dizaines de kilomètres et les périodes étudiées se comptent en millions d'années. La compréhension des processus physiques se fait alors à l'aide de deux outils : la modélisation analogique et la simulation numérique.

La **modélisation analogique** propose de simuler expérimentalement plusieurs types de processus géologiques (structuraux, sédimentaires ou d'écoulement) sur des maquettes redimensionnées par rapport au sujet d'étude. Cette technique est particulièrement efficace pour comprendre les déplacements le long des failles crustales• car le sable utilisé pour ces expériences a le même coefficient de frottement que les roches naturelles. Par exemple, [Vendeville and Jackson 1992] ont pu montrer que certains grabens• formés au-dessus des diapirs• de sel peuvent présenter des extensions régionales de faible épaisseur. Cet outil a un intérêt relativement qualitatif.

La **simulation numérique** propose de quantifier les phénomènes physiques (écoulement, fracturation, flux sédimentaires par exemple) en s'appuyant sur une modélisation des processus naturels, c'est-à-dire leur description dans un cadre mathématique et physique à la fois suffisamment complexe pour rendre compte des phénomènes prédominants de façon réaliste et suffisamment simple pour qu'on sache caler les paramètres nécessaires aux modèles. Les données disponibles sont souvent hétéroclites et limitées. Elles proviennent des campagnes de mesure sismique, stratigraphique et sédimentologique. La simulation numérique s'est réellement déployée avec l'essor des outils informatiques dans les années 1990 (voir par exemple Ungerer et al. [1991]) et est devenue depuis indispensable à l'industrie pétrolière.

On trouve aujourd'hui sur le marché des **plateformes de logiciels** capables de communiquer et d'assembler les données mesurées puis de les utiliser dans leur simulateur pour comprendre et prédire les surpressions ([Osborne and Swarbrick 1999] et [Roure et al. 2005]). Ce sont notamment TemisFlow™ commercialisé par BeicipFranlab [http ://www.beicip.com/ 2012], Petromod© par Schlumberger [http ://www.slb.com/ 2012] et BasinMod© par Platte River [http ://www.platte.com/ 2012].

Place de la simulation en géologie structurale et sédimentaire

En géologie structurale et sédimentaire, on utilise la méthode de la **restauration** : cela consiste à retrouver l'état des couches sédimentaires avant déformation tectonique du bassin, connaissant sa configuration actuelle. Pour cela, on restaure des horizons que l'on estime appartenir à la même couche lithologique.

Les premières études de ce type s'appuyaient sur une **modélisation réversible**, l'avantage étant qu'ainsi le calcul de l'évolution du bassin se fait de la configuration connue (actuelle) vers la configuration à étudier (passée). Les premières estimations de ce type s'affranchissaient de la mécanique et privilégiaient une approche géométrique (pas de compaction et conservation des volumes). Puis un comportement rétrograde de la roche a été introduit. Il s'agit d'un comportement élastique (permettant d'établir des équations symétriques par rapport au temps), éventuellement compensé par une loi de décompaction qui impose par exemple de respecter une loi porosité-profonfeur $\phi(z)$ (méthode mise au point par [Watts and Ryan 1976]).

Depuis le développement des outils de simulation informatiques dans les années 1990, les études de bassin recourrent à une **modélisation directe** : le calcul de l'évolution du bassin est mené en partant d'une configuration passée hypothétique. Pour retrouver à la fin du calcul la configuration observée actuellement, on procède en corrigeant itérativement les hypothèses de la configuration passée et du scénario de chargement (méthode de *backstripping*). Cela permet de retrouver les événements clés que sont les étapes d'érosion et de sédimentation. Si la modélisation directe demande certes bien plus de temps et de capacité de calcul, elle permet en contrepartie de tenir compte de la nature irréversible des processus naturels en jeu et donc de les décrire avec plus de réalisme.

1.2 Défis scientifiques

Durant les dernières décennies, la modélisation de l'écoulement des fluides a connu de grandes avancées : intégration de données géologiques et simulation de génération d'hydrocarbures, écoulements polyphasiques, migration primaire•, migration secondaire• et processus d'accumulation [Ungerer et al. 1991]. En revanche, les outils de simulation n'ont pas suivi un développement aussi rapide dans le champ de la mécanique. Or comme la déformation et la fracturation de la roche impactent grandement l'écoulement des fluides, il existe un couplage hydromécanique qui contraint à affiner la modélisation mécanique pour valoriser pleinement les progrès faits en modélisation de fluides.

1.2.1 La mécanique du bassin sédimentaire : un sujet complexe

Le sujet d'étude est l'ensemble du bassin sédimentaire, depuis la surface jusqu'aux profondeurs où les minéraux de la roche commencent à recristalliser (zone de *métamorphisme*). Cette limite inférieure est variable selon les cas, avec en moyenne une température supérieure à 600°C et des pressions supérieures à 3 ou 4 kbar [Foucault and Raoult 1995]. Par exemple, dans la baie de Santos, dans la mer du Brésil, on trouve un champ d'hydrocarbures gigantesque appelé *Jupiter*, situé à 7000 m de profondeur, sous 5000 m de sédiments (dont une couche de sel) et 2000 m d'eau.

La température n'est pas uniforme dans le bassin et est influencée par différents phénomènes : la diffusion de la chaleur fournie par le manteau terrestre, la radioactivité, des réactions chimiques exothermiques, ... Dans cette étude, on considère que le bassin est soumis à un gradient vertical de température (environ 3°C par 100m en moyenne). Au cours de la sédimentation du bassin, au fur et à mesure qu'une roche s'enfouit, elle subit ainsi une élévation de la température. Or les phénomènes physico-chimiques qui affectent la microstructure de la roche (et donc son tassement) dépendent de la température. Dans la plupart des modèles de compaction, la profondeur détermine quels sont les phénomènes prédominants (Hedberg [1936]) : dans les profondeurs superficielles, on modélise uniquement la **compaction mécanique**, c'est-à-dire la compaction due à la compression et au réarrangement des grains en réponse à une contrainte compressive ; plus en profondeur, on ajoute aux modèles la **compaction chimique** c'est-à-dire la compaction due aux processus physico-chimiques comme la pression-dissolution.

De plus, le bassin subit des contraintes latérales reliées aux déplacements tectoniques (dérive des plaques tectoniques : quelques centimètres par an en moyenne). Ces contraintes peuvent générer des failles qui modifient le profil des lithologies en grabbens ou en écailles par exemple.

Enfin, les échelles de temps en jeu sont hétérogènes puisqu'on étudie des phénomènes concurrents dont les temps caractéristiques sont très différents :

- La vitesse de sédimentation est de l'ordre de quelques centimètres par million d'années.
- La diffusion de fluide peut être rapide (pour de grandes perméabilités intrisèques : $10^8 cm^2$ pour des roches très fracturées) ou très lente (pour de faibles perméabilités intrisèques : inférieures à $10^{-16} cm^2$ [Noiret 2009]).
- La vitesse de déformation associée à la pression-dissolution se situe entre 10^{-11} et $10^{-16} s^{-1}$ [Le Guen 2006].

1.2.2 Capacité des outils de simulation actuels

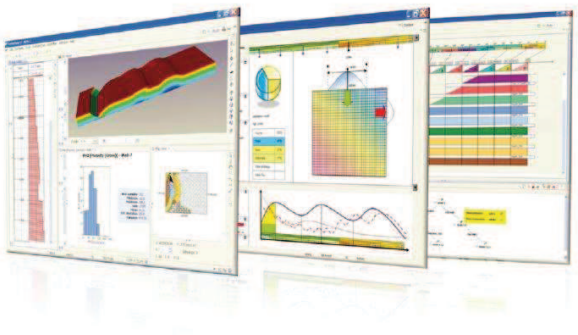


Figure 1.1 – Captures d'écrans de TemisFlow™. Source : http ://www.beicip.com/ .

Modélisations mécaniques utilisées actuellement

Les modèles mécaniques utilisés actuellement dans TemisFlow™ reposent sur une formulation initialement décrite dans [Schneider et al. 1993].

La porosité (ϕ) est estimée en fonction de la profondeur (z) à l'aide de formules empiriques fondées sur des courbes de références $\phi(z)$. Ces courbes sont constituées à partir de données publiées qui ont été sélectionnées pour représenter la **compaction mécanique pure** des trois grandes familles de roches [Bessereau 2004]. Les figures 1.2, 1.3 et 1.4 présentent les données sources pour des roches respectivement argileuses, silico-clastiques et carbonatées. Ainsi une relation bi-univoque entre porosité et profondeur est définie pour chaque lithologie, comme déjà dans le travail pionnier d'Athy [Athy 1930a].

Les conditions aux limites sont supposées **oedométriques** : la contrainte est supposée invariante par translation horizontale et seule la contrainte verticale est évaluée, avec l'hypothèse qu'elle vaut le poids des terres sus-jacentes. Il existe donc une relation bi-univoque entre contrainte verticale et profondeur. Puisque le solide est supposé plastiquement incompressible, la porosité porte l'information de la déformation verticale (seule composante de la déformation calculée) [Perrier and Quiblier 1974]. Alors la relation entre la porosité et la contrainte verticale fait office de loi de comportement unidimensionnelle formulée en vitesse.

La roche poreuse est modélisée mécaniquement comme un matériau élasto-plastique dans un cadre d'**hypothèses de petites perturbations** (HPP).

On peut également activer une modélisation visco-élasto-plastique du matériau afin d'inclure un modèle de **compaction chimique**. Dans ce cas, il faut renseigner la caractérisation de la viscosité avec des paramètres macroscopiques. Ceux-ci sont difficiles à caler car les échelles de temps sur lesquels ils devraient être mesurés sont trop grandes pour des expériences en laboratoire.

Ce modèle visco-élasto-plastique associé à la compaction chimique fait l'hypothèse qu'il n'y a pas de **transport de masse solide**, en argumentant que la distance de transfert des éléments par pression-dissolution est inférieure au mètre [Potdevin et al. 1994]. Or il a été établi par la suite que la pression-dissolution peut entraîner une migration de matière solide non négligeable [Gundersen et al. 2002]. Une adaptation du modèle a été implémentée dans une version du logiciel en développement mais n'est pas encore disponible dans la version commercialisée.

Tous les autres logiciels de simulation de bassin, comme Petromod© et BasinMod©, travaillent aussi en conditions oedométriques.

Limites et perspectives

Ces modèles sont très pertinents dans les situations oedométriques où la déformation demeure HPP tout au long de la période étudiée. En dehors de ce cadre, les hypothèses sur lesquelles ils reposent ne sont plus respectées. Ces modèles ne sont donc pas conçus pour traiter les bassins qui nous intéressent : ultraprofonds (plusieurs milliers de mètres d'épaisseur de sédiments) à forte histoire tectonique.

En effet, ces modèles recourrent à des courbes empiriques porosité-profondeur qui ne sont valides que pour une compaction mécanique pure. Dans les bassins ultraprofonds, la compaction chimique liée à la diagenèse prédomine sur la compaction mécanique en grande profondeur. On aimerait donc à modéliser, sans recours à des courbes empiriques, une évolution de la porosité qui tienne compte à la fois de la compaction mécanique et chimique.

De plus, si l'on souhaite étudier des bassins ayant subi des effets tectoniques, il est nécessaire de modifier les modèles utilisés actuellement afin de tenir compte des conditions aux limites

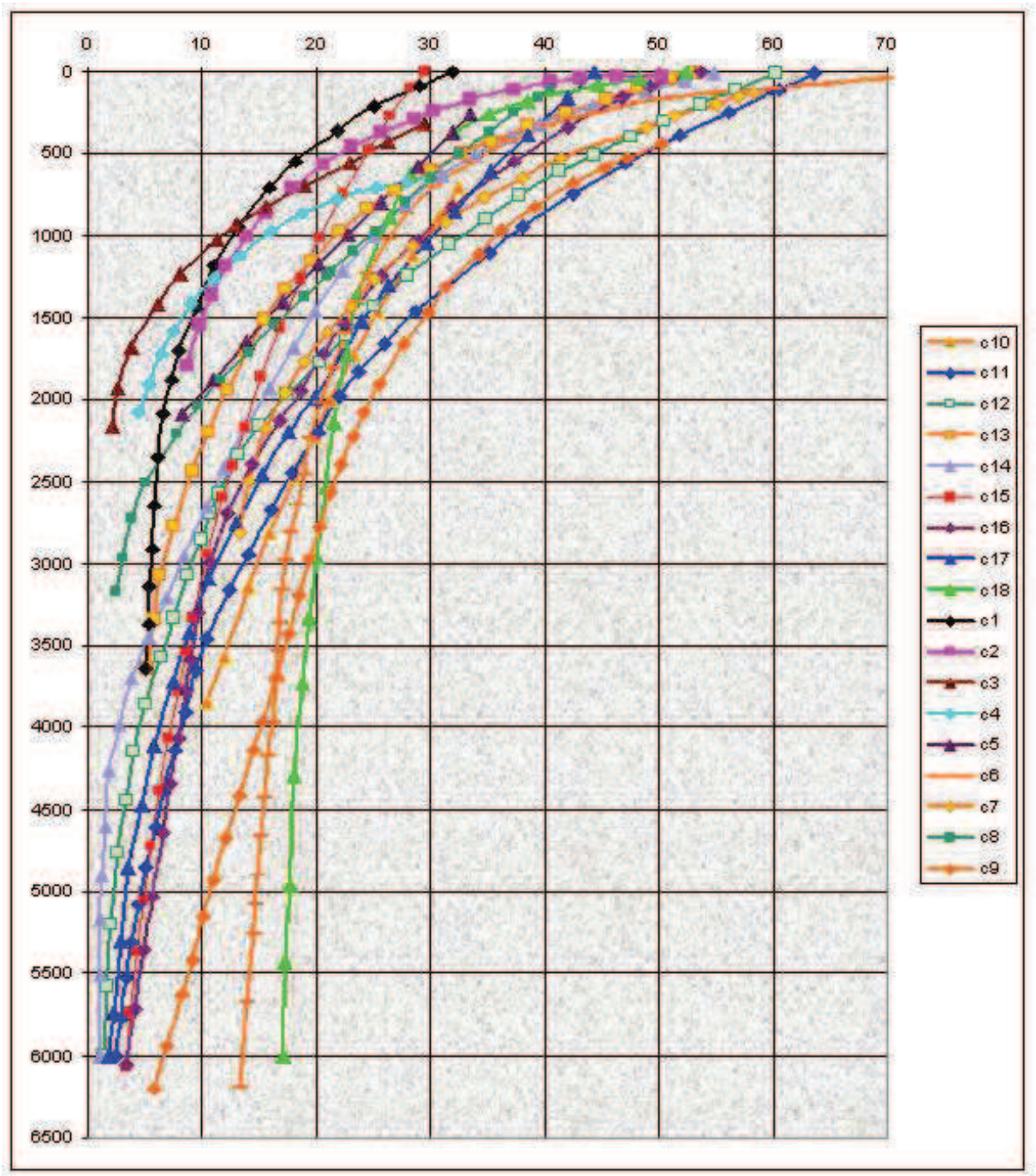


Figure 1.2 – Données $\phi(z)$ de référence pour des argilites soumises à de la compaction mécanique pure. Source : Hermanrud [1993]. Séries : 1 : Proshlyakov [1960] ; 2 : Meade [1966] ; 3 : Athy [1930b] ; 4 : Hosoi [1963] ; 5 : Hedberg [1936] ; 6 : Dickinson [1953] ; 7 : Magara [1968] ; 8 : Weller [1959] ; 9 : Ham [1966] ; 10 : Foster and Wahlen [1966] ; 11 : Sclater and Christie [1980] ; 12 : Bethke [1985] ; 13 : Doligez et al. [1986] ; 14 : England et al. [1987] ; 15 : Deming and Chapman [1989] ; 16 : Burnham and Braun [1990] ; 17 : Hermanrud et al. [1990] ; 18 : Lerche [1990].

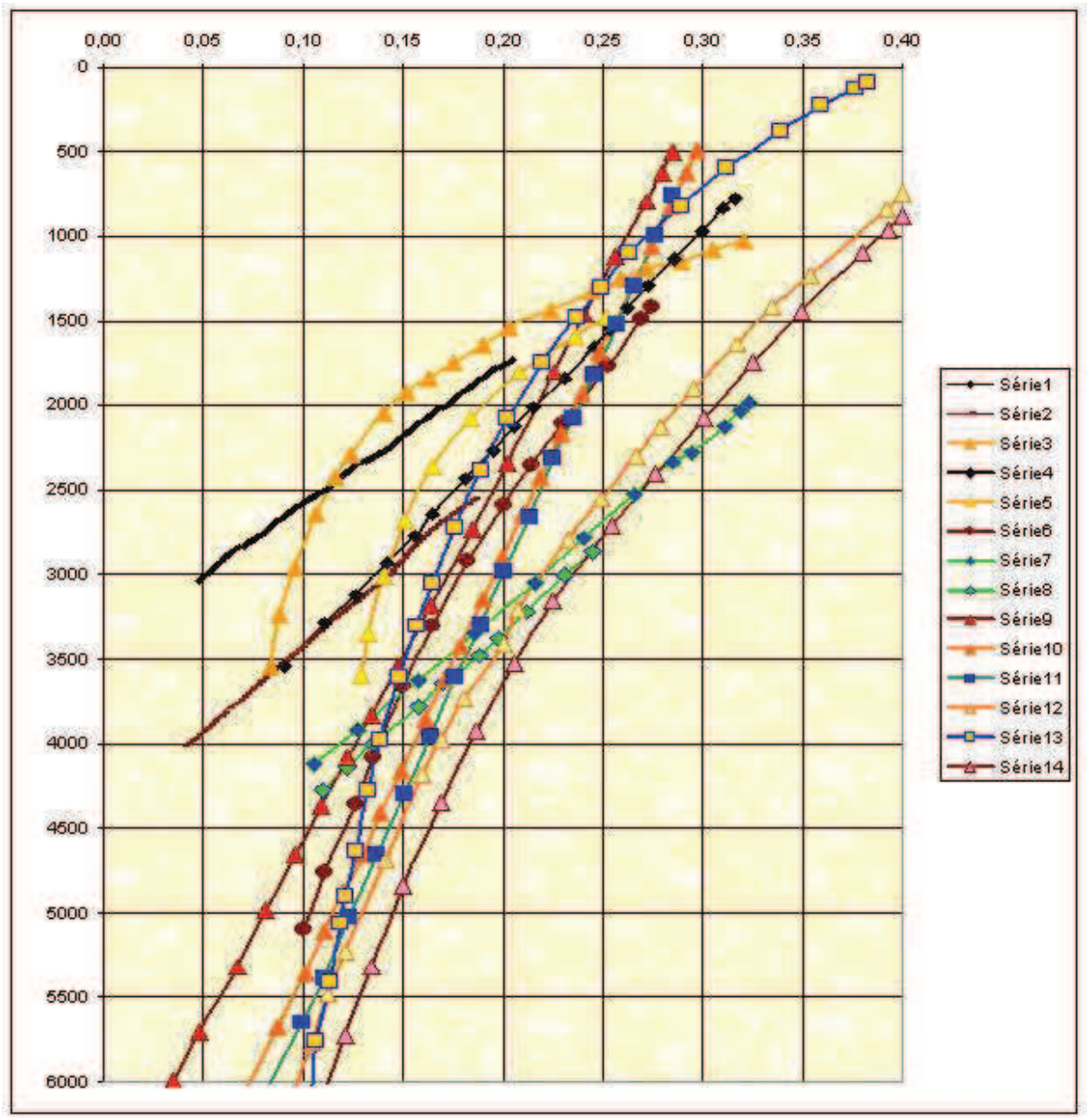


Figure 1.3 – Données $\phi(z)$ de référence pour des roches silico-clastiques soumises à de la compaction mécanique pure. Source : Giles [1997]. Séries : 1 : Galloway [1974] ; 2 : Permo-Carbonifère, Oman, Giles [1997] ; 3 : sables fluviaux du Brunei, Giles [1997] ; 4 : Proshlyakov [1960] ; 5 : sables fluviaux du Brunei, Giles [1997] ; 6 : Galloway [1974] ; 7 : Ness Fm, Giles [1997] ; 8 : Etive Fm, Giles [1997] ; 9 : Loucks et al. [1979] ; 10 : 10 Ma, Trask sorting = 1.5, Scherer [1987] ; 11 : Baldwin and Butler [1985] ; 12 : 60 Ma, Trask sorting = 1.5, Scherer [1987] ; 13 : Sclater and Christie [1980] ; 14 : Falvey and Deighton [1982].

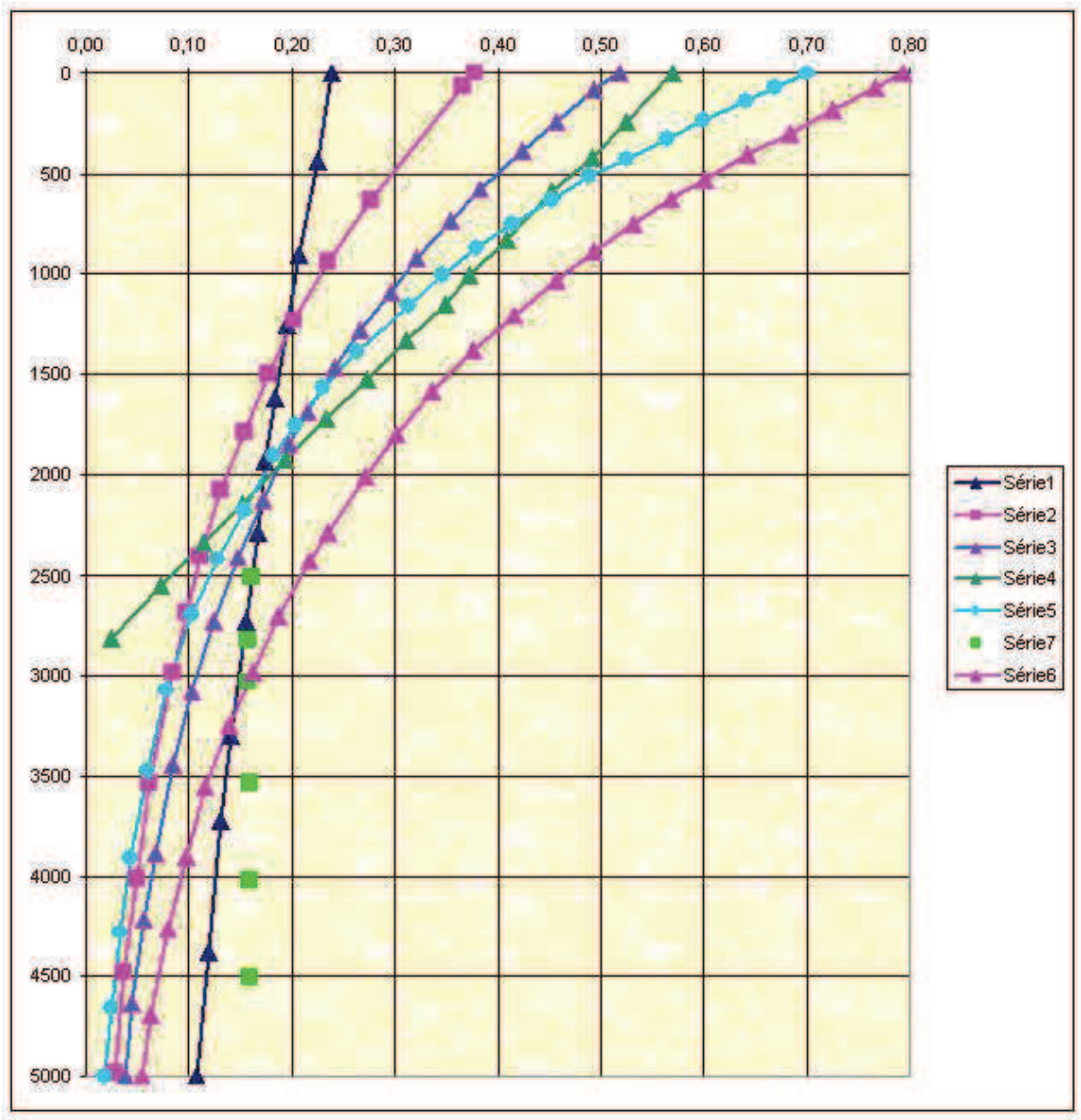


Figure 1.4 – Données $\phi(z)$ de référence pour des carbonates soumises à de la compaction mécanique pure. Source : Giles [1997]. Séries : 1 : Calcaire, Royden and Keen [1980] ; 2 : Dolomite, Schmoker and Halley [1982] ; 3 : 75-100% calcaire, Schmoker and Halley [1982] ; 4 : Calcaire, BornéoGiles [1997] ; 5 : Craie, Sclater and Christie [1980] ; 6 : Dolomite, Schmoker and Halley [1982] ; 7 : Grès oolithique, Zechstein Giles [1997].

latérales et d'évaluer toutes les composantes des différents champs (contraintes et déformations notamment).

Tentatives antérieures

On trouve dans la littérature différentes tentatives d'amélioration de la formulation de ces modèles. Voici quelques travaux reliés à cette thèse.

E.Bourgeois a introduit des **transformations finies** dans ce type de formulation pour pouvoir sortir du cadre HPP [Bourgeois 1997]. Dans cette thèse, nous reprenons l'utilisation des transformations finies et l'étendons également au calcul des propriétés du matériau.

Un effort important a été fait par [Lamoureux-Var 1997] pour tenter d'utiliser des **lois mécaniques réalistes** : la modélisation choisie permet de décrire l'évolution au cours du temps et en trois dimensions des contraintes et des déformations. L'application numérique correspondante utilise un code de calcul par éléments finis conçu pour les études de sol du Génie Civil et se heurte malheureusement à une spécifité de l'étude des bassins sédimentaires : les pas de calcul, imposés par les valeurs de la diffusivité hydraulique, sont nécessairement petits et par suite un calcul à l'échelle des temps géologiques devient très lourd.

Une formulation mécanique encore plus complète a été développée pour une configuration oedométrique dans [Bernaud et al. 2002] : elle traite des équations d'état poroélastoplastique, en grandes déformations, avec un couplage hydromécanique et prend en compte l'évolution de la géométrie de la microstructure grâce à une **approche micromécanique**. Le code numérique associé permet par exemple de simuler la génération et la dissipation de surpressions pour différentes perméabilités initiales (voir figure 1.5 extraite de [Bernaud et al. 2006]). C'est ce type de formulation qui est développée ici pour des conditions aux limites générales (possibilité de contraintes latérales). On notera que la grande phase élastique (porosité quasi constante sur plusieurs milliers de mètres) n'est pas réaliste, car les roches sédimentaires se compactent en fait dès les premiers mètres. Ceci est attribuable à la loi d'écrouissage utilisée qui impose soit d'avoir un seuil de plasticité élevé (et donc une grande phase élastique), soit de décrire un matériau très mou (voir section 6.3).

Dans le domaine de l'ingénierie de réservoir, il existe une solution alternative à la gestion du **couplage hydromécanique** qui consiste à faire communiquer deux codes distincts, l'un pour l'écoulement des fluides et l'autre pour la mécanique des roches. La simulation mécanique utilisée dans ce cas est très proche de ce qui existe pour les études de sols du Génie Civil. Dans le cas des bassins sédimentaires, la simulation mécanique a été adaptée aux grandes déformations et à la gestion de réseaux de failles (voir par exemple [Siavelis 2011]) et un projet de gestion du couplage hydromécanique similaire est en cours à IFPEN.

1.2.3 Difficultés de prédire l'évolution de la porosité

La porosité est un paramètre clé pour évaluer à la fois la pression de pore, la perméabilité de la matrice rocheuse et la déformation de la roche dans le temps. Hélas, il est difficile de formuler une loi générale décrivant son évolution. De multiples **formules empiriques** tentent de l'exprimer en fonction de la profondeur ou de la contrainte effective, mais elles ne restent pertinentes que pour des cas analogues à ceux qui ont permis de les caler.

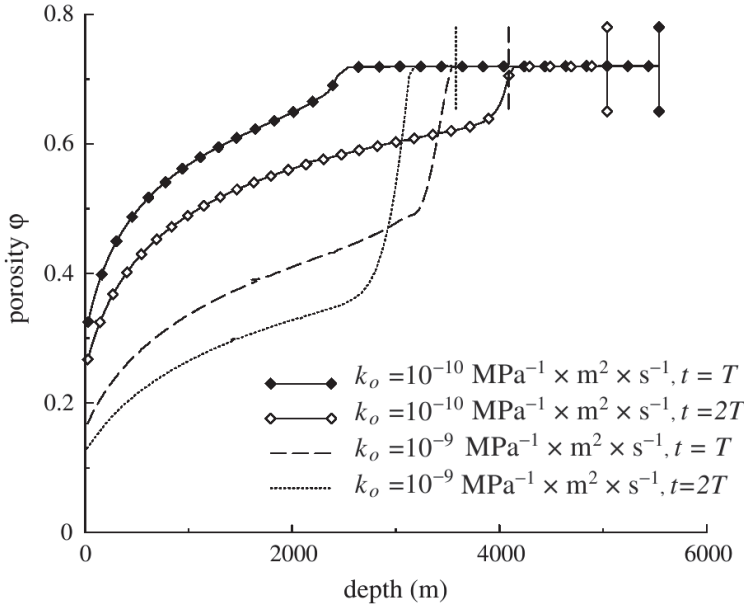


Figure 1.5 – Profils porosité-profondeur calculés pour différentes perméabilités. Source : Bernaud et al. [2006].

Effectivement, les courbes porosité-profondeur présentent une **grande variabilité** (voir par exemple la figure 1.6) car l'évolution de la porosité avec l'enfouissement est sensible à l'histoire du bassin sédimentaire : elle est influencée par la nature de la roche, les sollicitations mécaniques ainsi que les interactions fluide-roche.

Tout d'abord, l'évolution de la porosité diffère suivant les trois grandes catégories de roches : les argilites [1], les roches silico-clastiques et les carbonates.

La porosité initiale (ou *porosité primaire*) dépend des conditions de sédimentation de la roche. Puis, au cours de l'enfouissement de la roche, la porosité de la roche diminue sous l'effet de la **compaction mécanique** induite par les sollicitations mécaniques (contraintes liées à la sédimentation ou aux effets tectoniques). Cela s'accompagne d'une expulsion de l'eau contenue dans la roche de façon à retrouver l'équilibre hydrostatique.

De plus, la porosité est affectée par la **compaction chimique** provoquée par les transformations physico-chimiques liées aux interactions fluide-roche et déclenchées par la pression et la température :

- *la cimentation* : précipitation de matière sur un substrat apportée par un fluide sursaturé. La cimentation réduit progressivement la porosité.
- *la dissolution* : phénomène inverse de la précipitation. Elle peut atteindre le ciment ou les grains emprisonnés. Elle fait apparaître une *porosité secondaire*.
- *l'épigénisation* : changement de cristallinité d'un minéral préexistant sans changement de composition chimique. Par exemple, l'aragonite se transforme en calcite.

1. Les *argilites* sont des roches à forte composition en minéraux argileux. Nous nous permettrons de les appeler *argiles* par la suite.

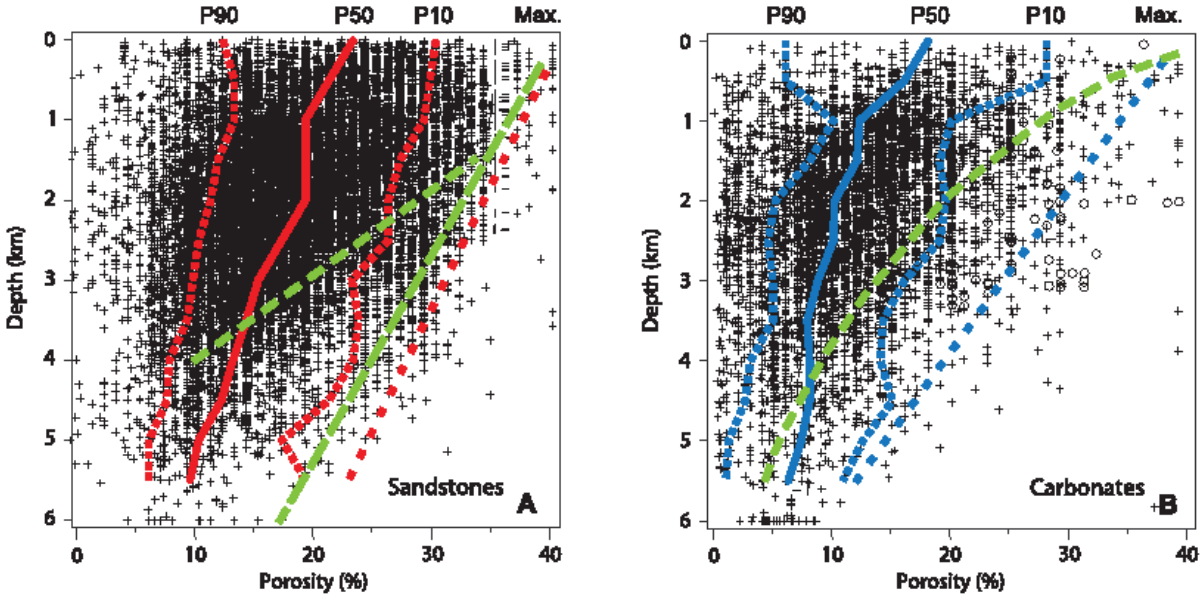


Figure 1.6 – Mesures porosité-profondeur pour des grès (A) et des carbonates (B) et courbes statistiques correspondantes (rouge : grès, bleu : carbonates). Source : Ehrenberg and Nadeau [2005] .

- *la métasomatose* : substitution d'un minéral par un autre sans changement de volume. Par exemple, le carbonate calcique ($CaCO_3$) est parfois remplacé par du sulfate de fer (pyrite).
- *le remplacement* : changement chimique et de cristallinité d'un substrat préexistant. La dolomitisation dite secondaire en est un exemple fréquent, comme la silicification.

L'évolution des propriétés du matériau, en particulier la porosité, est donc très complexe à modéliser. Le chapitre 2 présente les observations et modèles existants utiles à ce sujet de thèse.

1.3 Introduction du sujet

Ce travail s'intitule *Contribution de la mécanique à l'étude des bassins sédimentaires : modélisation de la compaction chimique et simulation de la compaction mécanique avec prise en compte d'effets tectoniques*. Il comporte deux volets qui sont présentés dans cette section :

- l'amélioration du modèle de comportement du géomatériau, afin de décrire la compaction mécanique et chimique par une approche micromécanique
- le développement d'un outil numérique de simulation

1.3.1 Modélisation mécanique et chimique à l'aide de la micromécanique

Les pores de la roche existent à une échelle bien plus petite que celle à laquelle on veut évaluer la déformation de la roche. Néanmoins, la microstructure et son évolution déterminent le comportement du matériau poreux à l'échelle de la maille du bassin.

On fait donc une modélisation des phénomènes à l'échelle microscopique et on en déduit le comportement correspondant à l'échelle macroscopique grâce à une technique d'homogénéisation. Ce comportement homogénéisé permet alors d'estimer l'évolution du matériau et en particulier son changement de porosité.

Dans cette section, nous allons justifier la séparation d'échelles et établir une correspondance entre les phénomènes microscopiques et les observations macroscopiques.

Etude multi-échelle

Dans les cas qui nous intéressent, les bassins (de taille caractéristique L) sont des blocs d'une centaine de kilomètres de côté et jusqu'à une dizaine de kilomètres de profondeur alors que les hétérogénéités de la roche (le diamètre des pores d par exemple) sont généralement situées entre le millimètre et le micron (voir par exemple [Hantschel and Kauerauf 2009]).

Nous définissons alors un *volume élémentaire représentatif* (V.E.R.) qui caractérise la microstructure du matériau. Une étude micromécanique permet d'évaluer les propriétés effectives du V.E.R. et donc de décrire un milieu équivalent appelé *volume élémentaire homogénéisé* (V.E.H.). Ce V.E.H. de taille caractéristique l est choisi suffisamment petit pour servir de brique élémentaire pour les calculs sur le bassin (c'est-à-dire qu'on maille le bassin avec des briques élémentaires de taille caractéristique l) et suffisamment grand par rapport aux hétérogénéités (grains et pores) pour pouvoir être perçu comme un milieu homogène. La dimension l peut donc théoriquement se situer entre le millimètre et la centaine de mètres. Dans la pratique, pour des raisons numériques, on choisit de découper le bassin en mailles d'une dizaine à quelques centaines de mètres de côté et les échantillons étudiés en laboratoires atteignent typiquement quelques centimètres.

Enfin, remarquons qu'à l'échelle microscopique on considère chacune des phases (solide ou fluide) comme un milieu continu. Ceci est dimensionnellement pertinent puisque l'on se place toujours à des échelles bien supérieures à l'échelle moléculaire (où la dimension caractéristique est la distance interatomique δ).

Le figure 1.7 illustre la distinction des échelles considérées :

$$L >> l >> d >> \delta \tag{1.1}$$

notation de la dimension	L	l	d	δ
taille caractéristique	1 - 100 km $[10^3 - 10^5]$m	1 mm - 100m $[10^{-3} - 10^2]$m	1 μm - 1 mm $[10^{-6} - 10^{-3}]$m	1 nm 10^{-9}m

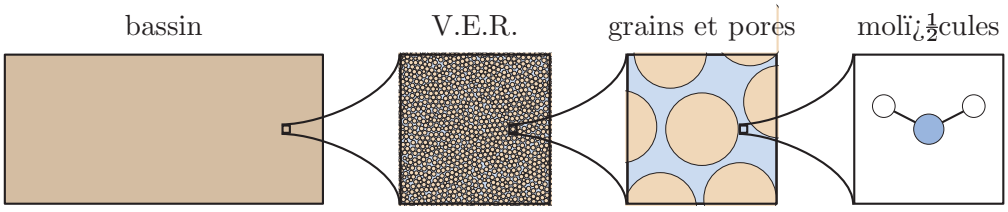


Figure 1.7 – Distinction des échelles d'étude

Perception macroscopique des phénomènes microscopiques

Revenons tout d'abord sur quelques définitions essentielles :
- élasticité : réponse mécanique réversible d'un solide
- plasticité : évolution avec déformation permanente sans fracturation du matériau. On parle de plasticité parfaite quand le domaine plastique est indépendant de l'histoire du chargement du matériau, sinon il y a écrouissage.
- viscosité : évolution qui dépend de la vitesse de déformation (donc dépendante du temps). Dans le cas de la viscosité linéaire, il existe une correspondance fonctionnelle linéaire entre l'histoire des contraintes et l'histoire des déformations.

La compaction mécanique désigne la réorganisation structurelle des roches granulaires et la microfracturation sous l'effet de contraintes compressives. A l'échelle macroscopique, il s'agit de phénomènes irréversibles instantanés dépendant de la contrainte reçue. On modélise donc mécaniquement ce phénomène par de la plasticité.

La compaction chimique désigne principalement la pression-dissolution (mécanismes de dissolution et précipitation). Sous l'effet de la pression, les grains se dissolvent au niveau des points de contact et la partie dissoute de la masse solide se trouve évacuée par le fluide ou reprécitée ailleurs sur la matrice. Il en résulte un changement de géométrie du matériau. A pression constante, ce phénomène varie en fonction de la surface de contact des grains. A l'échelle macroscopique, on perçoit donc une déformation irréversible du matériau qui évolue avec le temps à contrainte fixée. Ce comportement se traduit donc par de la viscosité apparente.

Prédominance des différents types de compaction

On adopte dans cette thèse la vision de [Schmidt and McDonald 1979] selon laquelle une compaction purement mécanique prévaut dans les couches supérieures du bassin tandis que la compaction chimique devient prédominante plus en profondeur (avec l'augmentation de contraintes et de température).

1.3.2 Construction d'un outil de simulation

La mission de cet outil est de :
- résoudre les équations fondamentales tensorielles de la mécanique des milieux continus appliquée aux milieux poreux
- s'appuyer sur un raisonnement micromécanique pour modéliser le comportement du matériau
- intégrer un scénario de sédimentation
- tenir compte de déformations latérales
- gérer de grandes transformations

Enoncé du problème simulé

Notre problème est la compaction d'un domaine sédimentaire en forme de prisme rectangulaire droit reposant sur un socle rigide supposé immobile. Il est soumis à son propre poids et celui de la colonne d'eau le surplombant (de hauteur h) ainsi qu'à des déplacements latéraux tectoniques imposés (voir fig.1.8).

La roche sédimentaire est un matériau homogène poreux complètement saturé. Il est constitué de deux phases : la phase solide, plastiquement incompressible, et la phase fluide (eau), monophasique et incompressible (relativement au solide). La circulation du fluide hors du domaine ne peut se faire qu'à travers le plafond du domaine.

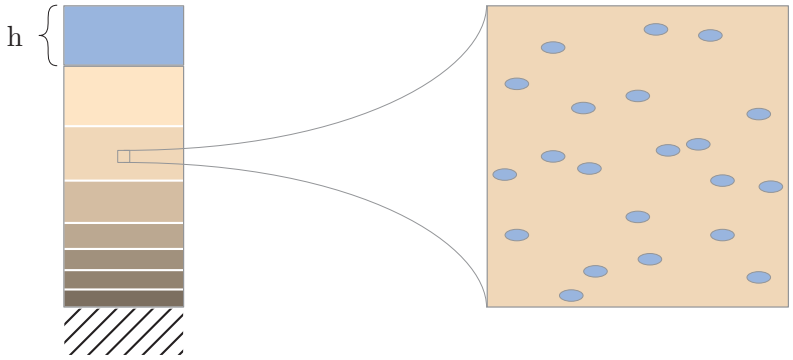


Figure 1.8 – Compaction d'un domaine sédimentaire subaquatique

Une hauteur d'eau h pèse sur le dessus de la colonne sur la surface Γ_t^T.

L'utilisateur fournit une description numérique maillée du domaine d'étude (noté Ω dans toute cette thèse) ainsi qu'un scénario de la sédimentation et de la tectonique. On reçoit ainsi :

- une géométrie discrétisée dans l'espace
- des caractéristiques physiques associées à chaque partie du maillage
- un ensemble d'instants pour lesquels faire un calcul
- la description des conditions aux limites et de l'apport de sédiments à chacun de ces instants

Chaque maille de la géométrie est considérée comme un *Volume Elementaire Homogénéisé* (VEH), c'est-à-dire que le matériau est supposé continu homogène dans tout ce volume, bien que ses propriétés (par exemple, la porosité) tiennent compte de son hétérogénéité à une échelle microscopique. Les équations non linéaires que l'on écrit en tout point du domaine vont alors être résolues (en un ensemble discret de points relatif au maillage) grâce à un algorithme itératif spécifique, et ce pour chaque instant prescrit.

Une fois la simulation terminée, les paramètres et variables solutions peuvent être interpolés sur tout le domaine à partir de leurs valeurs calculées.

données d'entrée (précisées pour chaque instant du scénario)	paramètres calculés (à chaque instant de calcul, en chaque point)
hauteur d'eau type de sédiment déposé hauteur de sédimentation ou d'érosion contraintes latérales à la frontière du domaine flux latéraux à la frontière du domaine	porosité φ déformation $\underline{\underline{\varepsilon}}$ perméabilité $\underline{\underline{\underline{\underline{K}}}}$ pression de pore p contrainte dans la roche $\underline{\underline{\sigma}}$ propriétés élastiques $\mathbb{C}$ propriétés plastiques $\underline{\underline{\varepsilon}}^p$ $\underline{\underline{\sigma}}^p$ J^p

1.3.3 Cadre de travail

Comme on l'a vu, ce travail vise à apporter des améliorations majeures à la modélisation des géomatériaux dans la simulation de bassin. Cependant, on modélise encore un milieu idéalisé, très simplifié par rapport à la réalité. Nous faisons ici le bilan des apports et des limitations de ce travail.

Innovations

- On améliore la modélisation du géomatériau en mettant au point un modèle de comportement homogénéisé qui cherche à intégrer le phénomène de pression-dissolution dans une loi de comportement.
- Une différence fondamentale avec les travaux antérieurs d'IFPEN est que la porosité n'est pas estimée sur une base empirique mais calculée grâce à la résolution d'un problème d'évolution.
- On permet la prise en compte des effets tectoniques au niveau des conditions aux limites et les équations sont formulées de façon tensorielle.
- La formulation numérique est conçue pour gérer un couplage hydromécanique, élasto-plastique, en grandes transformations.

Le recueil de données étant coûteux et complexe, on cherche aussi un compromis entre appréhender avec un maximum de réalisme les paramètres importants à l'exploration et l'exploitation (pression de pore, porosité, perméabilité, contrainte, déformation) et demander un minimum de données.

Limitations de l'étude

On modélise un domaine constitué d'une seule lithologie de composition chimique constante, à géométrie simple (parallélépipède rectangle droit sans faille).

Le matériau est supposé poreux, constitué d'une matrice solide homogène complètement saturée par un fluide monophasique homogène. La phase fluide (eau) est supposée incompressible et la phase solide plastiquement incompressible. Il n'y a pas d'échange de fluide avec l'extérieur par les faces latérales du domaine.

On suppose que l'ensemble du réseau poreux est connecté, et on considère pour le raisonnement micromécanique que les pores sont sphériques à distribution isotrope. Pour être cohérent, on suppose que ces pores sphériques sont reliés entre eux par des canaux dont le diamètre est bien plus petit que le rayon des pores. Ainsi, on suppose que l'influence mécanique de ces canaux est négligeable devant celle des sphères, mais qu'ils permettent d'avoir une perméabilité non nulle.

Dans cette thèse, nous nous concentrerons uniquement sur la variation de porosité due à la compaction mécanique et la pression-dissolution.

1.3.4 Suite de la thèse

Dans le chapitre 2, nous allons d'abord nous concentrer sur la **modélisation mécanique des géomatériaux**. Nous présentons les mécanismes constatés en géologie dont les effets prédominent

aux profondeurs et aux échelles de temps de notre étude : nous verrons donc les facteurs de génération de surpression et les mécanismes associés à la perte de porosité, en particulier la pression-dissolution. Ces observations permettent également de situer les différentes échelles d'étude de la roche. Nous présentons ensuite l'approche poromécanique utilisée ici puis les modèles mécaniques macroscopiques retenus pour notre géomatériau, respectivement pour sa partie fluide et solide. Puis nous introduisons les techniques d'homogénéisation existantes, qui permettent de faire le lien entre les propriétés micromécaniques et les lois d'état macroscopiques. Pour finir, nous présentons des modèles mécaniques existants de compaction mécanique et chimique issus de ces techniques d'homogénéisation.

Dans le chapitre 3, nous introduisons deux nouveaux **modèles micromécaniques de compaction chimique**. Dans le **premier modèle**, le milieu est décrit microscopiquement comme un ensemble de sphères solides rigides possédant une interface élasto-visqueuse. Des propriétés homogénéisées correspondant à ce milieu sont d'abord calculées dans l'espace de Laplace-Carson. Nous en déduisons ensuite les équations d'état dans le domaine temporel (uniquement à court-terme et long-terme, pour des raisons mathématiques). Nous étudions pour finir la réponse du milieu à long-terme dans des conditions oedométriques et discutons des limites de ce modèle. Dans le **deuxième modèle**, le milieu est décrit microscopiquement comme un ensemble de sphères solides élastiques subissant une déformation libre uniforme due à la pression-dissolution (dont l'expression en fonction de la pression et de la contrainte dans le grain est supposée donnée). Après homogénéisation, on obtient une équation différentielle macroscopique pour ce milieu aléatoire. On présente alors une méthode générale pour évaluer numériquement l'évolution du milieu (et qui peut tenir compte de l'ovalisation des grains solides). Nous l'illustrons sur un cas très simplifié permettant une résolution analytique. Enfin un **code de simulation 1D** utilisant un modèle visqueux illustre l'intérêt de modéliser le phénomène de pression-dissolution pour simuler la perte de porosité avec l'enfouissement.

Dans les chapitres 4 et 5, nous travaillons à la conception de l'outil de simulation de compaction mécanique. Le chapitre 4 a pour but de préparer mathématiquement le **système à résoudre**. On introduit le système d'équations hydromécaniques macroscopiques locales à résoudre et les conditions aux limites mixtes associées. Pour le traiter ensuite avec la méthode des éléments finis, nous discrétisons temporellement le scénario de chargement (sédimentation) puis on exprime le système de façon faible relativement à une géométrie passée.

Le chapitre 5 a pour but d'établir une méthode pour **traiter numériquement** le système d'équations final du chapitre précédent. Un algorithme spécifique (utilisant une méthode tangente) est mis en place pour gérer les non-linéarités dues à l'évolution des caractéristiques du matériau et respecter un état plastiquement admissible à tout instant. On présente l'ensemble des termes du système numérique correspondant, ainsi que la façon dont ils sont réactualisés.

Le chapitre 6 fait un **bilan sur l'outil de simulation** qui a été codé selon les méthodes des chapitres 4 et 5. Nous y capitalisons les points de travail résultant des difficultés inopinées. Des cas de validation sont présentés et appuient une discussion des performances et limites actuelles du code. Enfin des perspectives de développement sont proposées afin de poursuivre le développement jusqu'à pouvoir traiter entièrement une étude de bassin soumis à des effets tectoniques.

Certains **calculs** qui risquaient d'alourdir la lecture de ce mémoire sont regroupés en annexes à la fin.

Chapitre 2

Les mécanismes de compaction, des observations aux modèles

Sommaire

2.1 Mécanismes constatés en géologie 22
2.1.1 Génération de surpression 22
2.1.2 Compaction mécanique 24
2.1.3 Pression-dissolution 26
2.2 Modèle mécanique macroscopique 29
2.2.1 Mécanique des fluides 29
2.2.2 Traitement de la plasticité 31
2.2.3 Poroplasticité en transformations finies 32
2.3 Techniques d'homogénéisation micromécanique existantes 32
2.3.1 Description poromécanique 32
2.3.2 Séparation d'échelles 33
2.3.3 Méthodes d'homogénéisation 33
2.3.4 Equations d'état de la poroplasticité issues de la micromécanique 35
2.4 Modèles issus de la micromécanique 35
2.4.1 Modèles de compaction mécanique 35
2.4.2 Modèle de compaction chimique 35

Ce chapitre a pour but d'introduire les modèles de compaction existants en vue de :
- cadrer notre recherche de nouveaux modèles de compaction chimique (chapitre 3)
- justifier les équations d'état sélectionnées pour la simulation de compaction mécanique (section 4.1.1).

Les équations d'équilibre et de conservation de masse fluide échappent par nature au cadre de cette discussion. Nous étudions par contre toutes les autres équations issues de modèles et on essaie en particulier de cerner leur domaine de validité.

Dans la section 2.1, nous rassemblons des **observations naturelles** des phénomènes que l'on veut modéliser (génération de surpression, compactions mécanique et chimique). Puis nous discutons du domaine de validité des **modèles macroscopiques** existants choisis pour décrire les phénomènes de transport advectif ainsi que des équations d'état choisies pour rendre compte du couplage fluide-solide dans le contexte d'un solide se déformant plastiquement (section 2.2). Ensuite, la section 2.3 présente les **techniques d'homogénéisation micromécaniques** existantes qui ont été utilisées notamment pour établir les modèles de compaction mécanique et chimique **issus de la micromécanique** présentés dans la section 2.4.

2.1 Mécanismes constatés en géologie

2.1.1 Génération de surpression

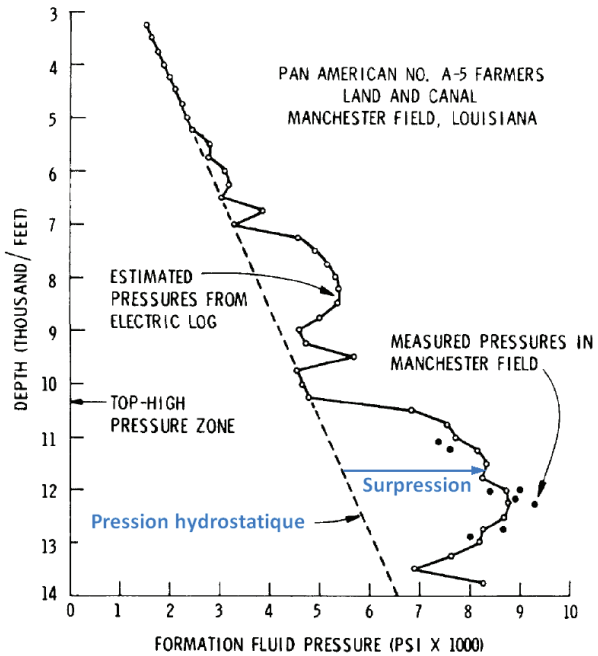
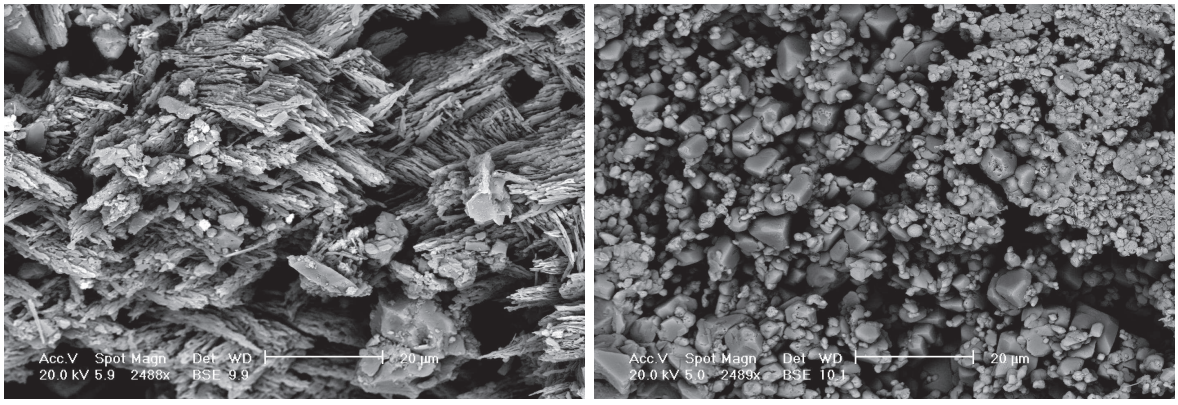


Figure 2.1 – Profil porosité-profondeur évalué sur la côte américaine du Golfe du Mexique présentant des surpressions. Source : Schmidt [1973].

Dans le domaine pétrolier, la *surpression* désigne la différence entre la pression de pore et

la pression hydrostatique[1] (voir figure 2.1). Différents phénomènes peuvent être à l'origine de surpressions :

- **Un déséquilibre de compaction**
  Pendant un épisode de sédimentation, le domaine sédimentaire est soumis à une augmentation de la contrainte lithostatique (le poids des roches sus-jacentes s'accroît). La pression de fluide augmente donc, et si le fluide est libre de circuler, il tendra à s'évacuer afin de retrouver la pression hydrostatique. Il y a donc **compétition entre la vitesse d'expulsion du fluide et la vitesse de sédimentation**.
  Or, plus la perméabilité est faible, plus le temps de diffusion du fluide est grand. Pour une vitesse de sédimentation donnée, il existe donc une perméabilité critique en dessous de laquelle les surpressions se développent.
  Une perméabilité faible peut être due :
  – au type de sédiment : par exemple, une roche argileuse a une structure en feuillets (cf. fig.**??** (a)) qui par nature rend sa perméabilité très faible dans la direction orthogonale à ses feuillets, alors qu'une boue microsparitisée à forte porosité a une structure granulaire qui permet une grande perméabilité (cf. fig.**??** (b)).
  – à une déformation du réseau poreux sous l'effet de la compression
  – au remplissage des pores par la croissance de minéraux ou de la cimentation : par exemple lors d'événements hydrothermaux, si un fluide chargé en ions circule dans le milieu poreux, des minéraux vont précipiter dans l'espace disponible, ou bien encore (sans apport de matière solide cette fois) si la roche se dissout localement, elle peut reprécipiter ailleurs dans le réseau poreux et modifier sa perméabilité.



(a) Feuillets d'une argile (b) Grains d'une boue microsparitisée

Figure 2.2 – Deux structures de roches observées au MEB présentant des perméabilités différentes. Source : Youri Hamon (Données non publiées, IFPEN).

- **La température**

1. La *pression hydrostatique* est la pression d'équilibre qui s'établit dans les pores d'un milieu poreux s'il existe un chemin suffisamment perméable joignant le point d'étude à la surface. C'est aussi la pression qu'on obtiendrait dans une colonne d'eau à la même profondeur.

Sous l'effet d'une élévation de température, le fluide tend à se dilater. A volume de pores constant, on a alors une augmentation de pression.

- **Une source de fluides internes**
  Certaines réactions minérales, comme la transformation de smectite en illite, génèrent de l'eau. La maturation de la roche mère à l'origine d'hydrocarbures transforme un solide en fluide (on parle alors de porosité organique ou porosité secondaire). Dans ces deux cas, il y a une génération de fluide en profondeur et donc le développement de surpressions.
- **Une source de fluides externes**
  Certaines configurations comportent une source de fluide externe. Par exemple, au Brunei, l'infiltration d'eau météorique (eau provenant des précipitations) depuis la zone immergée vers la zone submergée du bassin crée une surpression [Tingay et al. 2009] (voir figure 2.3). En effet, comme l'épaisseur des sédiments est plus importante sur le continent qu'en mer, la pression hydrostatique y est par définition plus importante. La perméabilité du réseau poreux dans le plan horizontal génère une pression d'équilibre plus élevée que la pression hydrostatique dans la zone immergée (donc une surpression). La perméabilité du réseau poreux dans la direction verticale, plus faible, est à l'origine d'un déséquilibre de compaction qui empêche l'évacuation de cette surpression.

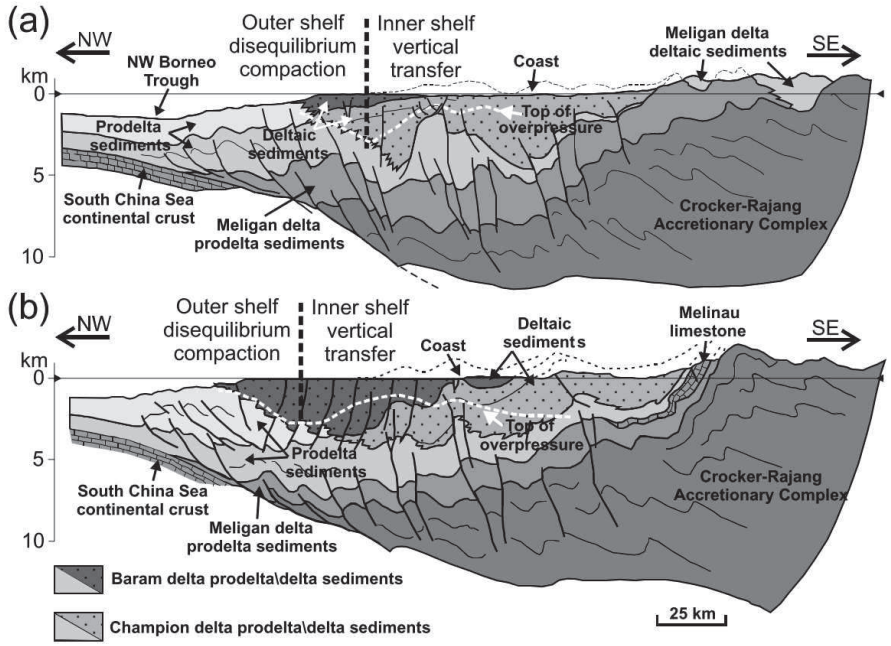


Figure 2.3 – Coupe transversale du Brunei. Source : Tingay et al, 2009 [Tingay et al. 2009]

2.1.2 Compaction mécanique

La compaction mécanique ne suit pas les mêmes processus pour les trois types de roches. Par exemple, les lithologies riches en argiles subissent une perte de porosité au cours de leur

enfouissement à une vitesse supérieure aux lithologies riches en quartz [Giles 1997].

Pour une roche granulaire, la compaction mécanique est générée par deux mécanismes :

- la perte de porosité par remplissage des pores initiaux : il s'agit d'un tassement pur sans fracture des grains, ceux-ci glissant les uns sur les autres au niveau de leurs joints (voir fig. 2.4).
- la micro-fracturation : si la contrainte dans le grain dépasse le seuil de fracturation du matériau le constituant, celui-ci se fracture. La granularité de la roche est alors diminuée et sa porosité et sa perméabilité en sont affectées.

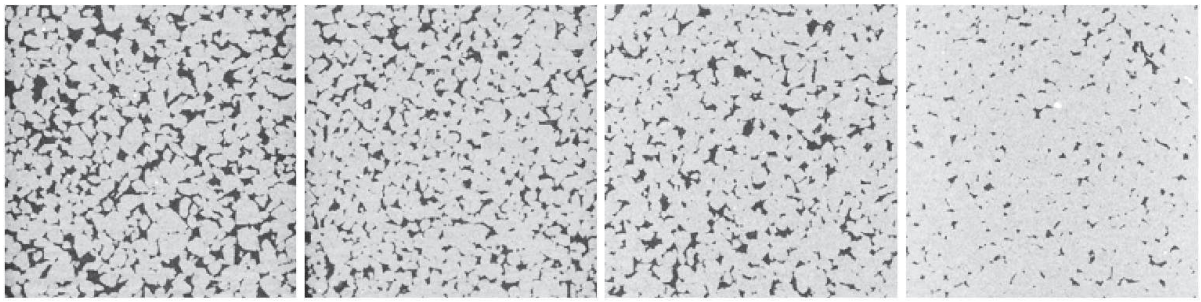
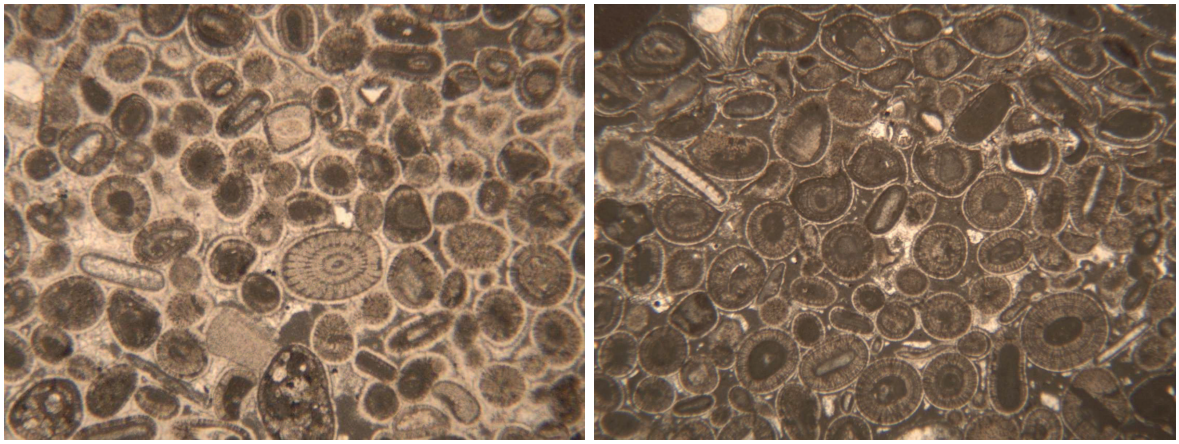


Figure 2.4 – Cartes de densité de quatre échantillons de grès de Fontainebleau présentant (de gauche à droite) des porosités de 21,6%, 14,2%, 12,3% et 6,5%. Source : Youssef et al. [Calgary, Canada, 2007].



(a) Grainstone oolite tassé (b) Grainstone oolite microfracturé

Figure 2.5 – Même type de matériau avec ou sans compaction. Source : Youri Hamon (IFPEN).

La microfracturation est illustrée par les figures 2.5 (a) et (b) : on y observe des lames minces d'un grainstone oolite [2], la figure (a) présentant un tassement pur, la figure (b) présentant en plus de la fracturation de grains.

2. Les *oolites* sont de petites sphères de diamètre de 0,5 à 2 mm en moyenne, dont le centre est un débris

Cette compaction est principalement **irréversible**. Les essais expérimentaux montrent qu'une décompaction n'induit qu'une faible réduction de la déformation : par exemple, un sable non consolidé soumis à un chargement de 10 MPa montre une déformation verticale totale de 0.152 ; cependant, après déchargement, la déformation n'est réduite que de 0.026 [De Waal 1986].

Notons que cette compaction peut aussi s'accompagner d'une création de porosité due à l'apparition de *fentes de tension*, fractures apparaissant parallèlement à la contrainte principale. Ces fentes peuvent se produire à des échelles très variables ; leur largeur est souvent de l'ordre du centimètre, mais dans le cas par exemple d'un volcanisme contemporain de contraintes en traction, des filons volcaniques épais de plusieurs mètres et même de plusieurs dizaines de mètres peuvent les souligner [Mattauer 1973].

2.1.3 Pression-dissolution

Les trois processus

La pression-dissolution englobe trois processus : dissolution, diffusion, précipitation.

La *dissolution* est une mise en solution d'éléments solides solubles dans un fluide (transfert en solution). Les éléments solubles les plus fréquemment présents dans le fluide sont les cations suivants : $Na^+, K^+, Mg^{++}, Ca^{++}$. Ces cations majeurs sont le résultat d'un équilibre roche-solvant. On retrouve les traces de la dissolution principalement dans les roches sédimentaires, en particulier les évaporites (le gypse par exemple), ainsi que les roches carbonatées (calcaire, craie, marbre, travertin...).

Regardons l'exemple des carbonates. Lorsque de l'eau (H_2O) se charge en dioxyde de carbone[3] (CO_2), de l'acide carbonique (H_2CO_3) se forme selon l'eq.(2.1), qui à son tour se dissocie dans l'eau pour former l'ion hydrogénocarbonate (HCO_3^-) selon l'eq.(2.2). Si cette eau acide (pH 6 environ) traverse un carbonate, le carbonate de calcium ($CaCO_3$) qu'il contient est attaqué par l'ion hydronium selon l'eq.(2.3). Ainsi le carbonate de calcium (le minéral de la calcite) passe en solution sous forme d'hydrogénocarbonate de calcium ($Ca^{2+} + HCO_3^-$) qui pourra être transporté par l'eau.

$$CO_{2(g)} + H_2O \leftrightarrow H_2CO_3 \tag{2.1}$$

$$H_2CO_3 + H_2O \leftrightarrow HCO_3^- + H_3O^+ \tag{2.2}$$

$$CaCO_{3(s)} + H_3O^+ \leftrightarrow Ca^{2+}_{(aq)} + HCO_3^- + H_2O \tag{2.3}$$

La *diffusion* (ou lixiviation) désigne l'exportation des ions extraits des minéraux sous forme soluble. Si la diffusion est lente, le fluide va rapidement être saturé par la dissolution et tout le mécanisme de pression-dissolution est ralenti. On distingue deux régimes de dissolution : celui controllé par la surface grain-fluide et celui controllé par la diffusion.

(par exemple des coquilles de foraminifères comme ici) et dont l'enveloppe est formée de minces couches donnant une structure concentrique à laquelle peut se superposer une structure radiaire affectant toutes les enveloppes, ou quelques une seulement [Foucault and Raoult 1995].

3. Ce dioxyde de carbone provient en partie de l'atmosphère mais majoritairement du dioxyde de carbone contenu dans le sol et qui, lui, est d'origine biogénique (respiration des êtres vivants ou décomposition de la matière organique).

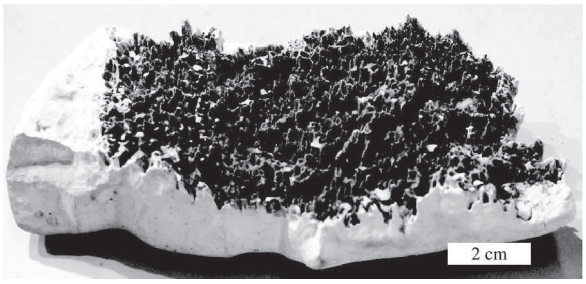


Figure 2.6 – Surface stylolitique. Source : Schmittbuhl et al., 2004 [Schmittbuhl et al. 2004]

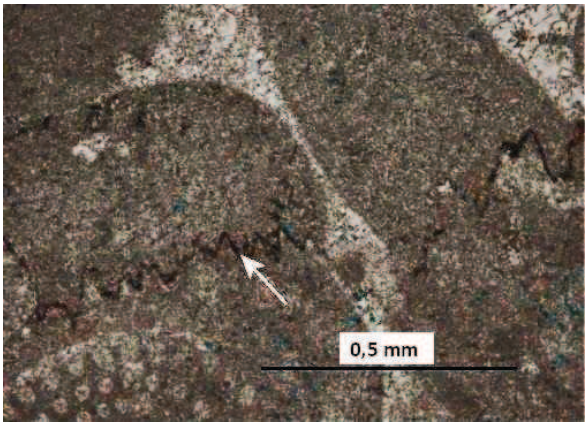


Figure 2.7 – Microstylolite. Source : Youri Hamon

La *précipitation* est la réaction inverse de la dissolution. Elle a lieu lorsque l'eau perd une partie de son dioxyde de carbone (dégazage) ou si une partie de l'eau s'évapore. Les ions calcium précédemment en solution vont précipiter en se transformant en carbonate de calcium. Il se forme une concrétion.

Ces trois processus sont étroitement liés et ont chacun une cinétique propre. On parle souvent de *phénomène limitant* pour désigner le plus lent d'entre eux. C'est alors ce phénomène qui détermine la vitesse de l'ensemble du mécanisme.

Marqueurs de la pression-dissolution

A grande échelle, on peut observer des sites présentant un relief karstique[4] c'est-à-dire une forme de paysage provoquée par l'action de l'eau qui s'infiltre dans le sous-sol de ces régions.

A plus petite échelle, la pression-dissolution se repère par les marqueurs suivants :

- des stylolites (interpénétration de deux domaines de la roche)
- des puits, sur des galets de calcaire notamment
- des grains imbriqués, à contacts concavo-convexes ou suturés (appelés microstylolites) (fig.2.7)
- des surfaces de contact présentant une structure tubulaire (chenaux)
- des foliations

Les *stylolites* sont des discontinuités très irrégulières, hérissées de pointes (pics stylolithiques) et matérialisées par une accumulation de minéraux argileux, d'oxyhydroxydes de fer etc., dans l'interstice (fig.2.6). Ils se forment dans la croûte à faible profondeur dans des roches sédimentaires, préférentiellement les calcaires. Selon une hypothèse répandue (Fuchs, 1894 ; Reiss, 1902 ; Wagner, 1913 ; Stockdale, 1922), les stylolites sont dus à la pression-dissolution et sont donc des structures secondaires qui se développent après consolidation et solidification du matériel sédimentaire. Les stylolites sont même considérés comme "des forces de tension fossiles" [Schmittbuhl et al.

4. Le mot "Karst" vient de "Kras", région de Slovénie où ce relief est présent. Le mot "Kras" fut germanisé en "Karst" lors de l'intégration du pays à l'Empire Austro-hongrois.

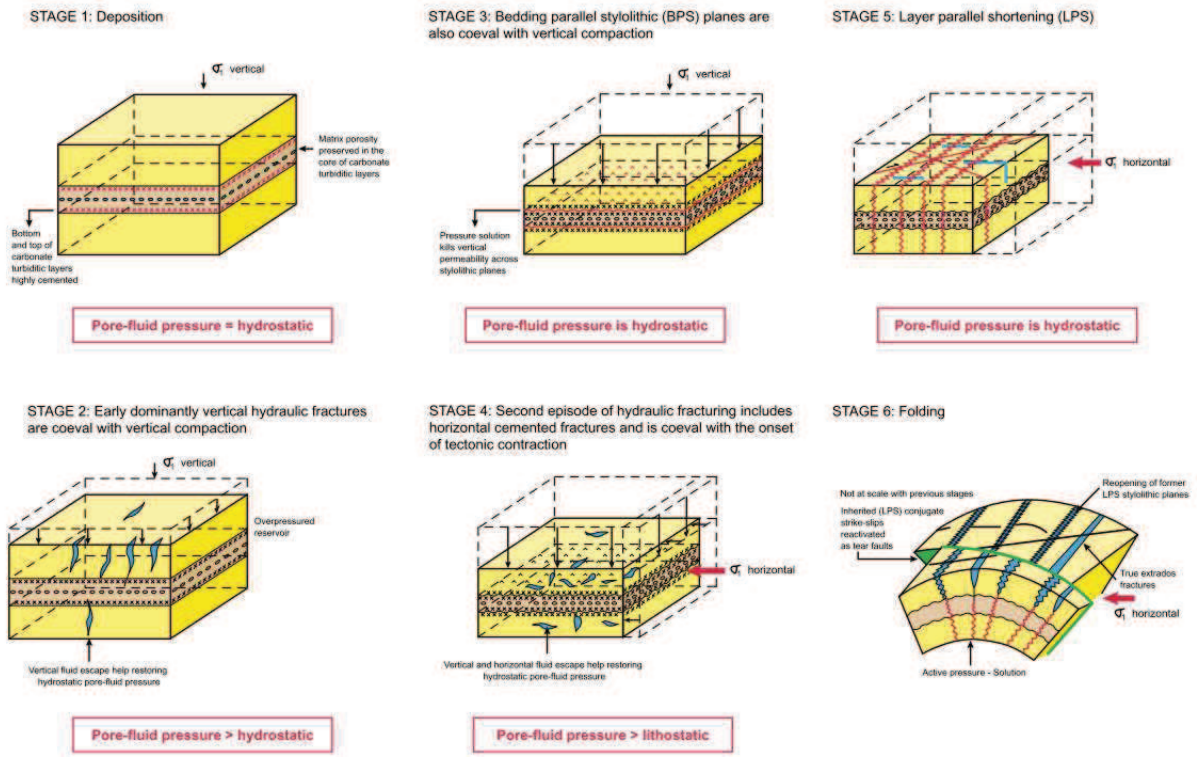


Figure 2.8 – Développement de structures de déformation dans un réservoir carbonaté, notamment des plans de stylolites (LPS). Source : Roure et al, 2005 [Roure et al. 2005]

2004]. En effet, les stylolites sont orientés perpendiculairement à la direction de contrainte la plus compressive et peuvent être associées à des fentes de tension orthogonales. Ainsi les stylolites horizontaux sont dus à la compaction sédimentaire (verticale) tandis que les stylolites verticales sont dues à des effets tectoniques [Roure et al. 2005] (voir fig.2.8).

La formation de *foliation* (structuration en plans distincts des roches métamorphiques) est également attribuée à la pression-dissolution. On suppose en effet que c'est le transfert de matière induit par la pression-dissolution qui permet de réutiliser les minéraux déjà en place (clastes) pour faire apparaître les nouveaux minéraux (blastes). Les clastes finissent par disparaître et donner des feuillets.

Facteurs

Le mecanisme de pression-dissolution est influencé par :

- la profondeur : on observe généralement les effets de la pression-dissolution entre 3 et 8 km de profondeur.
- la taille de grain : les travaux de Houseknecht [Houseknecht 1988] montrent une corrélation linéaire négative entre la taille moyenne des grains et le volume de quartz dissous.
- la température : l'influence de la température a été étudiée indépendamment de la profondeur et de la taille de grain par Houseknecht [Houseknecht 1984], et dans ces conditions,

une température plus élevée dissout un volume plus important de quartz. Par contre, l'évolution de la solubilité avec la température est différente pour le $CaCO_3$.
- la salinité de l'eau
- l'acidité de l'eau : si l'eau pure ne peut dissoudre que 15 mg de calcaire par litre, une eau acide (pH 6 environ) peut en dissoudre jusqu'à 60 à 80 mg par litre. Or l'acidité de l'eau varie avec le taux de CO_2 dissout qu'elle contient, dont la solubilité dépend des conditions de pression et de température (cf fig.2.9 et 2.10).

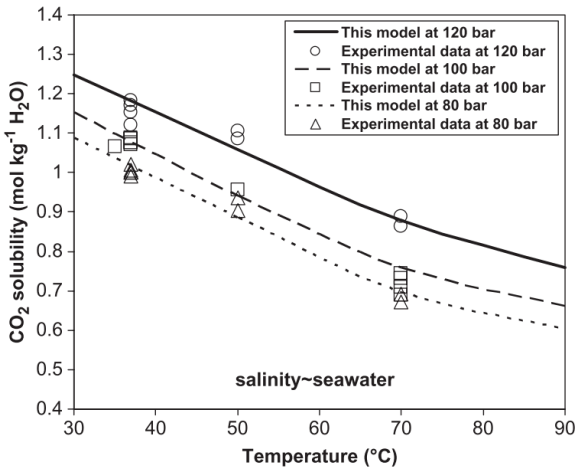


Figure 2.9 – Solubilité du CO_2 en fonction de la température pour des pression de 80, 100 et 120 bar. Source : Portier et Rochelle, 2005 [Portier and Rochelle 2005]

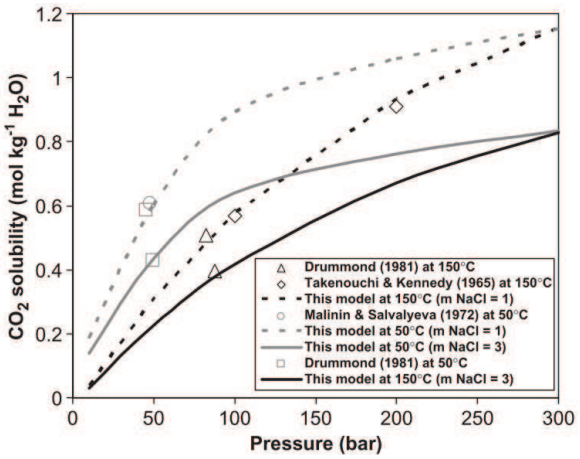


Figure 2.10 – Solubilité du CO_2 en fonction des pressions équivalentes à 1 et 3 m de profondeur, pour des températures de 50 et 150 °C. Source : Portier et Rochelle, 2005 [Portier and Rochelle 2005]

2.2 Modèle mécanique macroscopique

Dans cette thèse, nous ne nous intéressons qu'à la génération de surpression due à l'évolution de la perméabilité des sédiments et à la déformation de la roche lors de l'enfouissement.

Nous avons vu dans la section 2.1.2 que la compaction mécanique est un phénomène instantané quasiment irréversible dépendant de la contrainte reçue. Mécaniquement, on modèle alors le comportement du matériau par de l'élasto-plasticité où la contribution élastique est infinitésimale. La section 2.2.3 décrit ce modèle dans le cas des grandes déformations.

2.2.1 Mécanique des fluides

Transport du fluide

Pour le fluide, l'étude de l'écoulement stationnaire d'un fluide incompressible au travers d'un milieu poreux caractérisé par sa perméabilité $\underline{\underline{K}}$ permet de construire la loi de Darcy pour un écoulement macroscopique ([Ene and Sanchez-Palencia 1975]). Cette loi est énoncée

par l'eq.(4.3) :

$$\frac{\underline{w}}{\rho^f} = \underline{\underline{K}} \cdot (-\underline{grad}\ p + \rho^f \underline{g})$$

où $\underline{\underline{K}}$ est défini comme le tenseur de perméabilité intrinsèque divisé par la viscosité dynamique.

Cette loi atteint ses limites pour des gradients de pression extrêmes (faibles ou forts) :

- dans le cas des argiles compactes, le débit est nul pour de faibles gradients de pression
- la loi de Darcy traduit à l'échelle macroscopique l'écoulement d'un fluide régi à l'échelle microscopique par l'équation de Stokes valable pour un nombre de Reynolds [5] petit : $R_e << 1$. Elle rend compte à l'échelle macroscopique des pertes de charges liées au frottement visqueux sur les parois de la matrice. Or pour un gradient de pression suffisamment grand, la vitesse du fluide sera suffisamment élevée pour que $R_e > 1$. Dans ce cas, les pertes dues au frottement visqueux sur les parois de la matrice et celles dues à l'inertie du fluide ne sont plus négligeables.

Perméabilité

La perméabilité dépend de la nature de la roche. Les roches sédimentaires couvrent un large spectre de perméabilité : depuis des valeurs très faibles (argile : $k < 1\mu D$) aux valeurs élevées (grès : $k \simeq 1D$) [Guéguen and Palciauskas 1992].

Bien qu'il soit "évident qu'aucune relation simple ne puisse exister entre porosité et perméabilité" [Scheidegger 1974], on parvient à ajuster des corrélations satisfaisantes dans certains cas grâce à des constantes empiriques. Effectivement, la perméabilité n'est pas déterminée par la porosité mais par la microstructure de la porosité ; on essaie donc d'exprimer la perméabilité en fonction de la porosité pour des microstructures données.

Pour un matériau de rayon hydraulique $m = V_p/S_p$ (où V_p est le volume de pores et S_p la surface de pores), on considère un milieu équivalent consitué de tubes de rayon m. Pour chacun de ses tubes, la loi de Poiseuille permet d'établir la proportionnalité entre la perméabilité intrinsèque k et la porosité φ : $k \propto m^2\varphi$. De là, la formule de Kozeny-Carman (Kozeny (1927) et Carman (1956)) donne pour le milieu équivalent :

$$k = \frac{\varphi^3}{k_0 \tau^2 S_0^2 (1-\varphi)^2} \tag{2.4}$$

où k_0 : constante décrivant la forme des pores ($k_0 = 2$ pour des pores circulaires) (Carman, 1956)
τ : tortuosité (rapport entre le chemin réellement suivi par le fluide et le chemin apparent)
S_0 : surface spécifique des grains ($S_0 = 6/d_G$ pour des grains sphériques)

Cette loi relie la perméabilité intrinsèque (k) à la porosité du sol (φ) et au diamètre apparent des grains (d_G). Effectivement, comme les contacts entre grains sont ponctuels, la somme des surfaces des pores S_p est égale à la somme des surfaces des grains. Calculé ainsi, le rayon hydraulique m est l'inverse de la surface spécifique S_0. L'expression théorique obtenue est ensuite affectée d'un coefficient adimensionnel (τ) qui prend en compte la structure du sol, la forme des grains et la longueur réelle des lignes de courant (tortuosité) [Cassan 2005].

5. Un nombre de Reynolds petit décrit un flux laminaire. Un nombre de Reynolds élevé décrit un flux turbulent. $R_e = \frac{\rho^f v^f d_P}{\eta^f}$ où v^f est la vitesse réelle du fluide, η^f la viscosité du fluide et d_P est lié à la dimension des pores.

Cette loi a deux limites principales. Premièrement, le matériau poreux comprend en réalité des canaux obturés, zones sans écoulement qui ne peuvent participer à la permeabilité bien qu'elles soient comptabilisées dans la porosité connectée. Deuxièmement, les roches sont parfois constituées de différentes échelles de réseaux de pores. Dans ce cas, les grains, supposés imperméables dans le raisonnement, sont en réalité traversés par un réseau de microfractures par lequel un écoulement préférentiel peut s'établir.

On introduit $\underline{\underline{D}}_K$ la direction de perméabilité. Ce tenseur normé adimensionnel décrit l'anisotropie de la perméabilité. Par exemple, les argiles ont une structure en feuillets (cf fig.**??**) qui génère une forte anistropie de perméabilité : le flux est possible dans le plan des feuillets mais impossible orthogonalement à ces derniers. Dans cette étude, on suppose $\underline{\underline{D}}_K$ constante au cours du temps.

En posant

$$\underline{\underline{K}}_0 = \frac{\varphi_0^3}{(1-\varphi_0)^2}\frac{1}{k_0\tau^2 S_0^2}\underline{\underline{D}}_K \tag{2.5}$$

on obtient :

$$\underline{\underline{K}} = \underline{\underline{K}}_0\Big(\frac{\varphi}{\varphi_0}\Big)^3\Big(\frac{1-\varphi_0}{1-\varphi}\Big)^2 \tag{2.6}$$

D'autres modèles d'estimation de la perméabilité ont été développés, par exemple pour des tubes à section non circulaire (ellitique, triangulaire, rectangulaire, cercle perturbé harmoniquement) [Mortensen et al. 2005], pour des empilements de grains sphériques ou des fibres cylindriques parallèles [Boutin 2000], ou encore un milieu hétérogène à interfaces [Dormieux et al. 2011].

2.2.2 Traitement de la plasticité

A l'état naturel initial, le matériau se situe dans son domaine élastique. Ce domaine est habituellement convexe et évolue avec l'histoire du matériau.

Lorsque le trajet de charge sort pour la première fois de ce domaine, une déformation plastique (notée $\underline{\underline{\varepsilon}}^P$), irréversible, se superpose à la déformation élastique (notée $\underline{\underline{\varepsilon}}^e$). Cette déformation plastique n'est activée que si la charge appliquée au matériau se poursuit. En cas de décharge, seule la déformation élastique évolue.

On associe au matériau une *fonction de charge* (notée f), c'est-à-dire une fonction scalaire du tenseur des contraintes de Cauchy paramétrée par l'état d'écrouissage. Cette fonction définit le *critère de plasticité* (frontière du domaine actuel d'élasticité). Le comportement d'un matériau élastoplastique est ainsi déterminé par son état de contrainte locale :

- si $f(\underline{\underline{\sigma}}) < 0$, le matériau subit une décharge élastique,
- si $f(\underline{\underline{\sigma}}) = 0$, le matériau subit un écoulement plastique.

Pour être plastiquement admissible, l'état de contrainte du matériau doit donc vérifier à tout instant :

$$f(\underline{\underline{\sigma}}) \leq 0 \tag{2.7}$$

Pour quantifier la déformation plastique, on applique une règle d'écoulement plastique. Celle-ci exprime le taux de déformation plastique (noté $\underline{\underline{d}}^P$) :

$$\underline{\underline{d}}^P = \dot{\lambda}\frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \tag{2.8}$$

où λ est le multiplicateur plastique qui vérifie :

$$\dot{\lambda} \geq 0 \tag{2.9}$$

L'évolution du domaine élastique traduit le phénomène d'écrouissage et suit une règle d'écrouissage. Dans notre cas, on considère que la pression de consolidation du matériau détermine l'écrouissage.

2.2.3 Poroplasticité en transformations finies

Comme nous l'avons vu dans la section 2.1.2, le matériau est soumis lors de la compaction mécanique à une déformation de nature élastoplastique et le tassement induit peut être très important puisque la réduction de porosité peut dépasser 50%.

Pour modéliser ce phénomène, nous choisissons d'utiliser le modèle de [Dormieux and Maghous 1999], c'est-à-dire un comportement poroplastique adapté aux grandes déformations grâce aux transformations finies. Nous appliquons leur démarche dans la section 5.1.1.

2.3 Techniques d'homogénéisation micromécanique existantes

L'hétérogénéité de la roche se situe à une échelle bien inférieure à celle du VER : les grains et pores sont inférieurs au millimètre tandis que le VER est de l'ordre de la dizaine de mètres. C'est pourtant l'évolution de la microstructure qui conditionne principalement la déformation observée macroscopiquement. On a alors recours à une technique de changement d'échelle, l'homogénéisation.

On considère un milieu poreux, c'est-à-dire constitué d'une phase solide et d'une phase fluide. Dans toute la suite, on supposera que le fluide est monophasique saturant le réseau de pores et que le solide est un matériau homogène uniforme.

Il existe différentes techniques d'homogénéisation, qui s'appuient sur la même méthodologie générale et des hypothèses structurelles fortes. Certains de ces schémas permettent d'avoir une estimation simple des caractéristiques homogénéisées tandis que d'autres donnent une borne inférieure ou supérieure.

2.3.1 Description poromécanique

A une échelle suffisamment fine, notre milieu poreux saturé apparaît comme un matériau hétérogène constitué de deux phases : l'une solide, l'autre fluide. Cette description est dite *microscopique*.

Comme nous modélisons une roche consolidée (par opposition à une suspension), on suppose que la phase solide est connexe. Le fluide, lui, occupe un espace poreux qui peut être soit connecté, soit occlus. Dans ce dernier cas, le fluide est piégé, c'est-à-dire cinématiquement attaché au constituant solide qui l'emprisonne et on le considère comme partie prenante du squelette. L'espace poreux connecté peut comporter des canaux et des plans d'écoulement à une échelle bien inférieure à l'échelle microscopique. On suppose alors qu'ils n'agissent pas sur le comportement mécanique du milieu poreux mais seulement sur la perméabilité du milieu.

A l'échelle du V.E.H., ce même matériau est perçu de façon homogène (voir fig. **??**). Chaque *particule élémentaire de milieu poreux* (pemp) est ainsi composée d'une superposition de deux particules (solide et fluide). Cette description est dite *macroscopique*.

On appelle *squelette* la perception macroscopique de la phase solide. Le mouvement du squelette est décrit comme celui d'un milieu continu classique et le fluide peut a priori se déplacer librement par rapport au squelette. Pour décrire le mouvement du pemp, on adopte le point de vue propre à la théorie des milieux poreux introduite par Biot [Biot 1941], dit *lagrangien par rapport au squelette*, c'est-à-dire que le mouvement du fluide est rapporté à la position initiale de la particule solide qui coïncide avec la particule de fluide considéré à l'instant étudié.

Ainsi une pemp est toujours constituée de la même particule de squelette et donc de la même masse solide. En revanche, en raison du mouvement relatif de fluide par rapport au squelette, la masse de fluide contenue dans la pemp varie.

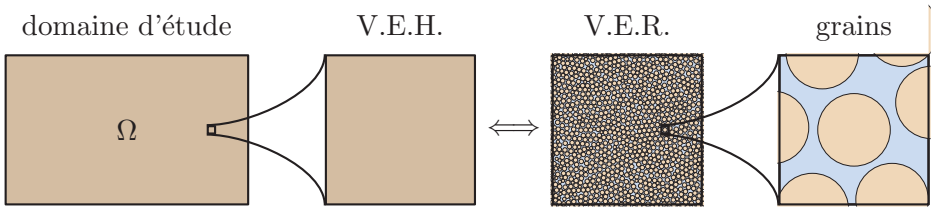


Figure 2.11 – Les différents points de vue du matériau

2.3.2 Séparation d'échelles

Pour que les représentations adoptées soient pertinentes, il faut qu'on puisse distinguer nettement les différentes échelles. En effet, pour pouvoir traiter le VER comme un milieu continu, il faut que la dimension caractéristique du VER (l) soit très petite devant la dimension caractéristique du bassin (L). Et pour pouvoir caractériser le comportement du VER par une loi homogène équivalente, il faut que la dimension caractéristique des hétérogénéités (d) soit très petite devant la dimension caractéristique du VER (l). On doit donc respecter la séparation d'échelle suivante :

$$d << l << L \tag{2.10}$$

Comme vu dans la section 1.3.1, on essaie de respecter cette séparation d'échelles dans les cas étudiés.

2.3.3 Méthodes d'homogénéisation

L'homogénéisation a pour objectif de déterminer le comportement mécanique effectif d'un matériau hétérogène en fonction des propriétés des constituants du matériau et d'informations géométriques. On distingue deux approches : l'approche *aléatoire* et l'approche *périodique*. Cette dernière est adaptée aux matériaux à structure périodique connue. Elle est donc particulièrement efficace pour traiter les matériaux synthétiques réguliers (matériaux composites ou tissés par exemple). Dans notre application géologique, on s'intéresse à des matériaux pour lesquels la composition minéralogique est bien étudiée mais dont la morphologie est irrégulière. Par conséquent,

on privilégie le choix de l'approche aléatoire dans la suite. La description de la géométrie est alors réduite à ses caractéristiques structurelles, par exemple un matériau à matrice (une phase englobe toutes les autres) ou un milieu désordonné (chaque élément a une orientation spécifique).

La démarche classique consiste à évaluer la réponse d'un milieu hétérogène soumis à une déformation ou contrainte uniforme au contour (conditions aux limites de Hashin) connaissant le comportement du milieu à l'échelle locale [Zaoui 2000]. Ce problème peut être formulé comme la recherche soit de la déformation macroscopique ($\underline{\underline{\varepsilon}}$) correspondant à des conditions aux limites uniformes en contraintes ($\underline{\underline{\sigma}}^d$), soit de la contrainte macroscopique ($\underline{\underline{\sigma}}$) correspondant à des conditions aux limites uniformes en déformations ($\underline{\underline{\varepsilon}}^d$). Dans le cas de l'élasticité linéaire des phases, la relation obtenue entre $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{\sigma}}$ détermine le comportement homogénéisé ($\mathbb{C}$) :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}} \tag{2.11}$$

En appliquant la méthodologie proposée dans [Zaoui 2000], on procède en trois étapes :
- la *représentation*, qui permet de décrire le matériau à l'échelle microscopique,
- la *localisation*, qui permet d'établir les relations reliant les grandeurs définies à l'échelle microscopique ($\underline{\underline{\varepsilon}}_m$ et $\underline{\underline{\sigma}}_m$) à celles définies à l'échelle macroscopique ($\underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{\sigma}}$) (voir figure 2.12),
- l'*homogénéisation*, qui permet de calculer des caractéristiques macroscopiques et d'identifier le comportement macroscopique à partie des résultats des étapes précédentes en recourant à une opération de moyenne.

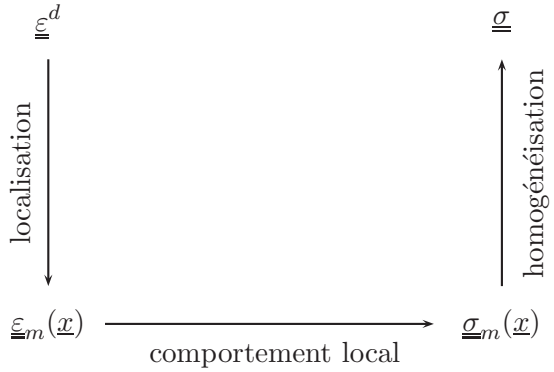


Figure 2.12 – Démarche d'une étude micromécanique avec conditions aux limites uniformes en déformation.

Pour chaque type d'hétérogénéité, il faut un schéma d'homogénéisation adapté. Dans la suite, nous utilisons un schéma *auto-cohérent* (schéma introduit par Hershey [1954] puis reformulé par Hills [1965]) : il suppose que chaque particule du milieu est entourée les autres phases et donc par le milieu homogène équivalent.

Il est possible de traiter des combinaisons de différentes familles d'hétérogénéités. C'est ce qui est fait notamment dans *getup*, une bibliothèque en C++ de l'IFPEN qui est capable d'estimer les

caractéristiques homogénéisées d'un VER contenant des familles de fractures et/ou des inclusions ellipsoïdes. On peut aussi prendre en compte une anisotropie de distribution d'hétérogénéités [Willis 1995].

Ces méthodes sont introduites de façon plus complète dans [Dormieux et al. 2006] par exemple.

2.3.4 Equations d'état de la poroplasticité issues de la micromécanique

On retrouve avec la micromécanique les résultats de la poroplasticité initialement établis avec une approche énergétique (voir par exemple [Coussy 1991]).

Dans le cadre de la poroélasticité linéaire isotrope athermique, les équations d'état macroscopiques générales du milieu poreux s'écrivent ([Auriault and Sanchez-Palencia 1977], [Dormieux et al. 2006]) :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}} - p\underline{\underline{B}} \tag{2.12}$$

$$\underline{\underline{B}} = \underline{\underline{1}} : (\mathbb{I} - \mathbb{C}^{s-1} : \mathbb{C}) \tag{2.13}$$

$$\mathbb{C} = (1-\varphi)\mathbb{C}^s :< \mathcal{A} >_{\Omega^s} \tag{2.14}$$

$$\phi - \phi_0 = \underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\varepsilon}} + \frac{p}{N} \tag{2.15}$$

On note $\underline{\underline{B}}$ le tenseur de Biot. Ce paramètre a initialement été défini avec une approche énergétique. Nous le caractérisons ici grâce à la micromécanique.

Dans le cadre de la poroplasticité isotrope athermique (voir par exemple [Deudé 2002]), l'évolution du matériau est caractérisée par :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}^e - p\underline{\underline{B}} \tag{2.16}$$

$$\phi^e - \phi_0 = \underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\varepsilon}} + \frac{p}{N} \tag{2.17}$$

où $\underline{\underline{\varepsilon}}^e$ est la partie élastique de la déformation et ϕ^e la contribution élastique de la porosité.

2.4 Modèles issus de la micromécanique

2.4.1 Modèles de compaction mécanique

Dans le modèle de [Gurson 1977], le matériau poreux est modélisé par un ensemble de pores sphériques dans une matrice parfaitement plastique qui suit le **critère de plasticité de Von Mises**. Gurson obtient alors une borne supérieure pour approximer le critère de plasticité du matériau.

L'homogénéisation de Gurson est reprise par [Guo et al. 2008] avec une matrice qui suit le **critère de plasticité de Drucker-Prager**. A la différence du précédent modèle, la matrice est alors plastiquement compressible et une réduction de la taille des pores est ainsi modélisée.

2.4.2 Modèle de compaction chimique

Dans la littérature actuelle, il existe différentes appréhensions du phénomène de dissolution. Une étude bibliographique complète détaille l'état des connaissances du transfert en solution [Rakotoniriana 2005]. Nous ne n'abordons ici que quelques points intéressants pour notre étude.

Modélisation locale : la pression-dissolution inter-granulaire

Différents modèles ont été proposés pour des descriptions de surface de grain différentes.

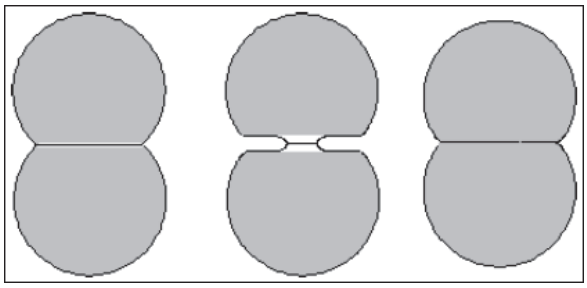
Le modèle de [Bathurst 1958] (illustré en fig.**??**) est un modèle de **dissolution marginale** : les deux grains sont parfaitement en contact et la dissolution ne se produit qu'en périphérie de cette surface de contact. Il n'y a pas de diffusion dans le contact.

Grâce à des analyses pétrographiques, un **film fluide** est découvert dans la zone de contact entre les deux grains [Weyl 1959] (illustré en fig.**??**). Renard associe alors dans un même modèle la dissolution du solide dans ce film et la diffusion des minéraux dissous vers le pore. Ce film est si fin - son épaisseur est de l'ordre du nanomètre [Ghoussoub 2000]- qu'il s'agit en fait d'un film adsorbé. Ce modèle a notamment permis de modéliser les interactions entre la pression-dissolution et les processus fragiles dans les zones de faille [Gratier et al. 2009].

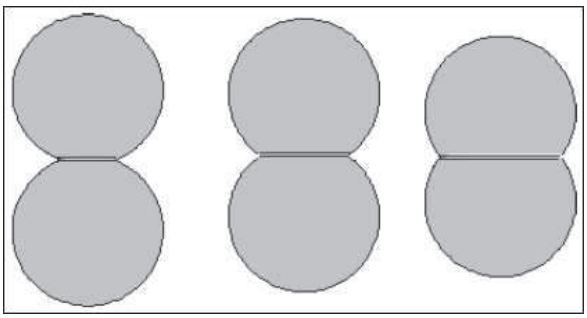
Dans le modèle de [Spiers and Schutjens 1990] (illustré en fig.**??** et fig.**??**), la zone de contact où a lieu la dissolution est décrite comme un **réseau d'îles et chenaux**, Les îles sont les points de contact des grains et les chenaux sont les chemins privilégiés de circulation du fluide. A l'opposé du film adsorbé du précédent modèle, les chenaux sont suffisamment grands pour que le fluide ait les propriétés d'une masse liquide. La structure de cette zone de contact évolue dynamiquement avec la dissolution.

Il a été observé que la dissolution du quartz est plus lente que la cinétique calculée pour le modèle des surfaces libres. Avec le modèle de surface en îles et chenaux, la vitesse moyenne de dissolution calculée est diminuée de 13% par rapport au modèle de surface avec film adsorbé. De plus, ce modèle permet de définir une contrainte seuil en dessous de laquelle la dissolution est rendue impossible à cause de la réduction de l'espace de contact grain-grain. Ceci permet de justifier la diminution ou cessation de la pression-dissolution observée expérimentalement [van Noort et al. 2008].

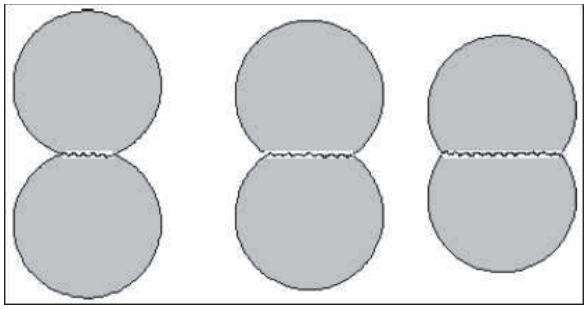
Le modèle de pression-dissolution intergranulaire que nous retenons ici intègre la plupart des résultats précédents. Il s'agit du modèle donné par [Lehner and Leroy 2003] qui exprime la vitesse de convergence de deux grains $[\![v_n]\!]$ immergés dans un fluide à la pression p et exerçant



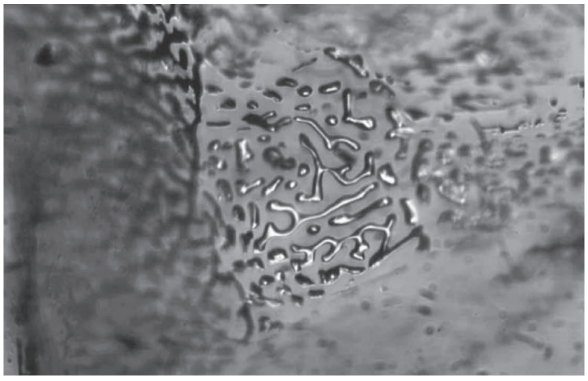
(a) Modèle de Barthurst.
Source : Rakotoniriana [2005]



(b) Modèle de Weyl.
Source : Rakotoniriana [2005]



(c) Modèle de Spiers.
Source : Rakotoniriana [2005]



(d) Surface de contact d'un grain présentant un réseau d'îles et chenaux.
Source : Ghoussoub and Leroy [2001]

Figure 2.13 – Modèles locaux de pression-dissolution

l'un sur l'autre une contrainte $\underline{\underline{\sigma}}$:

$$[\![v_n]\!] = d\Big(\frac{\rho^s \mathcal{V}^s}{\kappa T}\frac{< \sigma_n > + p}{\rho^s} + \frac{C - C_{eq}}{C_{eq}}\Big)\Big(\tau_S + 4\frac{a^2}{d^2}\tau_D\Big)^{-1} \tag{2.18}$$

où l'on note

d	:	diamètre initial des grains
ρ^s	:	densité des grains
$\mathcal{V}^s$	:	volume moléculaire du solide
κ	:	constante de Boltzmann
T	:	température
$< \sigma_n >$	:	moyenne de la contrainte $\underline{\underline{\sigma}}$ selon la normale au plan de contact
p	:	pression de pore
C	:	concentration en soluté dans le pore
C_{eq}	:	concentration d'équilibre (fraction massique)
a	:	rayon du disque de contact
τ_S	:	temps caractéristique de la dissolution intergranulaire
τ_D	:	temps caractéristique de la diffusion à la frontière du grain

Cette formule nous permet de déduire un taux de dilatation visqueuse $\dot{\lambda}^v$ dans la direction normale à la surface de contact des grains :

$$\dot{\lambda}^v = \frac{[\![v_n]\!]}{d} \tag{2.19}$$

Modélisation macroscopique de la pression-dissolution

Des modèles mathématiques ou expérimentaux ont été développés pour estimer l'évolution de la porosité sous l'action de la pression-dissolution et ont été ensuite utilisés pour tenir compte de la pression-dissolution à l'aide de termes visqueux dans les équations d'état du matériau : [Laubsher 1975],[Fletcher 1982],[Schneider, F. et al. 1994], [Schneider et al. 1996], [Schneider and Hay 2001], [Lehner and Leroy 2003],[Maghous 2009b].

Toutes ces théories traduisent la dépendance temporelle de la pression-solution par une fonction temporelle de la porosité en fonction de la contrainte effective verticale.

Enfin, notons que l'observation de la dissolution d'un monocristal de gypse **à l'échelle atomique** a récemment permis d'établir que les mécanismes à cette échelle obéissent aux mêmes lois thermodynamiques que le phénomène macroscopique [Pachon-Rodriguez et al. 2011].

Chapitre 3

Nouveaux modèles de compaction chimique

Sommaire

3.1 Modèle de sphères à interface élasto-visqueuse 40
3.1.1 Description microscopique 40
3.1.2 Introduction d'un problème élastique équivalent 41
3.1.3 Homogénéisation du milieu aléatoire dans l'espace de Laplace-Carson . 42
3.1.4 Equations d'état dans le domaine temporel 44
3.1.5 Réponse à un échelon dans l'espace temporel 46
3.1.6 Discussion 49
3.2 Approche en déformation libre 50
3.2.1 Objectifs 50
3.2.2 Homogénéisation du milieu aléatoire 50
3.2.3 Procédé de résolution 52
3.2.4 Modèle rhéologique dans une configuration simplifiée 55
3.2.5 Etude oedométrique dans une configuration simplifiée 55
3.2.6 Conclusion 57
3.3 Cas numérique unidimensionnel 58
3.3.1 Traitement simplifié 58
3.3.2 Résultats de simulation 59
3.3.3 Conclusion 61

Dans ce chapitre, nous cherchons à estimer **comment le phénomène local de pression-dissolution à l'échelle microscopique engendre un comportement différé dans l'équation d'état macroscopique**. Pour cela, deux approches faisant appel aux techniques d'homogénéisation aléatoires fondées sur des représentations microscopiques différentes ont été tentées :

- dans le **premier modèle**, le milieu est décrit microscopiquement comme un ensemble de sphères solides rigides possédant une interface élasto-visqueuse.
- dans le **deuxième modèle**, le milieu est décrit microscopiquement comme un ensemble de sphères solides élastiques subissant une déformation libre uniforme due à la pression-dissolution (dont l'expression en fonction de la pression et de la contrainte dans le grain est supposée donnée).

A la fin de ce chapitre, on illustre avec un **code de simulation 1D** utilisant un modèle visqueux l'intérêt de modéliser le phénomène de pression-dissolution pour simuler la perte de porosité avec l'enfouissement.

Rappelons que la compaction chimique se passe à des échelles de temps plus rapides que la sédimentation (voir section 1.2.1). Or les incréments de temps utilisés dans la simulation sont dimensionnés pour suivre la sédimentation. Par conséquent, on considère qu'on résout un **problème de compaction chimique à long-terme** à chaque incrément de temps du scénario de sédimentation. Lorsqu'une simplification semble nécessaire, on se permettra de supposer que pour chaque instant de calcul donné, la configuration reste fixe : les grains gardent leur forme initiale, sont agencés selon la même structure spatiale et la porosité reste constante.

Comme la participation chimique de la compaction est négligeable dans les faibles profondeurs, on se permettra aussi de restreindre le cadre de travail aux porosités inférieures à 1/2 si nécessaire.

3.1 Modèle de sphères à interface élasto-visqueuse

3.1.1 Description microscopique

Dans cette première approche, le milieu est décrit d'un point de vue microscopique comme un ensemble de sphères solides rigides de rayon R à distribution spatiale aléatoire, enrobées chacune d'une enveloppe concentrique (appelée interface [1]) d'épaisseur uniforme infinitésimale e (voir fig.3.1). L'espace poreux est supposé saturé d'un fluide monophasique uniforme.

On attribue à l'interface des propriétés élasto-visqueuses constantes uniformes : une viscosité normale k_n caractérisant la réponse en dissolution du matériau soumis à une contrainte compressive et une élasticité tangentielle k_t correspondant au frottement sans glissement des grains les uns sur les autres.

$$T_t = k_t \xi_t \tag{3.1}$$
$$T_n = k_n \dot{\xi}_n \tag{3.2}$$

1. Cette interface peut rappeler le film adsorbé observé par Weyl [1959] (voir section 2.4.2).

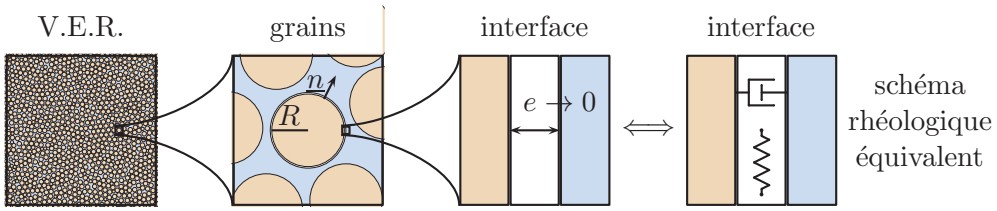


Figure 3.1 – Illustration du modèle microscopique et schéma rhéologique équivalent de l'interface

3.1.2 Introduction d'un problème élastique équivalent

Pour traiter ce milieu visco-élastique, nous nous ramenons à **un milieu élastique équivalent dans l'espace de Laplace-Carson** (comme Salençon [2009]). Passer de l'espace temporel à l'espace de Laplace-Carson se fait en appliquant la transformée de Carson (notée $\mathcal{C}$) que nous introduisons succintement ici.

La définition de $\mathcal{C}$ requiert celle de la transformation de Laplace (notée $\mathcal{L}$). Dans les cas que nous rencontrerons, la transformée $\mathcal{L}_f$ d'une fonction f dépendant du temps est une fonction de τ telle que :

$$\forall f : t \in \mathbb{R} \mapsto f(t) \in \mathbb{R} \qquad \mathcal{L}_f : \tau \in \mathbb{R} \mapsto \mathcal{L}_f(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \exp(-\tau t) dt \in \mathbb{R} \tag{3.3}$$

Nous étoilons les quantités exprimées dans l'espace de Laplace-Carson. Nous notons donc dans cet exemple-ci $f^\star$ la transformée de Carson de f.

Par définition, la transformation de Carson est telle que :

$$f^\star(\tau) = \mathcal{L}_{\dot{f}}(\tau) = \tau \mathcal{L}_f(\tau) \tag{3.4}$$

Les propriétés de $\mathcal{L}$ nous donnent alors :

$$\lim_{t \to +\infty} f(t) = \lim_{\tau \to 0^+} f^\star(\tau) \tag{3.5}$$

$$\lim_{t \to 0^+} f(t) = \lim_{\tau \to +\infty} f^\star(\tau) \tag{3.6}$$

L'intérêt essentiel réside dans l'équation (3.4) : **dériver par rapport au temps revient à multiplier par le paramètre τ dans l'espace de Laplace-Carson**. Ainsi les équations qui relient la contrainte appliquée à l'interface et son déplacement, exprimées par les équations (3.2) et (3.2) dans l'espace temporel, deviennent des relations affines dans l'espace de Laplace-Carson :

$$T_t^\star = k_t \xi_t^\star \tag{3.7}$$

$$T_n^\star = \tau k_n \xi_n^\star \tag{3.8}$$

En définissant $k_t^\star = k_t$ et $k_n^\star = \tau k_n$, cela revient à un problème purement élastique.

3.1.3 Homogénéisation du milieu aléatoire dans l'espace de Laplace-Carson

Mise en équations

Ce problème d'homogénéisation élastique linéaire se résout comme un **problème d'Eshelby classique**. Comme on travaille avec un milieu isotrope, le comportement de la matrice s'écrit $\mathbb{C} = 3\mu\mathbb{K} + 2k\mathbb{J}$ où on note k et μ les coefficients de Lamé de la matrice. De même on travaille avec k_{hom} et μ_{hom} pour le milieu homogénéisé (voir fig.(3.2)).

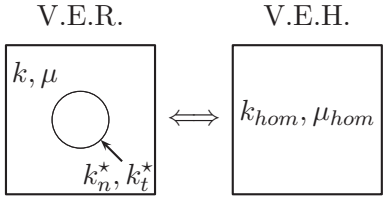


Figure 3.2 – Paramètres de notre problème d'Eshelby

Tous calculs faits, on obtient ainsi :

$$k_{hom} = \frac{4}{3}\frac{Rk_n^\star(1-\varphi)\mu}{4\mu + Rk_n^\star\varphi} \tag{3.9}$$

$$\begin{aligned}\mu_{hom} = \frac{1}{2}\Big[&(1-\varphi)\Big(8\mu(2k_n^\star + 3k_t^\star) + 5Rk_n^\star k_t^\star\Big)R\mu(9k+8\mu)\Big]\Big[8\mu^2\Big(2Rk_t(1+9\varphi)+45k\Big)\\ &+6(1+4\varphi)(4k_n\mu + 3k_tk)R\mu + 3Rk_nk(9+16\varphi) + 15\varphi R^2k_nk_t(k+2\mu)\Big]^{-1}\end{aligned} \tag{3.10}$$

Pour terminer la résolution, on choisit un **schéma d'homogénéisation auto-cohérent**, c'est-à-dire qu'on pose $k = k_{hom}$ et $\mu = \mu_{hom}$ (que l'on note désormais $k_{ac}^\star$ et $\mu_{ac}^\star$ respectivement). Les équations (3.9) et (3.10) peuvent alors s'écrire sous la forme :

$$k_{ac}^\star = F_k(\mu_{ac}^\star) \tag{3.11}$$

$$\mu_{ac}^\star = F_\mu(k_{ac}^\star, \mu_{ac}^\star) \tag{3.12}$$

En utilisant l'équation (3.11) dans l'équation (3.12), $\mu_{ac}^\star$ apparaît comme la solution de l'équation polynomiale de degré 3 suivante :

$$\begin{aligned}&128{\mu_{ac}^\star}^3\\ +\ &16\Big((3\varphi+2)Rk_n^\star + 2Rk_t^\star(3\varphi-1)\Big){\mu_{ac}^\star}^2\\ +\ &2Rk_n^\star\Big(2Rk_t^\star(12\varphi-5) + 3Rk_n^\star(3\varphi-1)\Big)\mu_{ac}^\star\\ +\ &3R^3{k_n^\star}^2k_t^\star(2\varphi-1) = 0\end{aligned} \tag{3.13}$$

Pour résoudre analytiquement cette équation, nous nous proposons de la dégénérer en la considérant uniquement dans deux configurations extrêmes : à court-terme ($t \to 0$, $\tau \to \infty$) et à long-terme ($t \to \infty$, $\tau \to 0$). En effet, dans ces configurations, l'équation (3.13) se dégrade en

une équation polynomiale de degré 2 dont la résolution ne pose pas de difficulté. Bien que seul le résultat à long-terme est recherché pour une application numérique, nous étudions aussi le résultat à court-terme pour valider ou infirmer le modèle.

Afin d'écrire l'équation (3.13) pour des valeurs limites de τ, on fait réapparaître ce paramètre en remplaçant $k_t^\star = k_t$ et $k_n^\star = \tau k_n$. De plus, l'introduction des notations adimensionnelles X et $\bar{\tau}$ définies ci-dessous permet de réécrire l'équation (3.13) en l'équation (3.15) :

$$X = \frac{4\mu_{ac}^\star}{Rk_t} \quad et \quad \bar{\tau} = \tau \frac{k_n}{k_t} \tag{3.14}$$

$$\begin{aligned} & 4X^3 \\ + \; & 2\Big(\bar{\tau}(3\varphi+2) + 2(3\varphi-1)\Big)X^2 \\ + \; & \Big(2\bar{\tau}(12\varphi-5) + 3\bar{\tau}^2(3\varphi-1)\Big)X \\ + \; & 6\bar{\tau}^2(2\varphi-1) = 0 \end{aligned} \tag{3.15}$$

C'est cette dernière équation dont on évalue la solution à court-terme et long-terme. Pour cela, on fait tendre $\bar{\tau}$ respectivement vers 0 et l'infini puisqu'on a défini une relation affine entre $\bar{\tau}$ et τ. Le détail des calculs est en annexe (A).

Comportement homogénéisé exprimé dans l'espace de Laplace-Carson

La solution de l'eq.(3.15) exprimée comme un développement limité en $\bar{\tau}$ permet d'écrire les développements limités de $\mu_{ac}^\star$ et $k_{ac}^\star$ grâce aux relations suivantes (respectivement issues de la définition de X et de l'équation (3.11)) :

$$\mu_{ac}^\star = \frac{Rk_t}{4}X \quad et \quad k_{ac}^\star = \frac{4}{3}\frac{Rk_n^\star(1-\varphi)\mu_{ac}^\star}{4\mu_{ac}^\star + Rk_n^\star\varphi} \tag{3.16}$$

En utilisant les résultats de l'annexe (A), on peut alors écrire :

A court-terme ($t \to 0$, $\bar{\tau} \to \infty$) :

$$\varphi \leq \frac{1}{3} \quad \left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{\mu_{ac}^\star}{\bar{\tau}} & = & \dfrac{Rk_t}{4}\Big(Y_0 + \dfrac{Y_1}{\bar{\tau}}\Big) + \mathcal{O}\Big(\dfrac{1}{\bar{\tau}^2}\Big) \\ \dfrac{k_{ac}^\star}{\bar{\tau}} & = & \dfrac{Rk_t}{3}\dfrac{1-\varphi}{\varphi+Y_0}\Big(Y_0 + \dfrac{Y_1}{\bar{\tau}}\dfrac{\varphi}{\varphi+Y_0}\Big) + \mathcal{O}\Big(\dfrac{1}{\bar{\tau}^2}\Big) \end{array} \right. \tag{3.17}$$

$$\frac{1}{3} < \varphi < \frac{1}{2} \quad \left\{ \begin{array}{rcl} \mu_{ac}^\star & = & \dfrac{Rk_t}{4}\Big(X_0 + \dfrac{X_1}{\bar{\tau}}\Big) + \mathcal{O}\Big(\dfrac{1}{\bar{\tau}^2}\Big) \\ k_{ac}^\star & = & \dfrac{Rk_t}{3}\dfrac{1-\varphi}{\varphi}\Big(X_0 + \dfrac{1}{\bar{\tau}}(X_1 - \dfrac{X_0^2}{\varphi})\Big) + \mathcal{O}\Big(\dfrac{1}{\bar{\tau}^2}\Big) \end{array} \right. \tag{3.18}$$

avec
$$Y_0 = \frac{1-3\varphi}{2} \tag{3.19}$$

$$Y_1 = \frac{3(1-\varphi)(2-3\varphi)^2}{(1-3\varphi)(4-3\varphi)} \tag{3.20}$$

$$X_0 = \frac{2(1-2\varphi)}{(3\varphi-1)} \tag{3.21}$$

$$X_1 = -\frac{4(1-2\varphi)(24\varphi^2-29\varphi+9)}{3(3\varphi-1)^3} \tag{3.22}$$

A long-terme ($t \to \infty$, $\bar{\tau} \to 0$) :

$$\varphi \leq \frac{1}{3} \quad \left\{ \begin{array}{rcl} \mu_{ac}^\star & = & \dfrac{Rk_t}{4}\Big(X_0^\infty + X_1^\infty\bar{\tau}\Big) + \mathcal{O}(\bar{\tau}^2) \\ k_{ac}^\star & = & \dfrac{Rk_t}{3}(1-\varphi)\bar{\tau}\Big(1 - \bar{\tau}\dfrac{\varphi}{X_0^\infty}\Big) + \mathcal{O}(\bar{\tau}^3) \end{array} \right. \tag{3.23}$$

$$\frac{1}{3} < \varphi < \frac{1}{2} \quad \left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{\mu_{ac}^\star}{\bar{\tau}} & = & \dfrac{Rk_t}{4}\Big(Y_0^\infty + \bar{\tau}Y_1^\infty\Big) + \mathcal{O}(\bar{\tau}^2) \\ \dfrac{k_{ac}^\star}{\bar{\tau}} & = & \dfrac{Rk_t}{3}\dfrac{1-\varphi}{Y_0^\infty+\varphi}\Big(Y_0^\infty + \bar{\tau}\dfrac{Y_1^\infty\varphi}{Y_0^\infty+\varphi}\Big) + \mathcal{O}(\bar{\tau}^2) \end{array} \right. \tag{3.24}$$

avec
$$X_0^\infty = 1-3\varphi \tag{3.25}$$

$$X_1^\infty = \frac{1+(2-3\varphi)(1-3\varphi)}{2(1-3\varphi)} \tag{3.26}$$

$$Y_0^\infty = \frac{3(1-2\varphi)}{2(3\varphi-1)} \tag{3.27}$$

$$Y_1^\infty = -\frac{9(1-2\varphi)(2-3\varphi)^2\varphi}{4(3\varphi-1)^3} \tag{3.28}$$

Nous avons ainsi explicité un développement limité de $\mathbb{C}_{ac}^\star$ au deuxième ordre en $\bar{\tau}$ à court-terme et long-terme. On souhaite maintenant utiliser ces résultats pour établir une équation d'état macroscopique dans l'espace temporel.

3.1.4 Equations d'état dans le domaine temporel

Méthode

Dans le domaine de Carson, on a

$$\underline{\underline{\Sigma}}^\star = \mathbb{C}_{ac}^\star : \underline{\underline{E}}^\star \tag{3.29}$$

On veut déduire de cette relation une équation liant $\underline{\underline{\Sigma}}$ et $\underline{\underline{E}}$ dans l'espace temporel. La difficulté réside dans le fait que $\underline{\underline{\Sigma}}^\star$ et $\underline{\underline{E}}^\star$ sont des fonctions de τ a priori inconnues et qu'elles sont liées à $\mathbb{C}^\star_{ac}$ par un produit contracté. On peut toutefois obtenir facilement une équation différentielle faisant intervenir des dérivées de $\underline{\underline{\Sigma}}$ et $\underline{\underline{E}}$. En effet, si on connaît une expression de $\mathbb{C}^\star_{ac}$ sous la forme d'un polynôme en τ (équation (3.30)), alors la relation d'état dans l'espace Carson (équation (3.29)) s'écrit selon l'équation (3.31), qui donne dans l'espace temporel l'équation (3.32) :

$$\mathbb{C}^\star_{ac} = \sum_i \mathbb{C}_i \tau^i \tag{3.30}$$

$$\underline{\underline{\Sigma}}^\star(\tau) = \sum_i \mathbb{C}_i \tau^i : \underline{\underline{E}}^\star(\tau) \tag{3.31}$$

$$\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \sum_i \mathbb{C}_i : \underline{\underline{E}}^{(i)}(t) \tag{3.32}$$

où $\underline{\underline{E}}^{(i)}$ désigne la dérivée $i^{\text{ème}}$ de $\underline{\underline{E}}$ par rapport au temps. Ce type d'équation différentielle peut alors être résolue numériquement ou permettre d'identifier un modèle rhéologique équivalent.

Dans le reste de cette section, nous donnons une expression approximée de $\mathbb{C}^\star_{ac}$ sous la forme de l'équation (3.30) grâce aux développements limités de l'annexe A. Nous l'utilisons pour obtenir une relation d'état dans le domaine temporel.

On peut aussi obtenir directement une relation entre la contrainte $\underline{\underline{\Sigma}}$ et la déformation $\underline{\underline{E}}$ (sans faire intervenir leurs dérivées respectives) dans le cas où l'une de ces deux quantités est un échelon. Supposons que $\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \underline{\underline{\Sigma}}_0 H(t)$ où H désigne la fonction Heaviside. Ainsi sa transformée de Carson est constante par rapport à τ : $\underline{\underline{\Sigma}}^\star = \underline{\underline{\Sigma}}_0$. On peut alors facilement appliquer à l'expression de $\underline{\underline{E}}^\star$ (équation (3.33)) la transformation inverse de Carson et obtenir $\underline{\underline{E}}$ (équation (3.34)) :

$$\underline{\underline{E}}^\star(\tau) = (\mathbb{C}^\star_{ac}(\tau))^{-1} : \underline{\underline{\Sigma}}_0 \tag{3.33}$$

$$\underline{\underline{E}}(t) = \widetilde{\mathbb{S}}(t) : \underline{\underline{\Sigma}}_0 \tag{3.34}$$

où $\widetilde{\mathbb{S}}$ est l'originale de $(\mathbb{C}^\star_{ac})^{-1}$. Remarquons que $\widetilde{\mathbb{S}}$ n'est pas l'inverse du comportement $\mathbb{C}_{ac}$:

$$\left.\begin{array}{rcl} \widetilde{\mathbb{S}} &=& \mathcal{C}^{-1}\Big((\mathbb{C}^\star_{ac})^{-1}\Big) \\ \mathbb{C}^{-1}_{ac} &=& \mathcal{C}^{-1}\Big((\mathbb{C}^{-1}_{ac})^\star\Big) \end{array}\right\} \quad \text{donc} \quad \widetilde{\mathbb{S}} \neq \mathbb{C}^{-1}_{ac} \tag{3.35}$$

Cette étude permettra d'avoir un aperçu du comportement macroscopique de notre modèle. Nous la mènerons dans la section 3.1.5.

Equations différentielles pour une contrainte quelconque

Voici la forme des équations différentielles régulant le comportement d'un milieu soumis à une contrainte quelconque mais toujours nulle pour $t < 0$ (comme illustré par fig.3.3). Les calculs sont détaillés en annexe (B.1).

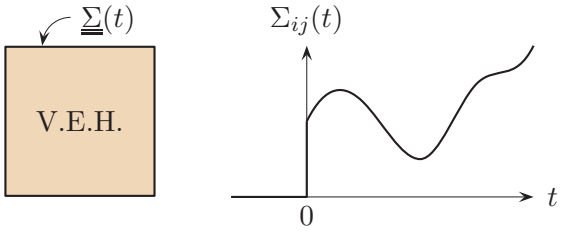


Figure 3.3 – Illustration d'un chargement quelconque sur le V.E.H.

$$\text{à court-terme} \quad \begin{cases} \varphi \leq \frac{1}{3} & \underline{\underline{\Sigma}}(t) = \mathbb{C}_0 : \underline{\underline{E}}(t) + \mathbb{C}_1 : \dot{\underline{\underline{E}}}(t) \\ \text{avec ici :} & \mathbb{C}_0 = \frac{Rk_t}{2} Y_1 \mathbb{K} + Rk_t \frac{1-\varphi}{\varphi + Y_0} Y_1 \frac{\varphi}{\varphi + Y_0} \mathbb{J} \\ & \mathbb{C}_1 = \frac{Rk_t}{2} Y_0 \nu \mathbb{K} + Rk_t \frac{1-\varphi}{\varphi + Y_0} Y_0 \nu \mathbb{J} \\ \frac{1}{3} < \varphi < \frac{1}{2} & \dot{\underline{\underline{\Sigma}}}(t) = \mathbb{C}_{-1} : \underline{\underline{E}}(t) + \mathbb{C}_0 : \dot{\underline{\underline{E}}}(t) \\ \text{avec ici} & \mathbb{C}_0 = \frac{Rk_t}{2} X_0 \mathbb{K} + Rk_t \frac{1-\varphi}{\varphi} X_0 \mathbb{J} \\ & \mathbb{C}_{-1} = \frac{Rk_t}{2} \frac{X_1}{\nu} \mathbb{K} + Rk_t \frac{1-\varphi}{\nu\varphi} (X_1 - \frac{X_0^2}{\varphi}) \mathbb{J} \end{cases} \tag{3.36}$$

$$\text{à long-terme} \quad \begin{cases} \varphi \leq \frac{1}{3} & \underline{\underline{\Sigma}}(t) = \mathbb{C}_0 : \underline{\underline{E}}(t) + \mathbb{C}_1 : \dot{\underline{\underline{E}}}(t) \\ \text{avec ici} & \mathbb{C}_0 = \frac{Rk_t}{2} X_0^\infty \mathbb{K} \\ & \mathbb{C}_1 = \frac{Rk_t}{2} X_1^\infty \nu \mathbb{K} + Rk_t (1-\varphi) \nu \mathbb{J} \\ \frac{1}{3} < \varphi < \frac{1}{2} & \underline{\underline{\Sigma}}(t) = \mathbb{C}_1 : \dot{\underline{\underline{E}}}(t) \\ \text{avec ici} & \mathbb{C}_1 = \frac{Rk_t}{2} Y_0^\infty \nu \mathbb{K} + Rk_t \frac{(1-\varphi) Y_0^\infty}{Y_0^\infty + \varphi} \nu \mathbb{J} \end{cases} \tag{3.37}$$

3.1.5 Réponse à un échelon dans l'espace temporel

Réponse à un échelon de contrainte

On étudie maintenant la réponse du V.E.H. à un échelon de contrainte (comme illustré par fig.3.4).

On définit $\tilde{\mu}$ et $\tilde{k}$ tels que le tenseur isotrope $\widetilde{\mathbb{S}}$ s'écrive sous la forme :

$$\widetilde{\mathbb{S}} = \frac{1}{3\tilde{k}} \mathbb{J} + \frac{1}{2\tilde{\mu}} \mathbb{K} \tag{3.38}$$

Les calculs sont détaillés en annexe (B.2).

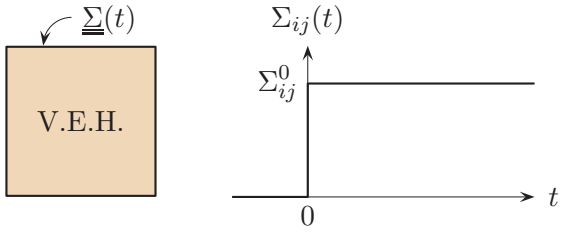


Figure 3.4 – Illustration d'un chargement par un échelon de contrainte

A court-terme ($t \to 0$, $\bar{\tau} \to \infty$) :

$$\varphi \leq \frac{1}{3} \quad \left\{ \begin{array}{rcl} \tilde{\mu}(t) & = & \dfrac{Rk_t}{4}\Big[\dfrac{1}{Y_0}\Big[\dfrac{t}{\nu} - \dfrac{Y_1}{Y_0}\dfrac{t^2}{2\nu^2}\Big]H(t)\Big]^{-1} \\ \tilde{k}(t) & = & \dfrac{(1-\varphi)Rk_t}{3}\Big[\dfrac{1}{Y_0}\Big[(Y_0+\varphi)\dfrac{t}{\nu} - \dfrac{Y_1\varphi}{Y_0}\dfrac{t^2}{2\nu^2}\Big]H(t)\Big]^{-1} \end{array} \right. \tag{3.39}$$

$$\frac{1}{3} < \varphi < \frac{1}{2} \quad \left\{ \begin{array}{rcl} \tilde{\mu}(t) & = & \dfrac{Rk_t}{4}\Big[\dfrac{1}{X_0}\Big[1 - \dfrac{X_1}{X_0}\dfrac{t}{\nu}\Big]H(t)\Big]^{-1} \\ \tilde{k}(t) & = & \dfrac{(1-\varphi)Rk_t}{3}\Big[\dfrac{1}{X_0}\Big[\varphi + \Big(X_0 - \dfrac{X_1\varphi}{X_0}\Big)\dfrac{t}{\nu}\Big]H(t)\Big]^{-1} \end{array} \right. \tag{3.40}$$

où on note $\nu = \dfrac{k_n}{k_t}$.

On remarque que lorsque t tend vers 0, $\tilde{k}$ tend vers l'infini. Le milieu homogénéisé se comporte instantanément comme un milieu rigide. Ceci est cohérent avec le fait que le processus physique de dissolution dépend de l'histoire de chargement et qu'à $t = 0^+$, cette histoire est inexistante pour un échelon de contrainte.

Concernant $\tilde{\mu}$, celui-ci tend vers l'infini pour des porosités inférieures à un tiers mais reste borné positif pour des porosités supérieures. Dans le premier cas, il n'y a donc aucune déformation. Dans le deuxième cas, le comportement instantané admet un terme sphérique positif borné. On a donc une déformation sphérique négative (compaction) sous l'effet d'une contrainte compressive.

A long-terme ($t \to \infty$, $\bar{\tau} \to 0$) :

$$\varphi \leq \frac{1}{3} \quad \left\{ \begin{array}{rcl} \tilde{\mu}(t) & = & \dfrac{Rk_t}{4}\Big[\dfrac{1}{X_0^\infty}\Big[H(t) - \dfrac{X_1^\infty}{X_0^\infty}\delta(t)\Big]\Big]^{-1} \\ \tilde{k}(t) & = & \dfrac{(1-\varphi)Rk_t}{3}\Big[\Big[\dfrac{t}{\nu} + \dfrac{\varphi}{X_0^{\infty 2}}\dfrac{t^2}{2\nu^2}\Big]H(t)\Big]^{-1} \end{array} \right. \tag{3.41}$$

$$\frac{1}{3} < \varphi < \frac{1}{2} \quad \left\{ \begin{array}{rcl} \tilde{\mu}(t) & = & \dfrac{Rk_t}{4}\Big[\dfrac{1}{Y_1^\infty}\Big[\dfrac{t}{\nu} - \dfrac{Y_1^\infty}{Y_0^\infty}\Big]H(t)\Big]^{-1} \\ \tilde{k}(t) & = & \dfrac{(1-\varphi)Rk_t}{3}\Big[\dfrac{1}{Y_0^\infty}\Big[Y_0^\infty + \varphi - \dfrac{Y_1^\infty\varphi}{Y_0^\infty}\dfrac{t}{\nu}\Big]H(t)\Big]^{-1} \end{array} \right. \tag{3.42}$$

On remarque que lorsque t tend vers l'infini, $\tilde{k}$ devient nul. Par conséquent, la contrainte sphérique devient nulle.

Or, si ce type de comportement était obtenu pour un matériau soumis à un chargement oedométrique, on intuite que des contraintes en traction apparaîtraient dans le plan horizontal puisque la déformation latérale serait maintenue nulle par les conditions aux limites. Ceci serait problématique car alors l'équation (3.2) serait mise en défaut.

Pour vérifier rigoureusement cette hypothèse, nous allons étudier la réponse du V.E.H. à un chargement oedométrique.

Réponse à un chargement oedométrique

Enfin, on étudie la réponse du V.E.H. à un échelon de contrainte (comme illustré par fig.3.5).

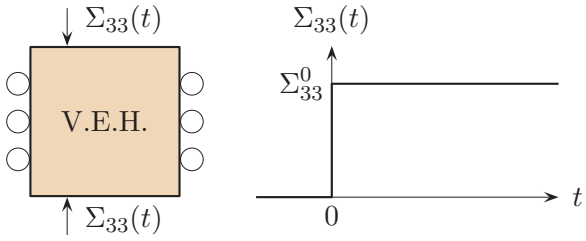


Figure 3.5 – Illustration d'un chargement oedométrique sur le V.E.H.

Dans le cas d'un chargement oedométrique, on impose les conditions aux limites suivantes aux bords du domaine à tout instant :

$\begin{cases} \text{une contrainte verticale constante non nulle : } \Sigma_{33}(t) = \Sigma_{33}^0 \\ \text{des déplacements latéraux nuls : } E_{11} = E_{22} = 0 \end{cases}$

Une constante sur $[0;+\infty[$ ayant pour image la même constante dans l'espace de Laplace-Carson, les conditions aux limites de ce problème équivalent à :

$\begin{cases} \Sigma_{33}^\star(\tau) = \Sigma_{33}^0 \\ E_{11}^\star(\tau) = E_{22}^\star(\tau) = 0 \end{cases}$

Nous rappelons ici l'équation d'état dans l'espace de Laplace-Carson (équation 3.29) :

$$\underline{\underline{\Sigma}}^\star = \mathbb{C}_{ac}^\star : \underline{\underline{E}}^\star \qquad \text{où} \qquad \mathbb{C}_{ac}^\star = 3\mu_{ac}^\star \mathbb{K} + 2k_{ac}^\star \mathbb{J}$$

Comme la configuration est isotrope et que la symétrie du problème impose $\Sigma_{11}^\star(\tau) = \Sigma_{22}^\star(\tau)$, il ne reste que deux équations scalaires :

$$E_{33}^\star(\tau) = \frac{3\Sigma_{33}^0}{3k_{ac}^\star(\tau) + 4\mu_{ac}^\star(\tau)} \tag{3.43}$$

$$\Sigma_{11}^\star(\tau) = \frac{\Sigma_{33}^0(3k_{ac}^\star(\tau) - 2\mu_{ac}^\star(\tau))}{3k_{ac}^\star(\tau) + 4\mu_{ac}^\star(\tau)} \tag{3.44}$$

Nous nous intéressons maintenant uniquement au cas à long-terme et pour des porosités inférieures à un tiers. Nous utilisons alors les expressions de $k_{ac}^\star$ et $\mu_{ac}^\star$ (équations (3.23)) desquelles nous ne gardons que le terme de premier ordre des développements limités. Ainsi la

contrainte latérale s'écrit :

$$\Sigma_{11}^{\star}(\tau) = \frac{(1-\varphi)\tau - (X_0 + X_1\tau)/2}{(1-\varphi)\tau - (X_0 + X_1\tau)}\Sigma_{33}^{0} \tag{3.45}$$

La contrainte correspondante dans l'espace temporelle est alors :

$$\Sigma_{11}(t) = \frac{1}{2}\Big(\frac{15}{5+6X_1}exp(-\frac{6X_0}{5+6X_1}t) - 1\Big)\Sigma_{33}^{0} \tag{3.46}$$

On a donc :

$$\lim_{t\to+\infty}\Sigma_{11}(t) = -\frac{1}{2}\Sigma_{33}^{0} \tag{3.47}$$

Par conséquent, si la contrainte verticale imposée est compressive ($\Sigma_{33}^{0} < 0$), on obtiendra alors à long-terme des contraintes latérales positives (puisque valant $-\Sigma_{33}^{0}/2$) donc en traction. Pourtant l'équation (3.2) de notre modèle local n'est valable qu'en compression. Notre modèle à interfaces présente donc une contradiction dont nous allons discuter dans la section suivante.

3.1.6 Discussion

L'équation (3.2) du modèle local n'est valable que pour une contrainte compressive. Or nous avons vu que dans l'exemple d'une configuration oedométrique, des contraintes en traction apparaissent latéralement. Notre modèle local mériterait donc d'être enrichi de manière à n'activer la dissolution qu'en réponse à une contrainte compressive. Nous proposons pour cela de redéfinir le coefficient visqueux de l'interface k_n de telle sorte que l'équation (3.2) devienne :

$$T_n \;=\; k_n\dot{\xi}_n \qquad \text{avec} \qquad \begin{cases} k_n > 0 & \text{si} \quad T_n \leq 0 \\ k_n = 0 & \text{si} \quad T_n > 0 \end{cases} \tag{3.48}$$

Malheureusement, k_n perd ainsi son caractère uniforme. Or cette approche est fondée sur la solution analytique pour des sphères à interfaces dont on connaît une solution uniquement pour des propriétés réparties uniformément. Des pistes de travail sont actuellement explorées dans des contextes différents pour mener l'homogénéisation avec des interfaces non uniformes par une approche énergétique (Caratini [2012],Sidhom).

Dans l'immédiat, nous proposons une autre modélisation, sans interface, pour palier à ces limites.

3.2 Approche en déformation libre

3.2.1 Objectifs

Dans cette approche, on suppose que l'on connaît une expression de la déformation locale du grain due au mécanisme de pression-dissolution en fonction de la contrainte dans le grain et de la pression de pore. Nous l'appelons ici déformation libre ($\underline{\underline{\varepsilon}}^L$) car elle ne résulte pas d'un phénomène purement mécanique. L'expression générale de cette déformation libre peut s'écrire :

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^L = \mathbb{L} : \underline{\underline{\sigma}}^s + \underline{\underline{M}} p + \underline{\underline{N}} \tag{3.49}$$

où les tenseurs $\mathbb{L}$, $\underline{\underline{M}}$ et $\underline{\underline{N}}$ sont considérés constants et connus. Cette équation vient généraliser la forme proposée par Lehner and Leroy [2003] et constitue la donnée d'entrée du modèle micromécanique pour la prise en compte du couplage chémo-mécanique.

Dans notre application, nous définissons $\underline{\underline{\varepsilon}}^L$ en fonction de la dilatation visqueuse λ^v établie suivant le modèle local de pression-dissolution mis au point dans [Lehner and Leroy 2003] (voir l'équation (2.19)). On définit ainsi une déformation libre uniforme isotrope transverse (voir fig.(3.6)) :

$$\dot{\varepsilon}^L_{ii} = \frac{\dot{\lambda}^v_i}{\lambda^v_i} \tag{3.50}$$

On explicite donc les tenseurs $\mathbb{L}$ et $\underline{\underline{M}}$, $\mathbb{L}$ étant isotrope transverse et $\underline{\underline{M}}$ isotrope dans ce cas.

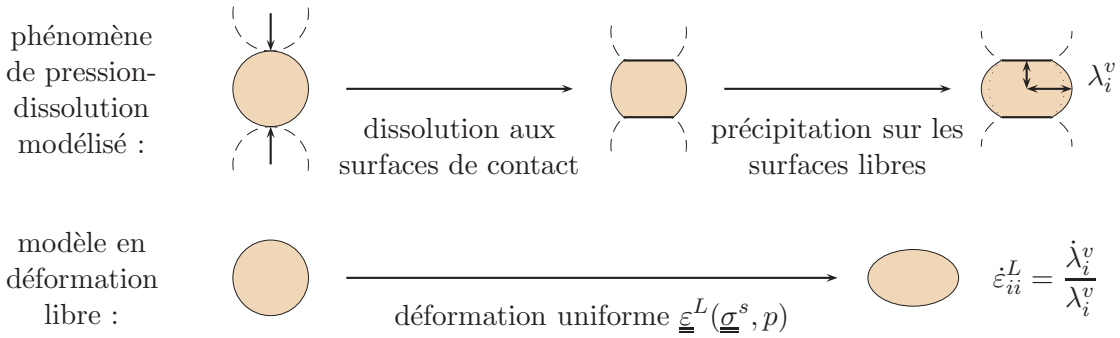


Figure 3.6 – Modèle en déformation libre appliqué à la dilatation de Lehner and Leroy [2003].

Les auteurs de ce modèle physique local de pression-dissolution y ont déjà appliqué une homogénéisation périodique pour une structure de cellules cubiques contenant une sphère solide. Nous proposons ici de prendre en compte ce modèle physique local dans un milieu hétérogène à **structure aléatoire**.

3.2.2 Homogénéisation du milieu aléatoire

On suppose que le solide est élastique linéaire. Le taux de déformation dans le grain s'écrit alors :

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^s = \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^L + \mathbb{S}^s : \dot{\underline{\underline{\sigma}}}^s \tag{3.51}$$

En travaillant en vitesses pour une configuration actuelle donnée, on peut écrire en tout point du VER Ω :

$$\dot{\underline{\underline{\sigma}}} = \mathbb{C} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} + \dot{\underline{\underline{\sigma}}}^p \tag{3.52}$$

$$\text{avec} \quad \mathbb{C} = \begin{cases} 0 & \text{dans} \quad \Omega^f \\ \mathbb{C}^s & \text{dans} \quad \Omega^s \end{cases} \tag{3.53}$$

$$\text{et} \quad \dot{\underline{\underline{\sigma}}}^p = \begin{cases} -\dot{p}\underline{\underline{1}} & \text{dans} \quad \Omega^f \\ -\mathbb{C}^s : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^L & \text{dans} \quad \Omega^s \end{cases} \tag{3.54}$$

On cherche maintenant la loi d'état macroscopique correspondant à cette description locale et on résoud pour cela un problème de chargement aux limites en taux de déformation homogène $\dot{\underline{\underline{E}}}$. Comme on néglige les forces volumiques, on a :

$$\dot{\underline{u}} = \dot{\underline{\underline{E}}}.\underline{x} \quad \text{sur} \quad \partial\Omega \tag{3.55}$$

$$\underline{div}(\dot{\underline{\underline{\sigma}}}) = \underline{0} \quad \text{dans} \quad \Omega \tag{3.56}$$

On décompose notre problème en une superposition de deux problèmes (voir fig.3.7) :
- 1 : le milieu est soumis au taux de déformation $\dot{\underline{\underline{E}}}$ à sa frontière, sans précontrainte
- 2 : le milieu est soumis à la précontrainte $\dot{\underline{\underline{\sigma}}}^p$ sans chargement aux limites.

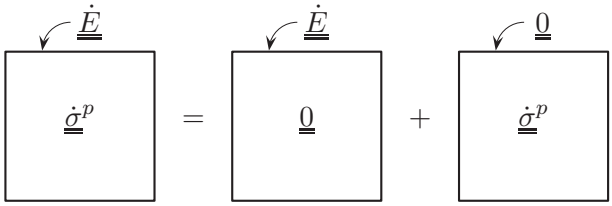


Figure 3.7 – Décomposition du problème pour l'application du théorème de Levin.

Le théorème de Levin permet alors d'obtenir :

$$\dot{\underline{\underline{\Sigma}}} = \mathbb{C}^{hom} : \dot{\underline{\underline{E}}} + < \dot{\underline{\underline{\sigma}}}^p : \mathbb{A} >_\Omega \tag{3.57}$$

$$= \mathbb{C}^{hom} : (\dot{\underline{\underline{E}}} - \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^L) - \dot{p}\underline{\underline{B}} \tag{3.58}$$

$$\text{avec} \quad \underline{\underline{B}} = \varphi\underline{\underline{1}} :< \mathbb{A} >_{\Omega^f} \tag{3.59}$$

$$\text{et} \quad \mathbb{C}^{hom} = (1-\varphi)\mathbb{C}^s :< \mathbb{A} >_{\Omega^s} \tag{3.60}$$

Il ne reste plus qu'à exprimer $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^L$ en fonction de grandeurs macroscopiques. Vue l'expression de $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^L$ (équation (3.49)), cela revient à exprimer $\underline{\underline{\sigma}}^s$ en fonction de grandeurs macroscopiques.
Comme le processus d'homogénéisation assure une cohérence énergétique, on a :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = < \underline{\underline{\sigma}}^s >_\Omega \tag{3.61}$$

$$= \varphi\underline{\underline{\sigma}}^f + (1-\varphi)\underline{\underline{\sigma}}^s \tag{3.62}$$

Or, puisque le fluide est homogène, on a $\underline{\underline{\sigma}}^f = -p\underline{\underline{1}}$. L'équation (3.62) donne donc :

$$\underline{\underline{\sigma}}^s = \frac{1}{1-\varphi}(\underline{\underline{\Sigma}} + \varphi p\underline{\underline{1}}) \tag{3.63}$$

On reporte cette équation dans l'expression générale de $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^L$ (équation (3.49)) :

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^L = \frac{1}{1-\varphi}\mathbb{L} : (\underline{\underline{\Sigma}} + \varphi p \underline{\underline{1}}) + \underline{\underline{M}} p + \underline{\underline{N}} \tag{3.64}$$

Finalement, en remplaçant $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^L$ dans l'équation (3.58) à l'aide de l'équation précédente, on obtient une équation d'état différentielle macroscopique qui tient compte du modèle de pression-dissolution en déformation libre à l'échelle microscopique via les tenseurs $\mathbb{L}$, $\underline{\underline{M}}$ et $\underline{\underline{N}}$:

$$\underline{\underline{\dot{E}}} - \mathbb{S}^{hom} : (\underline{\underline{\dot{\Sigma}}} + \underline{\underline{B}}\dot{p}) = \mathbb{K}_1 : \underline{\underline{\Sigma}} + \underline{\underline{K}}_2 p + \underline{\underline{K}}_3 \tag{3.65}$$

$$\text{avec} \quad \mathbb{K}_1 = \frac{1}{1-\varphi}\mathbb{L} \tag{3.66}$$

$$\underline{\underline{K}}_2 = \frac{1}{1-\varphi}\Big(f\mathbb{L} : \underline{\underline{1}} + (1-f)\underline{\underline{M}}\Big) \tag{3.67}$$

$$\underline{\underline{K}}_3 = \frac{1}{1-\varphi}\mathbb{L} : \underline{\underline{N}} \tag{3.68}$$

3.2.3 Procédé de résolution

L'équation différentielle (3.65) peut être résolue numériquement en différences finies. Il suffit pour cela de connaître l'évolution des paramètres $\mathbb{S}^{hom}$, $\underline{\underline{B}}$, $\mathbb{K}_1$, $\underline{\underline{K}}_2$ et $\underline{\underline{K}}_3$. Leur évolution dépend uniquement de la porosité φ, les paramètres du modèle de déformation libre $\mathbb{L}$, $\underline{\underline{M}}$ et $\underline{\underline{N}}$ étant considérés constants. Nous allons donc étudier l'évolution temporelle de la porosité.

Actualisation de la porosité

En partant de la définition de la porosité, on calcule sa dérivée :

$$\varphi = \frac{\Omega^f}{\Omega} \qquad \text{donc} \qquad \frac{\dot{\varphi}}{\varphi} = \frac{\dot{\Omega}^f}{\Omega^f} - \frac{\dot{\Omega}}{\Omega} = tr(\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^f) - tr(\underline{\underline{\dot{E}}}) \tag{3.69}$$

Pour calculer $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^f$, on évalue avec un schéma d'homogénéisation auto-cohérent le taux de déformation dans chacune des phases du VER soumis à un taux de déformation homogène $\underline{\underline{\dot{E}}}_0$ aux limites.

Pour l'inclusion fluide, on décompose le problème en une superposition de deux problèmes (voir fig.3.8) :

- 1 : le milieu est soumis au taux de déformation $\underline{\underline{\dot{E}}}_0$ à sa frontière, sans précontrainte dans l'inclusion,
- 2 : l'inclusion fluide est soumise à la précontrainte $-\dot{p}\underline{\underline{1}}$ sans chargement aux limites.

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^f = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^f_1 + \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^f_2 \tag{3.70}$$

$$\text{avec} \quad \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^f_1 = -\mathbb{P}^f_{ac} : (-\dot{p}\underline{\underline{1}}) \tag{3.71}$$

$$\text{et} \quad \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^f_2 = (\mathbb{I} + \mathbb{P}^f_{ac} : \delta\mathbb{C}_{ac})^{-1} : \underline{\underline{\dot{E}}}_0 \tag{3.72}$$

où $\mathbb{P}^f_{ac}$ désigne le tenseur de Hill associé à la forme des inclusions de la phase fluide et $\delta\mathbb{C}_{ac} = \mathbb{C}^I - \mathbb{C}_{ac}$ où l'inclusion I est ici fluide.

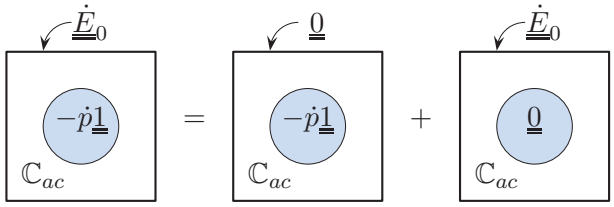


Figure 3.8 – Décomposition du problème pour l'évaluation du taux de déformation du fluide.

Nous allons maintenant exprimer $\dot{\underline{\underline{E}}}_0$ en fonction de grandeurs macroscopiques générales. Pour cela, on calcule le taux de déformation macroscopique moyen.

$$\dot{\underline{\underline{E}}} = <\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}>_\Omega \quad = \quad (1-\varphi)\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^s + \varphi\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^f \tag{3.73}$$

Pour calculer $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^s$, on décompose le problème de façon analogue (voir fig.3.9) :
- 1 : le milieu est soumis au taux de déformation $\dot{\underline{\underline{E}}}_0$ à sa frontière, sans précontrainte dans l'inclusion,
- 2 : l'inclusion solide est soumise à la précontrainte $-\mathbb{C}^s : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^L$ sans chargement aux limites.

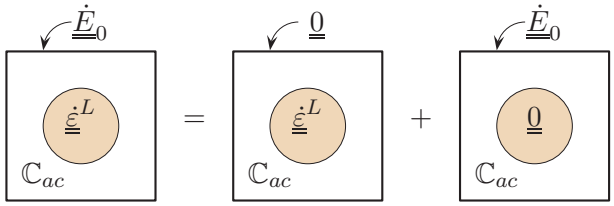


Figure 3.9 – Décomposition du problème pour l'évaluation du taux de déformation du solide.

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^s = \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^s_1 + \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^s_2 \tag{3.74}$$

$$\text{avec} \quad \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^s_1 = \mathbb{S}^s_{ac} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^L \tag{3.75}$$

$$\text{et} \quad \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^s_2 = (\mathbb{I} + \mathbb{P}^s_{ac} : \delta\mathbb{C}_{ac})^{-1} : \dot{\underline{\underline{E}}}_0 \tag{3.76}$$

où $\mathbb{P}^s_{ac}$ désigne le tenseur de Hill associé à la forme des inclusions de la phase solide et $\delta\mathbb{C}_{ac} = \mathbb{C}^I - \mathbb{C}_{ac}$ où l'inclusion I est ici solide. En reprenant l'équation (3.64) donnant $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^L$ en fonction de grandeurs macroscopiques, on obtient :

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^s = \frac{1}{1-\varphi}\mathbb{S}^s_{ac} : \Big(\mathbb{L} : (\underline{\underline{\Sigma}} + fp\underline{\underline{1}}) + \underline{\underline{M}}p + \underline{\underline{N}}\Big) + (\mathbb{I} + \mathbb{P}^s_{ac} : \delta\mathbb{C}_{ac})^{-1} : \dot{\underline{\underline{E}}}_0 \tag{3.77}$$

On reporte maintenant les équations (3.77) et (3.70) dans l'équation (3.73) :

$$\dot{\underline{\underline{E}}} = \mathbb{S}^s_{ac} : \Big(\mathbb{L} : (\underline{\underline{\Sigma}} + \varphi p\underline{\underline{1}}) + \underline{\underline{M}}p + \underline{\underline{N}}\Big) + (1-\varphi)(\mathbb{I} + \mathbb{P}^s_{ac} : \delta\mathbb{C}_{ac})^{-1} : \dot{\underline{\underline{E}}}_0 \tag{3.78}$$

$$+\varphi\Big(\dot{p}\mathbb{P}^f_{ac} : \underline{\underline{1}} + (\mathbb{I} + \mathbb{P}^f_{ac} : \delta\mathbb{C}_{ac})^{-1} : \dot{\underline{\underline{E}}}_0\Big) \tag{3.79}$$

$$= <(\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ac} : \delta\mathbb{C}_{ac})^{-1}>_\Omega : \dot{\underline{\underline{E}}}_0 + \varphi\dot{p}\mathbb{P}^f_{ac} : \underline{\underline{1}} - \mathbb{S}^s_{ac} : \Big(\mathbb{L} : (\underline{\underline{\Sigma}} + \varphi p\underline{\underline{1}}) + \underline{\underline{M}}p + \underline{\underline{N}}\Big) \tag{3.80}$$

On en déduit alors l'expression de $\underline{\underline{\dot{E}}}_0$ en fonction de grandeurs macroscopiques :

$$\underline{\underline{\dot{E}}}_0 =< (\mathbb{I} + \mathbb{P}^f_{ac} : \delta\mathbb{C}_{ac})^{-1} >^{-1}_{\Omega} : \left(\underline{\underline{\dot{E}}} - \varphi\dot{p}\mathbb{P}^f_{ac} : \underline{\underline{1}} + \mathbb{S}^s_{ac} : (\mathbb{L} : (\underline{\underline{\Sigma}} + \varphi p\underline{\underline{1}}) + \underline{\underline{M}}p + \underline{\underline{N}})\right) \tag{3.81}$$

Pour finir, on reporte cette expression dans l'équation (3.70) :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^f &= \dot{p}\mathbb{P}^f_{ac} : \underline{\underline{1}} + (\mathbb{I} - \mathbb{P}^f_{ac} : \delta\mathbb{C}_{ac})^{-1} :< (\mathbb{I} + \mathbb{P}^f_{ac} : \delta\mathbb{C}_{ac})^{-1} >^{-1}_{\Omega} && (3.82)\\ &\quad : \left(\underline{\underline{\dot{E}}} - \varphi\dot{p}\mathbb{P}^f_{ac} : \underline{\underline{1}} + \mathbb{S}^s_{ac} : (\mathbb{L} : (\underline{\underline{\Sigma}} + \varphi p\underline{\underline{1}}) + \underline{\underline{M}}p + \underline{\underline{N}})\right) && (3.83) \end{aligned}$$

En utilisant cette équation dans l'équation (3.69), on obtient alors une loi d'évolution de la porosité en fonction des grandeurs macroscopiques :

$$\begin{aligned} \dot{\varphi} &= \varphi \; tr\Big[\dot{p}\mathbb{P}^f_{ac} : \underline{\underline{1}} + (\mathbb{I} - \mathbb{P}^f_{ac} : \delta\mathbb{C}_{ac})^{-1} :< (\mathbb{I} + \mathbb{P}^f_{ac} : \delta\mathbb{C}_{ac})^{-1} >^{-1}_{\Omega} && (3.84)\\ &\quad : \left(\underline{\underline{\dot{E}}} - \varphi\dot{p}\mathbb{P}^f_{ac} : \underline{\underline{1}} + \mathbb{S}^s_{ac} : (\mathbb{L} : (\underline{\underline{\Sigma}} + \varphi p\underline{\underline{1}}) + \underline{\underline{M}}p + \underline{\underline{N}})\right) - \underline{\underline{\dot{E}}}\Big] && (3.85) \end{aligned}$$

Actualisation de la forme des inclusions

Afin de tenir compte de la déformation locale anisotropique décrite par $\underline{\underline{\varepsilon}}^s$, nous proposons de faire évoluer la description microscopique du milieu via une ovalisation des grains initialement sphériques. En effet, la déformation totale de la phase solide $\underline{\underline{\varepsilon}}^s$ nous permet de définir la dilatation des grains λ_i dans chaque direction principale i, de sorte que :

$$\lambda_i = 1 + \varepsilon^s_{ii} \tag{3.86}$$

Les grains initialement sphériques deviennent alors des ellipsoïdes de directions principales $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$. Les quantités relatives à la forme des inclusions (les tenseurs de Hill) peuvent aussi être mis à jour puisqu'on connaît leur expression à la fois pour les sphères et les ellipsoïdes (voir Willis [1981]). Le tenseur de Hill pour une inclusion sphérique est :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{ac} &= \frac{\alpha_{ac}}{3k_{ac}}\mathbb{J} + \frac{\beta_{ac}}{2\mu_{ac}}\mathbb{K} && (3.87)\\ \text{avec} \quad \alpha_{ac} &= \frac{3k_{ac}}{3k_{ac} + 4\mu_{ac}} && (3.88)\\ \text{et} \quad \beta_{ac} &= \frac{6(k_{ac} + 2\mu_{ac})}{5(3k_{ac} + 4\mu_{ac})} && (3.89) \end{aligned}$$

Le tenseur de Hill pour une inclusion ellipsoïde s'écrit de façon générale :

$$\begin{aligned} \mathbb{P} &= \frac{det(\underline{\underline{Z}})}{4\pi}\int_{\|\underline{x}\|=1} \mathbb{H}_0(\underline{x})\|\underline{\underline{Z}}(\underline{x})\|^{-3}dS && (3.90)\\ \text{avec} \quad [\mathbb{H}_0(\underline{x})]_{ijpq} &= x_i[\underline{\underline{K}}_0(\underline{x})^{-1}]_{jp}x_q\Big|_{(ij)(pq)} && (3.91)\\ \underline{\underline{K}}_0(\underline{x}) &= \underline{x}\cdot\mathbb{C}^{hom}\cdot\underline{x} && (3.92) \end{aligned}$$

3.2.4 Modèle rhéologique dans une configuration simplifiée

Dans cette section, nous voulons établir un modèle rhéologique macroscopique du milieu correspondant à l'équation différentielle (3.65), afin d'appréhender le comportement différé macroscopique. Nous choisissons ici de travailler avec une pression nulle pour faciliter notre démarche. Sous cette hypothèse, l'équation (3.65) exprime alors le taux de déformation macroscopique $\underline{\underline{\dot{E}}}$ comme la somme de trois contributions :

$$\underline{\underline{\dot{E}}} \;=\; \underline{\underline{\dot{E}}}_1 + \underline{\underline{\dot{E}}}_2 + \underline{\underline{\dot{E}}}_3 \tag{3.93}$$

où l'on définit :

- la contribution élastique : $\underline{\underline{\dot{E}}}_1 = \mathbb{S}^{hom} : \underline{\underline{\dot{\Sigma}}}$
- la contribution visqueuse : $\underline{\underline{\dot{E}}}_2 = \dfrac{1}{1-f}\mathbb{L} : \underline{\underline{\Sigma}}$
- la contribution constante : $\underline{\underline{\dot{E}}}_3 = \dfrac{1}{1-f}\mathbb{L} : \underline{\underline{N}}$

Dans l'équation (3.49), le tenseur $\underline{\underline{N}}$ est défini comme une contribution constante au taux de déformation libre local [2]. Ici on choisit de s'intéresser uniquement à la dissolution induite par la contrainte dans le grain, ce qui revient à prendre $\underline{\underline{N}}$ nul et donc une contribution constante macroscopique $\underline{\underline{\dot{E}}}_3$ nulle.

Le taux de déformation est ainsi la somme de deux contributions, élastique et visqueuse. Le modèle rhéologique équivalent dans ce cas est alors un modèle de Maxwell (illustré par la figure 3.10).

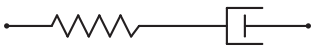


Figure 3.10 – Modèle rhéologique viscoélastique de Maxwell.

3.2.5 Etude oedométrique dans une configuration simplifiée

Dans cette section, nous allons mener la résolution complète de l'équation différentielle dans un cas très simplifié. Les hypothèses choisies ici sont grossières et n'ont pas la prétention d'être pertinentes. L'objectif est surtout de montrer sur un exemple simple que la méthode permet bien d'obtenir une équation d'état macroscopique qui tient compte de l'effet différé dû à la pression-dissolution.

On choisit comme modèle de pression-dissolution :

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^L = \alpha(\underline{\underline{\sigma}}^s + p\underline{\underline{1}}) \tag{3.94}$$

2. Par exemple, lorsqu'on utilise le modèle local de Lehner and Leroy [2003], le tenseur $\underline{\underline{N}}$ est proportionnel à $C - C_{eq}$, c'est-à-dire l'écart entre la concentration en soluté dans le pore et la concentration d'équilibre de la réaction de dissolution. Il exprime donc une contribution purement chimique.

où α est un paramètre constant. Ainsi les paramètres $\mathbb{L}$, $\underline{\underline{M}}$ et $\underline{\underline{N}}$ deviennent :

$$\mathbb{L} = \alpha\mathbb{I} \tag{3.95}$$
$$\underline{\underline{M}} = \alpha\underline{\underline{1}} \tag{3.96}$$
$$\underline{\underline{N}} = \underline{\underline{0}} \tag{3.97}$$

On suppose que la pression est constante. L'équation différentielle (3.65) devient alors :

$$\dot{\underline{\underline{E}}} = \mathbb{S}^{hom} : \dot{\underline{\underline{\Sigma}}} + \frac{\alpha}{1-\varphi}(\underline{\underline{\Sigma}} + p\underline{\underline{1}}) \tag{3.98}$$

On choisit un matériau isotrope constant :

$$\mathbb{C}^{hom} = 3k\mathbb{J} + 2\mu\mathbb{K} \tag{3.99}$$

Pour finir, on suppose que la porosité est aussi constante. Nous avons donc p, φ, k, μ et α qui sont constants.

Nous étudions la réponse du matériau soumis à une charge verticale dans une configuration oedométrique (voir figure 3.5) : on applique $E_{11} = E_{22} = 0$ et $\Sigma_{33} = \Sigma_{33}^d$ (constant).

L'équation (3.98) est projetée

$$\text{selon la direction 11 :} \qquad 0 = [\mathbb{S}^{hom}]_{11ij}[\dot{\underline{\underline{\Sigma}}}]_{ji} + \frac{\alpha}{1-\varphi}(\Sigma_{11} + p) \tag{3.100}$$
$$\text{selon la direction 33 :} \qquad \dot{E}_{33} = [\mathbb{S}^{hom}]_{33ij}[\dot{\underline{\underline{\Sigma}}}]_{ji} + \frac{\alpha}{1-\varphi}(\Sigma_{33}^d + p) \tag{3.101}$$

$$\text{Comme} \qquad [\mathbb{S}^{hom}]_{nnij}[\dot{\underline{\underline{\Sigma}}}]_{ji} = \frac{1}{3k}\dot{\Sigma}_{nn} + \frac{1}{3}tr(\dot{\underline{\underline{\Sigma}}})\Big(\frac{1}{2\mu} - \frac{1}{3k}\Big) \tag{3.102}$$

$$\text{l'équation (3.100) devient :} \qquad 0 = \frac{1}{3}\Big(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{3k}\Big)\dot{\Sigma}_{11} + \frac{\alpha}{1-\varphi}(\Sigma_{11} + p) \tag{3.103}$$

$$\text{On en déduit :} \qquad \Sigma_{11}(t) = (\Sigma_{11}^0 + p)\exp\Big(-\frac{3\alpha}{(1-\varphi)}\Big(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{3k}\Big)^{-1}t\Big) - p \tag{3.104}$$

La constante de temps associée au comportement visqueux apparent est donc :

$$\tau_v = \frac{(1-\varphi)}{3\alpha}\Big(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{3k}\Big) \tag{3.105}$$

Donc (à configuration fixée) plus la porosité est faible, plus cet effet visqueux est lent.

En appliquant l'équation (3.102) à l'équation (3.101), on obtient :

$$\dot{E}_{33} = \frac{2}{3}\dot{\Sigma}_{11}\Big(\frac{1}{2\mu} - \frac{1}{3k}\Big) + \frac{\alpha}{1-\varphi}(\Sigma_{33}^d + p) \tag{3.106}$$

En intégrant et en utilisant l'équation (3.104), on peut finalement écrire :

$$E_{33}(t) = \frac{2}{3}\Big(\frac{1}{2\mu} - \frac{1}{3k}\Big)(\Sigma_{11}^0 + p)\Big[\exp\Big(-\frac{t}{\tau_v}\Big) - 1\Big] + \frac{\alpha}{1-\varphi}(\Sigma_{33}^d + p)t + E_{33}^0 \tag{3.107}$$

Avec les hypothèses que l'on a choisies (porosité constante), le modèle prévoit que le matériau soumis à une charge constante dans des conditions oedométriques se compacte verticalement indéfiniment puisque le taux de déformation verticale admet pour asymptote :

$$\dot{E}_{33}^{\infty} = \frac{\alpha}{1-\varphi}(\Sigma_{33}^{d} + p) \tag{3.108}$$

Cette asymptote est proportionnelle à α, paramètre de la pression-dissolution que l'on a choisi constant. Puisqu'on a choisi un taux de déformation locale due à la pression-dissolution constant, il est cohérent que la déformation macroscopique se poursuive indéfiniment.

Dans la réalité, la pression-dissolution est ralentie au fur et à mesure que la porosité diminue. On peut donc s'attendre à ce que cette étude, menée avec des hypothèses moins radicales (mise à jour de la porosité et du coefficient α), permette une modélisation plus réaliste.

3.2.6 Conclusion

Dans cette section, nous avons proposé une méthode systématique pour étudier le comportement différé macroscopique engendré par le caractère visqueux de la physique locale de pression-dissolution.

Pour cela, nous avons choisi de modéliser le milieu par une distribution aléatoire de grains solides élastiques de forme ellipsoïdale. Les effets de la pression-dissolution sont eux modélisés via une déformation libre, exprimée localement en fonction de la contrainte dans le grain et de la pression de pore. L'obtention de l'équation d'état macroscopique avec couplage chémo-mécanique (équation (3.65)) se fait donc sous des hypothèses structurelles et chimiques relativement peu restrictives.

Notre méthode propose de résoudre numériquement cette équation différentielle et de faire évoluer la description microscopique du milieu afin de tenir compte de l'anisotropie de la déformation du solide en ovalisant les grains choisis initialement sphériques. Ainsi une fermeture de la porosité peut être obtenue à long-terme.

Une étude analytique de l'évolution du milieu a ensuite été menée pour une configuration oedométrique selon des hypothèses simplificatrices (pas de pression de pore, porosité fixe, inclusions de forme constamment sphérique). Dans ce cadre, une particularisation de la déformation libre a été écrite de façon homogène isotrope transverse autour de la direction verticale en se fondant sur le modèle développé dans Lehner and Leroy [2003]. Nous avons ainsi vérifié que ce modèle ne souffre pas des limites du modèle de grains à interface élasto-visqueuse présenté plus tôt (voir section 3.1).

3.3 Cas numérique unidimensionnel

Dans cette section, on traite numériquement la compaction d'un matériau élasto-visco-plastique dans un cas unidimensionnel. L'objectif est de retrouver des tendances de courbes porosité-profondeur réalistes qui prennent en compte la compaction à la fois mécanique et chimique, comme dans la figure 3.11.

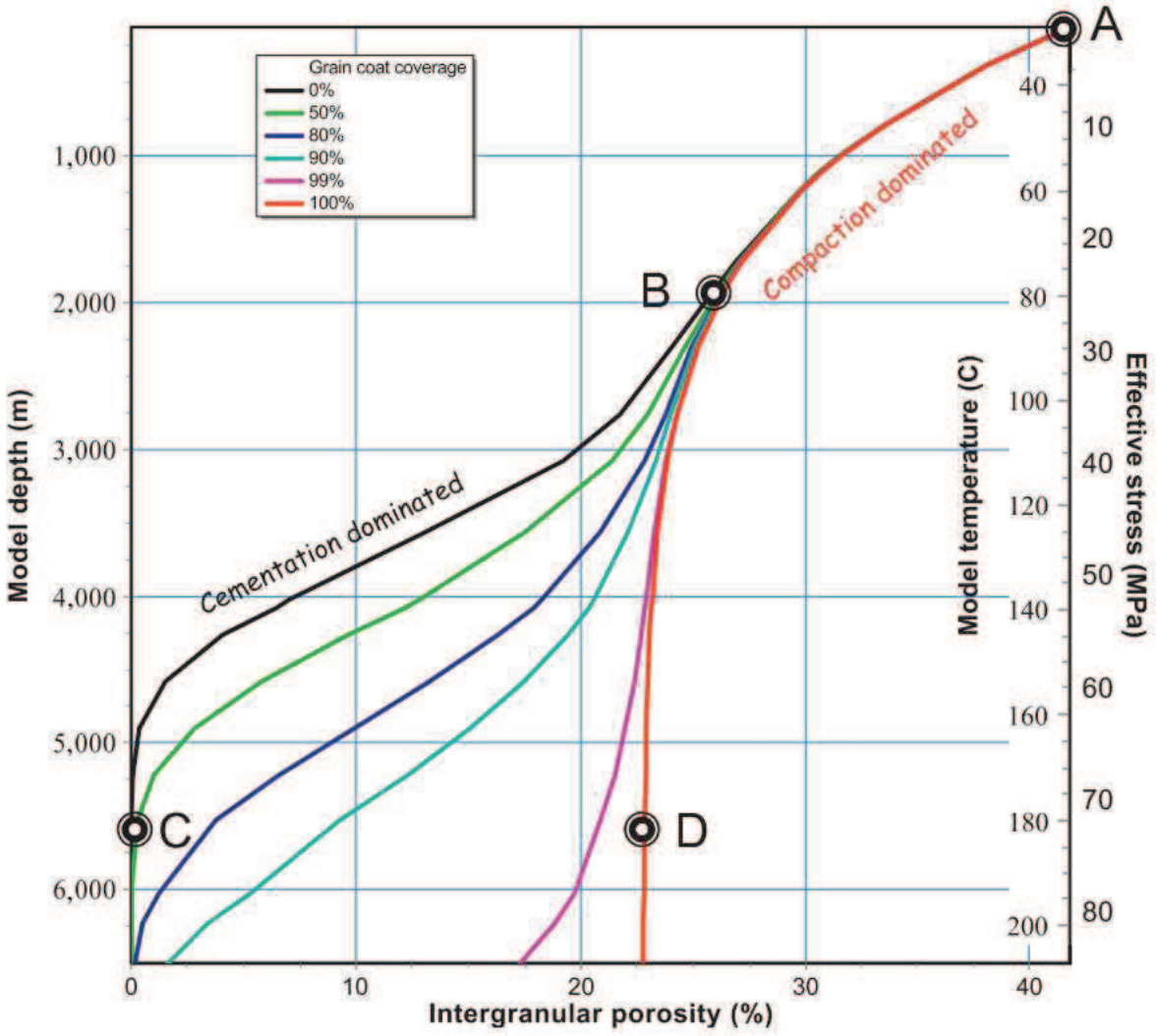


Figure 3.11 – Courbes porosité-profondeur en fonction du processus d'enfouissement et de la lithologie. Source : Ajdukiewicz and Lander [2010].

3.3.1 Traitement simplifié

Le code 1D a été écrit en différences finies et implémenté en Maple.
La formulation est fondée sur les solutions analytiques de la littérature :

– pour le régime élastique et élasto-plastique : Deudé [2002],
– pour le régime élasto-visco-plastique : Maghous [2009a].

3.3.2 Résultats de simulation

La figure 3.12 présente un profil porosité-profondeur obtenu avec ce code. On y distingue clairement trois phases de compaction :

– de 3000 m à 2800 m environ, le matériau subit une compaction élastique pure et la porosité ne varie quasiment pas.
– vers 2800 m environ, la courbe présente une rupture de pente qui correspond à l'entrée en plasticité du matériau. Cette phase de compaction élasto-plastique (compaction mécanique) se poursuit jusqu'à environ 1500 m.
– à partir de 1500 m environ, la viscosité est activée (compaction chimique) et la courbe porosité-profondeur entame un changement de concavité.

Comme le modèle ne contraint pas à maintenir la porosité positive, la simulation de compaction se poursuit même après qu'une porosité nulle ait été atteinte et la compaction ultérieure engendre des porosités négatives (non physiques).

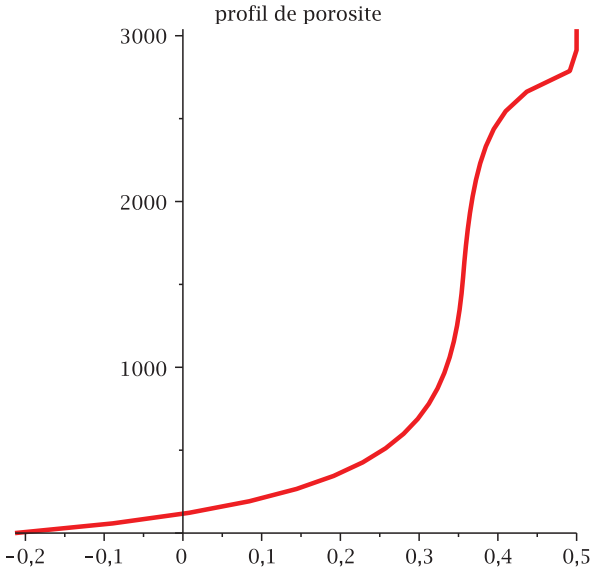


Figure 3.12 – Calcul de porosité d'une pile sédimentaire de 3000 m de hauteur.

Les figures 3.13 et 3.14 présentent des profils porosité-contrainte lithostatique calés sur des données réelles respectivement pour un argile et pour deux grès. Dans la figure 3.13, la simulation est représentée en vert et les mesures en rouge. Dans la figure 3.14, la simulation est représentée en jaune et les mesures en vert, pour le cas d'un grès n'ayant pas subi de compaction chimique ; et la simulation est représentée en bleu et les mesures en rouge, pour le cas d'un grès ayant subi une compaction chimique significative.

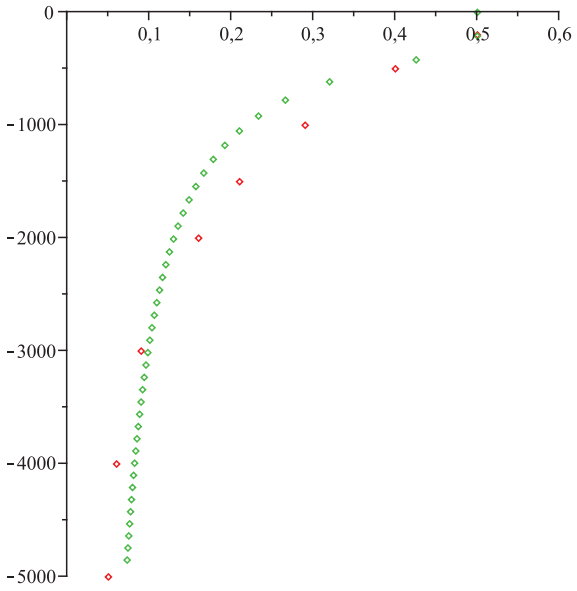


Figure 3.13 – Porosité en fonction de la contrainte lithostatique en MPa pour un argile (calée sur des données réelles).

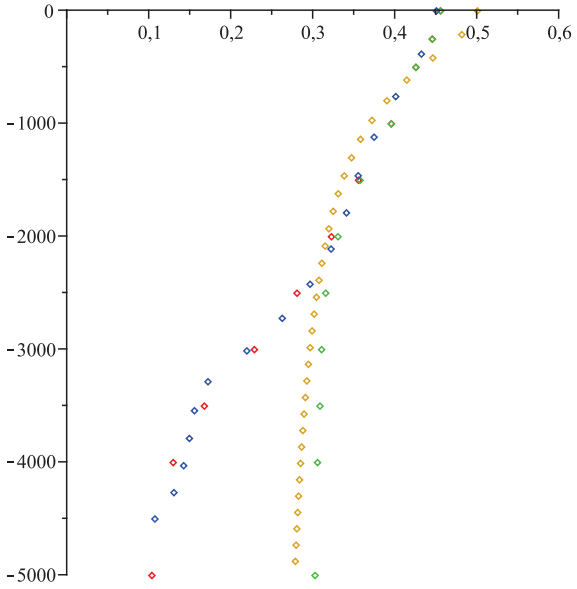


Figure 3.14 – Porosité en fonction de la contrainte lithostatique en MPa pour un grès.

Enfin, deux lois de perméabilités différentes pour les argiles ont été testées sur une colonne constituée d'une alternance argile/grès/argile. Cette configuration permet de simuler la compaction du grès dans un régime de surpression. La figure 3.15 présente les résultats de simulation donnant leur profil porosité-contrainte verticale. Dans le cas peu perméable, la couche de grès au centre (entre -55 et -80 MPa) est bien sur-pressurisée et présente une porosité plus forte (courbe rouge) que pour une compaction hydrostatique.

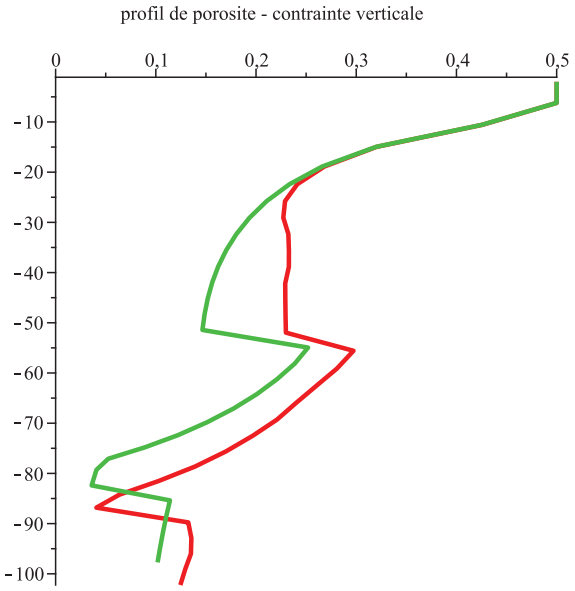


Figure 3.15 – Porosité en fonction de la contrainte lithostatique en MPa pour un assemblage argile-grès-argile.

3.3.3 Conclusion

Cette étude numérique 1D permet d'obtenir des profils porosité-profondeur présentant des tendances réalistes dans les cas de compaction chimique, tout en s'affranchissant des données empiriques porosité-profondeur habituellement requises pour de telles simulations. C'est ce type de courbe qu'on aimerait pouvoir générer dans les codes de simulation en 3D.

Avant cette étape de développement, nous souhaitons construire un code de simulation 3D capable de prédire de façon réaliste la compaction mécanique afin de calculer un état de contrainte et de déformation pertinent aux profondeurs où la compaction chimique devrait être activée. Les chapitres suivants suivent la conception de ce code.

Chapitre 4

Formulation faible du problème couplé hydromécanique

Sommaire

4.1 Ecriture du problème hydromécanique 64
4.1.1 Système d'équations 64
4.1.2 Conditions aux limites 65
4.1.3 Démarche de résolution 66
4.2 Méthode des éléments finis 66
4.2.1 Discrétisation géométrique 67
4.2.2 Approximation nodale 67
4.2.3 Ecriture du système d'équations discret 68
4.2.4 Résolution 68
4.2.5 Utilisation de GetFEM++ 68
4.3 Discrétisation temporelle du système à résoudre 69
4.3.1 Différences finies en temps 69
4.3.2 Traitement de la sédimentation 69
4.3.3 Transformations finies 69
4.4 Formulation faible 70
4.4.1 Formulation faible de la conservation des moments 70
4.4.2 Formulation faible de la conservation de la masse fluide 71
4.5 Evaluation sur la géométrie connue 72
4.5.1 Evaluation de la conservation des moments sur Ω_t 72
4.5.2 Evaluation de la conservation de la masse fluide sur Ω_t 73
4.6 Conclusion 74
4.6.1 Système à résoudre 74
4.6.2 Suite de la résolution 74

Ce chapitre a pour but de mettre en forme mathématiquement le problème hydromécanique que l'on veut simuler afin de préparer sa résolution numérique qui sera présentée dans le chapitre suivant.

Dans la section 4.1, nous explicitons le système d'équations locales de notre problème hydromécanique. Il est constitué d'équations fondamentales de la mécanique des milieux continus et d'équations de modélisation. Ces dernières sont fondées sur des modèles mécaniques macroscopiques décrits dans la section 2.2 et reliés aux phénomènes physiques microscopiques grâce à des techniques micromécaniques décrites dans la section 2.3. Les solutions de ces équations doivent satisfaire les conditions aux limites choisies dans l'énoncé du problème (section 1.3.2) que nous écrivons ici de façon mathématique dans la section 4.1.1.

Après avoir établi le système d'équations locales, nous introduisons dans la section 4.2 la démarche de résolution choisie qui fait appel à la méthode des éléments finis. Nous présentons alors comment le respect du scénario est affecté par la discrétisation temporelle que cette méthode implique et comment les grandes déformations sont gérées sur le plan mathématique grâce aux transformations finies dans la section 4.3.

Dans la suite, nous mettons en application ces choix de résolution pour transformer notre système d'équations : les équations locales sont exprimées de façon faible dans la partie 4.4 puis réécrites sur une géométrie connue dans la partie 4.5. Finalement, le système prêt à être résolu numériquement est présenté dans la partie 4.6.1.

4.1 Ecriture du problème hydromécanique

4.1.1 Système d'équations

Il s'agit de lois classiques des milieux continus, valables localement à l'échelle macroscopique.

L'équation d'équilibre :

$$\underline{div}\ \underline{\underline{\sigma}} + \rho \underline{g} = \underline{0} \tag{4.1}$$

où l'on note ρ la densité totale du VER (solide et fluide) et $\underline{g}$ le vecteur gravité.

L'équation de diffusion de masse fluide :

$$\dot{m} + J div\ \underline{w} = 0 \tag{4.2}$$

où l'on note m la quantité lagrangienne de masse fluide, J le Jacobien et $\underline{w}$ le vecteur flux.

Ces équations fondamentales sont complétées par des équations modélisant le matériau :

Le transport du fluide en milieu poreux, modélisé par la loi de Darcy (voir section 2.2.1) :

$$\frac{\underline{w}}{\rho^f} = \underline{\underline{K}} \cdot (-\underline{grad}\ p + \rho^f \underline{g}) \tag{4.3}$$

où l'on note ρ^f la densité du fluide, considérée constante.

Les équations d'état générales du milieu poreux (voir section 2.3.4) :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}^e - p\underline{\underline{B}} \tag{4.4}$$

$$\underline{\underline{B}} = \underline{\underline{1}} : (\mathbb{I} - \mathbb{C}^{s-1} : \mathbb{C}) \tag{4.5}$$

$$\mathbb{C} = (1-\varphi)\mathbb{C}^s < \mathcal{A} >_{\Omega^s} \tag{4.6}$$

où l'on note $\mathbb{C}$ le comportement homogénéisé du matériau et $\underline{\underline{B}}$ le tenseur de Biot.

Il semble que nous ayons de nombreuses inconnues : $\underline{\underline{\sigma}}$, ρ, $\dot{m}$, J, $\underline{w}$, $\underline{\underline{K}}$, p, $\mathbb{C}$, $\underline{\underline{\varepsilon}}$, $\underline{\underline{B}}$ et ϕ. En réalité, la porosité pilote la plupart d'entre elles. En effet, elle permet de calculer $\mathbb{C}$ et $\underline{\underline{B}}$ par une méthode d'homogénéisation (voir chapitre 3), $\underline{\underline{K}}$ grâce à la formule de Kozeny-Carman, $\dot{m}$ car le fluide est incompressible et ρ qui varie comme $\dot{m}$. De plus, le jacobien de la transformation J est par définition directement relié à la déformation $\underline{\underline{\varepsilon}}$, et celle-ci se calcule à partir du vecteur déplacement $\underline{u}$. Remarquons enfin que $\underline{\underline{\sigma}}$ est symétrique donc une partie de ses composantes seront déduites. Les inconnues restantes sont alors : $\underline{u}$, p, $\underline{w}$, $\underline{\underline{\sigma}}$ et ϕ.

En insérant l'équation (4.3) dans l'équation (4.2) et l'équation (4.4) dans l'équation (4.1), on obtient un système d'équations couplé en $\underline{u}$ et p, dont la solution nous permettra de calculer ϕ.

4.1.2 Conditions aux limites

Dans notre étude, le système d'équations hydromécaniques en $\underline{u}$ et p doit vérifier les conditions aux limites décrites dans l'énoncé du problème (voir section 1.3.2) et illustrées par la figure 4.1, qui se traduisent mécaniquement à chaque instant par les équations suivantes :

pour le solide :	sur Γ_{sup}	$\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n} = \underline{T}^d$	(4.7)
	sur Γ_{lat}	$\underline{u} \cdot \underline{n} = u^d$	(4.8)
	sur Γ_{lat}	$\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n} \;//\; \underline{n}$	(4.9)
	sur Γ_{inf}	$\underline{u} = \underline{0}$	(4.10)
pour le fluide :	sur Γ_{sup}	$p = p^d$	(4.11)
	sur Γ_{lat}	$\underline{w} \cdot \underline{n} = \underline{w}^d = 0$	(4.12)
	sur Γ_{inf}	$\underline{w} \cdot \underline{n} = \underline{w}^d = 0$	(4.13)

où l'on note :

$\underline{n}$	la normale unitaire extérieure au domaine
$\underline{T}^d$	le poids de la colonne d'eau
p^d	la pression (hydrostatique) de l'eau au dessus du domaine
u^d	le déplacement latéral imposé (d'origine tectonique par exemple)
Γ_{sup}	la surface supérieure du domaine
Γ_{lat}	les surfaces latérales du domaine
Γ_{inf}	la surface inférieure du domaine

On a ainsi défini sur tout le contour du domaine et pour chaque composante de nos inconnues soit une condition de Neumann, soit une condition de Dirichlet.

	conditions sur le solide	conditions sur le fluide
Γ_{sup}	Neumann (eq.(4.7))	Dirichlet (eq.(4.11))
Γ_{lat}	$\begin{cases}\text{Dirichlet selon } \underline{n} \text{ (eq.(4.8))} \\ \text{Neumann sinon (eq.(4.9))}\end{cases}$	Neumann (eq.(4.12))
Γ_{inf}	Dirichlet (eq.(4.10))	Neumann (eq.(4.13))

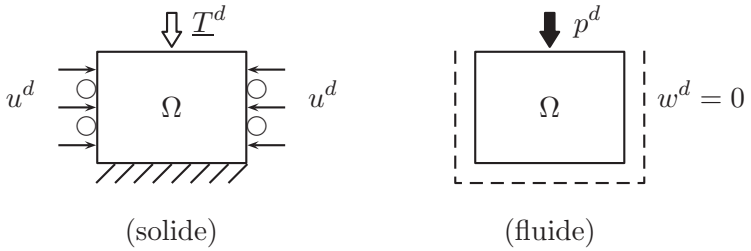


Figure 4.1 – Conditions aux limites mixtes de notre étude

Le même type de conditions aux limites pourraient être définies pour des géométries ou des scénarios plus complexes. Pour que notre formulation reste générale, nous noterons Γ^T et Γ^w les frontières où l'on applique des conditions de Neumann respectivement au solide et au fluide et Γ^u et Γ^p celles où l'on applique des conditions de Dirichlet respectivement au solide et au fluide.

Comme la hauteur entre le socle et la surface de l'eau reste constante, la hauteur de l'eau au-dessus du domaine rocheux varie avec la compaction du domaine. Le poids $\underline{T}^d$ et la pression p^d de la colonne d'eau sont donc calculés en fonction du tassement à l'actuel.

4.1.3 Démarche de résolution

On veut prendre en compte le fait que les propriétés du matériau peuvent évoluer au cours du temps, sous l'effet de la compaction ou de la relaxation de la roche. Or nous travaillons avec deux variables : la déformation et la pression. Et les équations qui permettent de les évaluer dépendent de paramètres qui évoluent avec le temps (comme la porosité). On crée donc un algorithme utilisant la méthode des éléments finis capable de mettre à jour ces paramètres à des étapes clés du calcul, de façon à témoigner de l'évolution non linéaire. Le chapitre 5 expliquera la gestion des non linéarités.

Le système constitué des équations (4.1) à (4.4) a deux inconnues : un champ de déplacement du squelette solide ($\underline{u}$) et un champ de pression de pore (p). Et certains paramètres du système dépendent indirectement/implicitement de ces inconnues : $\underline{\underline{\sigma}}$, ρ, $\dot{m}$, $\underline{\underline{\mathcal{K}}}$ et $\underline{w}$..

Dans le but de décrire au mieux la relation entre $\underline{\underline{\sigma}}$ et nos inconnues $\underline{u}$ et p, nous avons recours à des techniques de micromécanique dans le chapitre 3 pour estimer un modèle macroscopique correspondant aux propriétés et aux mécanismes microscopiques présentés dans le chapitre 2.

Dans ce chapitre, nous allons préparer notre problème de manière à pouvoir le résoudre numériquement par la méthode des éléments finis. Pour commencer, on rappelera brièvement le fonctionnement de cette méthode, puis on réécrira le système d'équations de façon *faible* (c'est-à-dire intégré sur l'ensemble du domaine et non plus écrit localement) et enfin on modifiera ces intégrales afin de les évaluer sur une configuration connue.

4.2 Méthode des éléments finis

La méthode des éléments finis est une méthode permettant de transformer un problème continu (la résolution d'une équation aux dérivées partielles en tout point d'un domaine Ω)

en un problème discret (un ensemble discret d'équations à résoudre en un ensemble discret de points).

Cette méthode se fait en 6 étapes [Oudin 2011] :

1. discrétisation du milieu continu en sous domaines
2. construction de l'approximation nodale par sous domaine
3. calcul des matrices élémentaires correspondant à la forme intégrale du problème
4. assemblage des matrices élémentaires
5. prise en compte des conditions aux limites
6. résolution du système d'équations

4.2.1 Discrétisation géométrique

On procède à une découpe du domaine Ω en une partition de sous domaines. On associe alors un *maillage* au domaine Ω dont chaque *élément* définit un sous domaine. La méthode des éléments finis consiste à chercher à définir une approximation de la fonction solution X sur chacun de ces éléments.

Lorsque la frontière du domaine est complexe, il est difficile voire impossible de définir un maillage qui décrit parfaitement la géométrie réelle du domaine d'étude. On introduit alors une erreur de discrétisation géométrique, qui peut être réduite par différentes techniques (en raffinant la taille des éléments au niveau des courbures ou en utilisant des éléments courbes à la frontière du domaine par exemple).

Dans notre cas, nous traitons un domaine dont la géométrie est extrêmement simple : il s'agit d'un parallélépipède rectangle et les éléments du maillage sont soit des tétraèdres, soit des quadrilatères.

4.2.2 Approximation nodale

On cherche à construire une approximation X' du champ des variables X par sous domaine. Cette approximation est construite sur les valeurs approchées du champ aux noeuds de l'élément considéré et on parle donc d'*approximation nodale*.

Pour un élément e, on calcule une valeur de la fonction approchée X' en tout point $\underline{x}$ du sous domaine Ω_e de cette façon :

$$\forall \underline{x} \in \Omega_e, \quad X'(\underline{x}) = N(\underline{x}) X_n \tag{4.14}$$

où N désigne la matrice ligne des fonctions d'interpolation de l'élément et X_n sont les variables nodales relatives aux noeuds d'interpolation de l'élément.

Il existe de multiples fonctions d'interpolation. Dans notre cas, nous utilisons une base polynomiale sur des éléments de type Lagrange. Nous choisissons une approximation quadratique pour le champ de déplacement $\underline{u}$ et une approximation linéaire pour le champ de pression de pore p.

4.2.3 Ecriture du système d'équations discret

Le système d'équations à résoudre est formulé de façon *faible* : le système d'équations valables localement en tout point du matériau est en effet transformé en équations intégrées sur l'ensemble du domaine Ω_t grâce au principe des travaux virtuels (voir section 4.4).

L'approximation nodale est ensuite utilisée dans cette forme variationnelle pour exprimer le champ des variables X et son champ virtuel associé $\hat{X}$. On peut alors extraire les valeurs de X aux noeuds des intégrales. On obtient ainsi un ensemble discret d'équations à résoudre dont l'inconnue est un vecteur $\underline{X}$ qui contient les valeurs de X aux noeuds.

L'évaluation des intégrales sur l'ensemble du domaine se fait numériquement selon une méthode de quadrature de Gauss.

Dans la suite, nous ne faisons pas apparaître l'approximation nodale. Nous introduirons les matrices $\mathcal{G}$ et $\mathcal{J}$ alors que les équations correspondantes seront écrites de façon symbolique en fonction des champs solutions $\underline{u}$ et p. Cela permet d'alléger notablement l'écriture.

4.2.4 Résolution

On obtient au final un système de la forme :

$$\underline{\underline{K}} \cdot \underline{X} = \underline{F} \tag{4.15}$$

où $\underline{X}$ est une vecteur qui contient les valeurs aux noeuds du champ solution X, $\underline{\underline{K}}$ est la matrice obtenue par l'assemblage des matrices élémentaires et $\underline{F}$ est un vecteur assemblé relatif aux conditions imposées.

Différents solvers numériques permettent de résoudre efficacement de type d'équations, comme par exemple SuperLU. La résolution de ce système matriciel permet alors de connaître $\underline{X}$ et l'approximation nodale permet finalement d'estimer le champ solution en tout point du domaine.

4.2.5 Utilisation de GetFEM++

Dans notre implémentation, nous faisons appel à la biliothèque **GetFEM++**, une bibliothèque d'éléments finis générique en C++ dont l'objectif est d'offrir la gamme d'éléments la plus large possible et un calcul de matrices élémentaires également le plus large possible pour l'approximation de problèmes linéaires ou non-linéaires, éventuellement en formulation mixte et éventuellement couplés. La dimension du problème est arbitraire et peut être un paramètre du problème. Getfem++ propose une description de modèles sous la forme de *briques* dont l'objectif est de permettre une réutilisabilité maximale des approximations réalisées. Le système de briques permet d'assembler des composantes telles que modèles standards (élasticité en petite et grandes déformations, problème de Helmholtz, problème elliptique scalaire ...) à des composantes représentant des conditions aux limites (Neumann, Dirichlet, Fourier-Robin, contact avec frottement ...), des composantes représentant des contraintes (incompressibilité, annulation de mouvements rigides ...) et des composantes de couplage de modèles. Les deux points forts de Getfem++ sont la mécanique des structures (en particulier la mécanique du contact) et la prise en compte des discontinuités par des méthodes de domaines fictifs de type Xfem (fissuration par exemple) [https ://www.projet plume.org/fiche/getfem 2012].

Dans notre cas, GetFEM++ est appelée pour gérer :

– l'approximation nodale
– l'intégration numérique
– l'assemblage des matrices élémentaires
– la résolution matricielle

4.3 Discrétisation temporelle du système à résoudre

On suivons la même démarche que Bernaud et al. [2002].

4.3.1 Différences finies en temps

Rappelons tout d'abord que nous utilisons ici une modélisation directe (cf. section 1.1.3) : l'évolution mécanique du domaine est étudiée dans le sens chronologique.

On travaille en explicite.

On introduit une discrétisation en temps, c'est-à-dire que l'on évalue notre solution seulement en un ensemble fini d'instants. Comme on travaille avec des phénomènes physiques irréversibles, on calcule la solution d'un instant donné à partir de la solution de l'instant d'avant, dans l'ordre choronologique. Dans la suite, on appelera t l'instant qui vient d'être évalué et t' l'instant auquel on veut calculer la solution. Pour toute quantité a, on note son incrément entre t et t' : $\Delta a = {}^{t'}a - {}^{t}a$ sauf pour les variables suivantes :

$$\mathcal{P} = \Delta p \qquad\qquad \underline{\mathcal{U}} = \Delta \underline{x}$$
$$\underline{\underline{\mathcal{E}}} = \left\{ \frac{\partial \underline{\mathcal{U}}}{\partial {}^{t}\underline{x}} \right\}_s$$

4.3.2 Traitement de la sédimentation

La sédimentation est un phénomène continu dans le temps que nous traitons de façon discrète. La masse sédimentée dans l'intervalle de temps $[t; t']$ est ajoutée soudainement à l'instant $t+$ de sorte qu'on travaille avec un milieu fermé dans l'intervalle de temps $]t; t']$.

4.3.3 Transformations finies

Nous adoptons un schéma Lagrangien réactualisé comme Bourgeois et al. [1995] : les incréments de temps Δt sont choisis suffisamment petits pour qu'on considère le matériau soumis à de petites déformations entre deux instants consécutifs. La transformation entre les configurations initiale et actuelle témoigne par contre de grandes déformations (comme illustré par fig.4.2).

Les variables statiques et cinématiques sont alors estimées relativement à la configuration précédente (Ω_t) et nous réécrivons le système d'équations de l'instant t' pour évaluer les gradients et les intégrales sur la géométrie de l'instant t.

Ce schéma est construit pour être utilisé avec de petits incréments de temps Δt, en supposant que l'on obtient la solution exacte quand Δt tend vers 0. Ici, pour limiter le nombre de termes tout en gardant suffisamment de précision, nous approximons les équations au second ordre en temps. L'utilisation du schéma lagrangien réactualisé nous permet d'écrire : $\| {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}})^2 \| =$

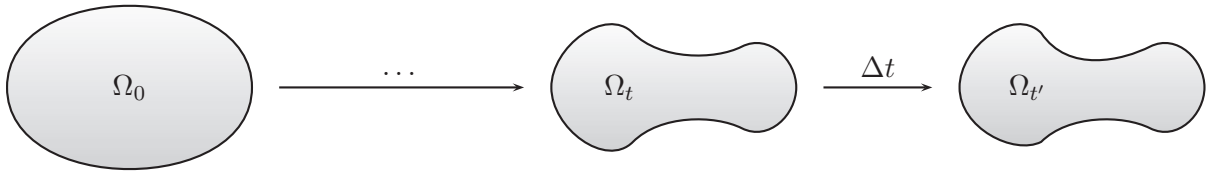


Figure 4.2 – Illustration du schéma Lagrangien réactualisé

$tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}})^2 = \mathcal{O}\Big((\Delta t)^2\Big)$ où $\mathcal{O}$ est le grand O de la notation de Landau. Pour alléger l'écriture, nous noterons $\mathcal{O}^2$ pour $\mathcal{O}\Big((\Delta t)^2\Big)$ dans la suite.

Entre les instants t et t', le gradient de la transformation du squelette, noté $\underline{\underline{F}}_{tt'}$, s'écrit :

$$\underline{\underline{F}}_{tt'} = \frac{\partial\, {}^{t'}\underline{x}}{\partial\, {}^{t}\underline{x}} = \underline{\underline{1}} + \frac{\partial \underline{\mathcal{U}}}{\partial\, {}^{t}\underline{x}} = \underline{\underline{1}} + {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}) \tag{4.16}$$

Un développement limité au deuxième ordre nous permet d'évaluer son inverse et son déterminant :

$$\underline{\underline{F}}^{-1}_{tt'} = \underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}) + \mathcal{O}^2 \tag{4.17}$$

$$det(\underline{\underline{F}}_{tt'}) = 1 + tr\frac{\partial \underline{\mathcal{U}}}{\partial\, {}^{t}\underline{x}} + \mathcal{O}^2 = 1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}) + \mathcal{O}^2 \tag{4.18}$$

Les gradients et le volume élémentaire d'intégration sont alors approximés ainsi :

$${}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}(\quad) = {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\quad) \cdot \underline{\underline{F}}^{-1}_{tt'} = {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\quad) \cdot (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}})) + \mathcal{O}^2 \tag{4.19}$$

$$d\Omega_{t'} = det(\underline{\underline{F}}_{tt'})\ d\Omega_t = (1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))\ d\Omega_t + \mathcal{O}^2 \tag{4.20}$$

La réécriture de la formulation complète est menée dans la section 4.5.

4.4 Formulation faible

Dans cette partie, on transforme les deux équations (4.1) et (4.2) valables localement en tout point du matériau en équations intégrées sur l'ensemble du domaine Ω_t.

4.4.1 Formulation faible de la conservation des moments

Partant de l'équation (4.1) et en utilisant la formule de Green, on obtient la formulation faible suivante pour tout champ virtuel $\hat{\underline{\mathcal{U}}}$:

$$\int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} : {}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}})\ d\Omega_{t'} = \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\rho \underline{g} \cdot \hat{\underline{\mathcal{U}}}\ d\Omega_{t'} + \int_{\Gamma_{t'}} {}^{t'}\underline{n} \cdot \ {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{\mathcal{U}}}\ dS_{t'} \tag{4.21}$$

Comme ceci est valable pour tout champ virtuel $\hat{\underline{\mathcal{U}}}$, c'est en particulier vrai pour les champs $\hat{\underline{\mathcal{U}}}$ qui s'annulent sur $\Gamma^u_{t'}$. On supposera dans la suite cette propriété vérifiée. On utilise de plus la condition aux limites (4.7) :

$$\int_{\Gamma_{t'}} {}^{t'}\underline{n} \cdot {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{\mathcal{U}}} \, dS_{t'} = \int_{\Gamma^T_{t'}} {}^{t'}\underline{T}^d \cdot \hat{\underline{\mathcal{U}}} \, dS_{t'} \tag{4.22}$$

alors le Principe des Travaux Virtuels nous donne la forme faible suivante :

$$\boxed{\int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} : {}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) \, d\Omega_{t'} = \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\rho \underline{g} \cdot \hat{\underline{\mathcal{U}}} \, d\Omega_{t'} + \int_{\Gamma^T_{t'}} {}^{t'}\underline{T}^d \cdot \hat{\underline{\mathcal{U}}} \, dS_{t'}} \tag{4.23}$$

4.4.2 Formulation faible de la conservation de la masse fluide

Maintenant que l'équation d'équilibre locale (4.1) est traitée, nous travaillons sur l'équation de la conservation de la masse fluide (4.2) à l'instant t' :

$$\begin{aligned} & \dot{m} + J_{0t'} \, {}^{t'}\underline{\nabla} \cdot {}^{t'}\underline{w} = 0 \\ \Leftrightarrow \quad & \frac{\dot{m}}{J_{0t'}} + {}^{t'}\underline{\nabla} \cdot {}^{t'}\underline{w} = 0 \\ \Leftrightarrow \quad & \frac{1}{{}^{t'}\rho^f} \Big(\frac{\dot{m}}{J_{0t'}} + {}^{t'}\underline{\nabla} \cdot {}^{t'}\underline{w} \Big) = 0 \end{aligned}$$

Puisque le fluide est supposé incompressible, on note désormais ρ^f sans préciser l'instant. On obtient la formulation faible suivante pour un champ virtuel $\hat{\mathcal{P}}$ que l'on choisit nul sur $S^P_{t'}$:

$$\int_{\Omega_{t'}} \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f} \Big(\frac{\dot{m}}{J_{0t'}} + {}^{t'}\underline{\nabla} \cdot {}^{t'}\underline{w} \Big) \, d\Omega_{t'} = 0 \tag{4.24}$$

Le théorème de la divergence donne :

$$\int_{\Omega_{t'}} \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f} \, {}^{t'}\underline{\nabla} \cdot {}^{t'}\underline{w} \, d\Omega_{t'} = - \int_{\Omega_{t'}} \frac{{}^{t'}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f} \cdot {}^{t'}\underline{w} \, d\Omega_{t'} + \int_{\Gamma_{t'}} \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f} \, {}^{t'}\underline{w} \cdot \underline{dS}_{t'} \tag{4.25}$$

et puisque $\hat{\mathcal{P}} = 0$ sur $S^P_{t'}$, les conditions aux limites sur le flux (4.12) et (4.13) donnent :

$$\int_{\Gamma_{t'}} \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f} \, {}^{t'}\underline{w} \cdot \underline{dS}_{t'} = \int_{\Gamma^w_{t'}} \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f} \, {}^{t'}w^d \, dS_{t'} \tag{4.26}$$

donc l'équation (4.24) devient :

$$\int_{\Omega_{t'}} \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f} \frac{\dot{m}}{J_{0t'}} \, d\Omega_{t'} - \int_{\Omega_{t'}} \frac{{}^{t'}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f} \cdot {}^{t'}\underline{w} \, d\Omega_{t'} = - \int_{\Gamma^w_{t'}} \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f} \, {}^{t'}w^d \, dS_{t'} \tag{4.27}$$

On utilise la loi de Darcy (équation (4.3)) à l'instant t' :

$$\frac{{}^{t'}\underline{w}}{\rho^f} = {}^{t'}\underline{\underline{K}} \cdot (- {}^{t'}\underline{\nabla} \, {}^{t'}p + \rho^f \underline{g}) \tag{4.28}$$

ce qui donne :

$$\int_{\Omega_{t'}} \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f}\frac{\dot{m}}{J_{0t'}}\, d\Omega_{t'} - \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot (-{}^{t'}\underline{\nabla}\,{}^{t'}p + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_{t'} = -\int_{\Gamma^w_{t'}} \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f}\,{}^{t'}w^d\, dS_{t'} \tag{4.29}$$

Comme le fluide est supposé incompressible, nous avons :

$$\dot{m} = \rho^f \dot{\phi} \tag{4.30}$$

donc l'équation (4.29) devient :

$$\int_{\Omega_{t'}} \hat{\mathcal{P}}\frac{\dot{\phi}}{J_{0t'}}\, d\Omega_{t'} - \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot (-{}^{t'}\underline{\nabla}\,{}^{t'}p + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_{t'} = -\int_{\Gamma^w_{t'}} \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f}\,{}^{t'}w^d\, dS_{t'} \tag{4.31}$$

Puis en multipliant l'équation précédente par Δt et en appliquant le schéma en différences finies implicite, on obtient :

$$\boxed{\int_{\Omega_{t'}} \hat{\mathcal{P}}\frac{\Delta\phi}{J_{0t'}}\, d\Omega_{t'} - \int_{\Omega_{t'}} \Delta t\, {}^{t'}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot (-{}^{t'}\underline{\nabla}\,{}^{t'}p + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_{t'} = -\int_{\Gamma^w_{t'}} \Delta t\frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f}\,{}^{t'}w^d\, dS_{t'}} \tag{4.32}$$

4.5 Evaluation sur la géométrie connue

On applique la démarche exposée dans la section 4.3.3 (transformations finies) en reprenant les équations (4.17) à (4.20). On introduit la notation α (équation (4.33)) et l'équation (4.20) devient ainsi l'équation (4.34) :

$$\alpha = 1 + tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}) \tag{4.33}$$

$$d\Omega_{t'} = \alpha\, d\Omega_t + \mathcal{O}^2 \tag{4.34}$$

4.5.1 Evaluation de la conservation des moments sur Ω_t

Intéressons nous à la première intégrale de l'équation (4.23). Par définition de $\underline{\underline{F}}_{tt'}$, nous avons :

$$\frac{\partial\hat{\underline{\mathcal{U}}}}{\partial^t\underline{x}} = \frac{\partial\hat{\underline{\mathcal{U}}}}{\partial\,{}^{t'}\underline{x}} \cdot \frac{\partial\,{}^{t'}\underline{x}}{\partial^t\underline{x}} = \frac{\partial\hat{\underline{\mathcal{U}}}}{\partial\,{}^{t'}\underline{x}} \cdot \underline{\underline{F}}_{tt'} \qquad \text{donc} \qquad {}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) = {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) \cdot \underline{\underline{F}}^{-1}_{tt'} \tag{4.35}$$

Puis grâce aux équations (4.17) et (4.34), on obtient :

$${}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}})\, d\Omega_{t'} = {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) \cdot \Big(\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}) + \mathcal{O}^2\Big)\Big(\alpha + \mathcal{O}^2\Big)\, d\Omega_t$$

$${}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}})\, d\Omega_{t'} = {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) \cdot \Big(\alpha\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}})\Big)\, d\Omega_t + \mathcal{O}^2 \tag{4.36}$$

On introduit la notation suivante :

$$\underline{\underline{\mathcal{T}}} = \alpha\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}) \tag{4.37}$$

$$\boxed{{}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}})\, d\Omega_{t'} = {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}}\, d\Omega_t + \mathcal{O}^2} \tag{4.38}$$

Traitons maintenant la deuxième intégrale de l'équation (4.23) qui contient ${}^{t'}\rho\, d\Omega_{t'}$. Dans notre problème, la variation de masse du volume élémentaire n'est due qu'à la variation de masse fluide. On peut donc écrire :

$$ {}^{t'}\rho\, d\Omega_{t'} = {}^{t}\rho\, d\Omega_t + \Delta m\, d\Omega_0 \tag{4.39}$$

(m est une quantité lagrangienne par rapport à la configuration de référence)

Comme le fluide est incompressible, on a :

$$ \Delta m = \rho^f \Delta\phi \tag{4.40}$$

On obtient alors sur la configuration $d\Omega_t$:

$$ {}^{t'}\rho\, d\Omega_{t'} = {}^{t}\rho\, d\Omega_t + \rho^f \frac{\Delta\phi}{J_{0t}}\, d\Omega_t \tag{4.41}$$

Passons à la dernière intégrale de l'équation (4.23) qui contient ${}^{t'}\underline{T}^d\, dS_{t'}$.
Puisque ${}^{t}\underline{x} = J_{tt'}\underline{\underline{F}}_{tt'}^{-T} \cdot {}^{t'}\underline{x}$ (où $\underline{\underline{F}}_{tt'}^{-T}$ désigne la transposée de l'inverse de $\underline{\underline{F}}_{tt'}$), nous avons :

$$\begin{aligned}
{}^{t'}\underline{T}^d\, dS_{t'} &= -\,{}^{t'}p\underline{1} \cdot \underline{dS}_{t'} && (4.42)\\
&= -\,{}^{t'}p det(\underline{\underline{F}}_{tt'})\underline{\underline{F}}_{tt'}^{-T} \cdot \underline{dS}_t && (4.43)\\
&\simeq -\,{}^{t'}p\alpha(\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}^T(\underline{\mathcal{U}})) \cdot \underline{dS}_t && (4.44)\\
&\simeq -\,{}^{t'}p(\alpha\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}^T(\underline{\mathcal{U}})) \cdot \underline{dS}_t && (4.45)\\
&\simeq -\,{}^{t'}p\underline{\underline{\mathcal{I}}}^T \cdot \underline{dS}_t && (4.46)
\end{aligned}$$

$$\boxed{\int_{\Omega_t} {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} : ({}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) \cdot \underline{\underline{\mathcal{I}}})\, d\Omega_t = \int_{\Omega_t} \Big({}^{t}\rho + \rho^f \frac{\Delta\phi}{J_{0t}}\Big)\underline{g} \cdot \hat{\underline{\mathcal{U}}}\, d\Omega_t - \int_{\Gamma_t^T} {}^{t'}p\hat{\underline{\mathcal{U}}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{I}}}^T \cdot \underline{dS}_t} \tag{4.47}$$

4.5.2 Evaluation de la conservation de la masse fluide sur Ω_t

Puisque $\dfrac{d\Omega_{t'}}{J_{0t'}} = \dfrac{d\Omega_t}{J_{0t}}$, la première intégrale de l'équation (4.32) s'évalue sans difficulté sur Ω_t :

$$ \int_{\Omega_{t'}} \hat{\mathcal{P}} \frac{\Delta\phi}{J_{0t'}}\, d\Omega_{t'} = \int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}} \frac{\Delta\phi}{J_{0t}}\, d\Omega_t \tag{4.48}$$

On approxime la deuxième intégrale de l'équation (4.32) en utilisant les équations (4.17) et (4.34) :

$$\begin{aligned}
& {}^{t'}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot (-\,{}^{t'}\underline{\nabla}\,{}^{t'}p + \rho^f\underline{g})\, d\Omega_{t'}\\
\simeq\ & \Big({}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}))\Big) \cdot {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot \Big(-\,({}^{t}\underline{\nabla}\,{}^{t'}p \cdot (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}))) + \rho^f\underline{g}\Big)(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))\, d\Omega_t\\
\simeq\ & {}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot (-{}^{t}\underline{\nabla}\,{}^{t'}p + \rho^f\underline{g})\, d\Omega_t\\
& - \Big({}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}})\Big) \cdot {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot (-{}^{t}\underline{\nabla}\,{}^{t'}p + \rho^f\underline{g})\, d\Omega_t\\
& + {}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot ({}^{t}\underline{\nabla}\,{}^{t'}p \cdot {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}))\, d\Omega_t\\
& + {}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot (-{}^{t}\underline{\nabla}\,{}^{t'}p + \rho^f\underline{g})\, tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}})\, d\Omega_t\\
\simeq\ & {}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{I}}} \cdot {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot (-{}^{t}\underline{\nabla}\,{}^{t'}p + \rho^f\underline{g})\, d\Omega_t + {}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot ({}^{t}\underline{\nabla}\,{}^{t'}p \cdot {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}))\, d\Omega_t
\end{aligned} \tag{4.49}$$

On approxime la troisième intégrale de l'équation (4.32) en utilisant l'équation (4.16) :

$$\begin{aligned} dS_{t'} &= \|\underline{dS}_{t'}\| \\ &= \|det(\underline{\underline{F}}_{tt'})\underline{\underline{F}}_{tt'}^{-1} \cdot \underline{dS}_t\| \\ &\simeq \alpha\|(\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}})) \cdot {}^t\underline{n}\| \; dS_t \\ &= \alpha\sqrt{({}^t\underline{n} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}) \cdot {}^t\underline{n}) \cdot ({}^t\underline{n} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}) \cdot {}^t\underline{n})} \; dS_t \\ &\simeq \alpha\sqrt{1 - 2{}^t\underline{n} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}) \cdot {}^t\underline{n}} \; dS_t \\ &\simeq \Big(\alpha - {}^t\underline{n} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}) \cdot {}^t\underline{n}\Big) \; dS_t \\ &= {}^t\underline{n} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}} \cdot {}^t\underline{n} \; dS_t \end{aligned} \tag{4.50}$$

Au final, l'équation (4.32) devient :

$$\boxed{\begin{aligned} \int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}} \frac{\Delta\phi}{J_{0t}} \; d\Omega_t \; &- \int_{\Omega_t} \Delta t {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}} \cdot \; {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot (-{}^t\underline{\nabla} \; {}^{t'}p + \rho^f \underline{g}) \; d\Omega_t \\ &- \int_{\Omega_t} \Delta t {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \; {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot ({}^t\underline{\nabla} \; {}^{t'}p \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}})) \; d\Omega_t \\ = \; &- \int_{\Gamma_t^w} \Delta t \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f} \; {}^{t'}w^{dt}\underline{n} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}} \cdot {}^t\underline{n} \; dS_t \end{aligned}} \tag{4.51}$$

4.6 Conclusion

4.6.1 Système à résoudre

Notre système est donc constitué des deux équations (4.47) et (4.51). On met l'équation (4.47) sous la forme :

$$\int_{\Omega_t} {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} : ({}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}}) \; d\Omega_t - \int_{\Omega_t} \Big({}^t\rho + \rho^f \frac{\Delta\phi}{J_{0t}}\Big)\underline{g} \cdot \hat{\underline{\mathcal{U}}} \; d\Omega_t + \int_{\Gamma_t^T} {}^{t'}p\hat{\underline{\mathcal{U}}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}}^T \cdot \underline{dS}_t \quad = \quad 0 \tag{4.52}$$

On met l'équation (4.51) sous la forme :

$$\begin{aligned} &- \int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}} \frac{\Delta\phi}{J_{0t}} \; d\Omega_t + \int_{\Omega_t} \Delta t {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}} \cdot \; {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot (-{}^t\underline{\nabla} \; {}^{t'}p + \rho^f \underline{g}) \; d\Omega_t \\ &+ \int_{\Omega_t} \Delta t {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \; {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot ({}^t\underline{\nabla} \; {}^{t'}p \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}})) \; d\Omega_t - \int_{\Gamma_t^w} \Delta t \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f} \; {}^{t'}w^{dt}\underline{n} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}} \cdot {}^t\underline{n} \; dS_t \quad = \quad 0 \end{aligned} \tag{4.53}$$

On a veillé à prendre un signe négatif pour le terme en $\Delta\phi$, ce qui permet d'avoir une matrice symétrique dans le cas poroélastique HPP (linéaire).

4.6.2 Suite de la résolution

Ainsi dans ce chapitre, nous avons formulé (en équations (4.52) et (4.53)) le système d'équations discret du problème hydromécanique énoncé en section 1.3.2 pour le résoudre par la méthode des éléments finis (voir section 4.2).

Certaines quantités physiques de ce système dépendent des champs d'inconnues $\underline{u}$ et p :

- $\underline{\underline{\mathcal{T}}}$ dépend linéairement de $\underline{u}$
- $\Delta\phi$ dépend non linéairement de $\underline{u}$ et p
- ${}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}}$ dépend de $\Delta\phi$ car dans notre modèle la perméabilité dépend de la porosité selon la loi de Kozeny-Carman (voir équation (2.6))
- ${}^{t'}\underline{\underline{\sigma}}$ dépend non linéairement de $\underline{u}$ et p

Pour résoudre le système, nous appliquons une méthode itérative pour traiter les non linéarités liées à $\Delta\phi$ et ${}^{t'}\underline{\underline{\sigma}}$. C'est l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 5

Résolution numérique dans le cas isotrope poro-élasto-plastique

Sommaire

5.1 Intégration en temps 78
5.1.1 Lois d'état 78
5.1.2 Schéma d'intégration en temps 81
5.1.3 Système à résoudre 83
5.2 Méthode de résolution 83
5.2.1 Algorithme de Newton-Raphson 83
5.2.2 Algorithme d'intégration locale de la plasticité 85
5.2.3 Algorithme général 85
5.3 Evaluation du second membre 86
5.4 Evaluation de la matrice tangente 87
5.4.1 Ecriture de la matrice tangente 87
5.4.2 Contribution de la plasticité 90
5.4.3 Expression des Jacobiennes 91

Ce chapitre a pour but d'établir une méthode pour résoudre le système d'équations obtenu à la fin du chapitre précédent (équations (4.52) et (4.53)) en traitant ses non linéarités dans le cas d'un matériau isotrope poro-élasto-plastique.

Nous commençons par expliciter en section 5.1.1 les lois d'évolution des deux paramètres non linéaires du système : ϕ et $\underline{\underline{\sigma}}$. Puis on estime $\Delta\phi$ et $\Delta\underline{\underline{\sigma}}$ en utilisant un schéma d'intégration en temps explicite (section 5.1.2). On obtient ainsi un nouveau système à résoudre (équations (5.51) et (5.53)) qui est linéarisé par rapport aux variables et fait intervenir la déformation plastique entre les instants t et t', notée $\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P$.

Nous présentons ensuite l'algorithme de Newton-Raphson, un algorithme classique de résolution itérative (section 5.2.1), que l'on utilise pour trouver l'équilibre hydromécanique. Cet algorithme est également utilisé pour l'intégration locale de la plasticité (section 5.2.2). Nous présentons alors un algorithme adapté à notre étude qui permet d'inclure l'évaluation locale de la déformation plastique $\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P$ (section 5.2.3) à la résolution du système hydromécanique couplé.

Le reste du chapitre est davantage calculatoire et explicite les termes du système à implémenter.

5.1 Intégration en temps

5.1.1 Lois d'état

Evaluation de la contrainte candidate

Comme vu en section 2.3.4, la loi d'état du matériau poreux élasto-plastique s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}^e - p\underline{\underline{B}} \tag{5.1}$$

où $\mathbb{C}$ et $\underline{\underline{B}}$ sont évaluées respectivement avec les équations (2.14) et (2.13).

Comme on travaille en grandes déformations, on décompose le tenseur du gradient de transformation $\underline{\underline{F}}$ en sa partie réversible (élastique) $\underline{\underline{E}}$ et sa partie irréversible (plastique) $\underline{\underline{P}}$ (voir fig.(5.1)) :

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{P}} \tag{5.2}$$

On définit $\underline{\underline{L}} = \dot{\underline{\underline{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1}$ et $\underline{\underline{L}}^P = \dot{\underline{\underline{P}}} \cdot \underline{\underline{P}}^{-1}$. On obtient alors :

$$\underline{\underline{L}} = \dot{\underline{\underline{E}}} \cdot \underline{\underline{E}}^{-1} + \underline{\underline{E}} \cdot \dot{\underline{\underline{P}}} \cdot \dot{\underline{\underline{P}}}^{-1} \cdot \underline{\underline{E}}^{-1} = \dot{\underline{\underline{E}}} \cdot \underline{\underline{E}}^{-1} + \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{L}}^P \cdot \underline{\underline{E}}^{-1} \tag{5.3}$$

On approxime $\underline{\underline{E}}$ au second ordre en supposant que la déformation élastique est infinitésimale :

$$\underline{\underline{E}} = \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{\varepsilon}}^e \tag{5.4}$$

Cela donne :

$$\underline{\underline{L}} \simeq \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^e + \underline{\underline{\varepsilon}}^e \cdot \underline{\underline{L}}^P - \underline{\underline{L}}^P \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}^e + \underline{\underline{L}}^P \tag{5.5}$$

On note $\underline{\underline{L}}_s^P$ la partie symétrique de $\underline{\underline{L}}^P$ et $\underline{\underline{L}}_a^P$ sa partie anti-symétrique. Alors le tenseur taux de rotation (noté $\underline{\underline{\Omega}}$) qui est la partie anti-symétrique de $\underline{\underline{L}}$, s'écrit :

$$\underline{\underline{\Omega}} \;=\; \underline{\underline{\varepsilon}}^e \cdot \underline{\underline{L}}_s^P - \underline{\underline{L}}_s^P \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}^e + \underline{\underline{L}}_a^P \tag{5.6}$$

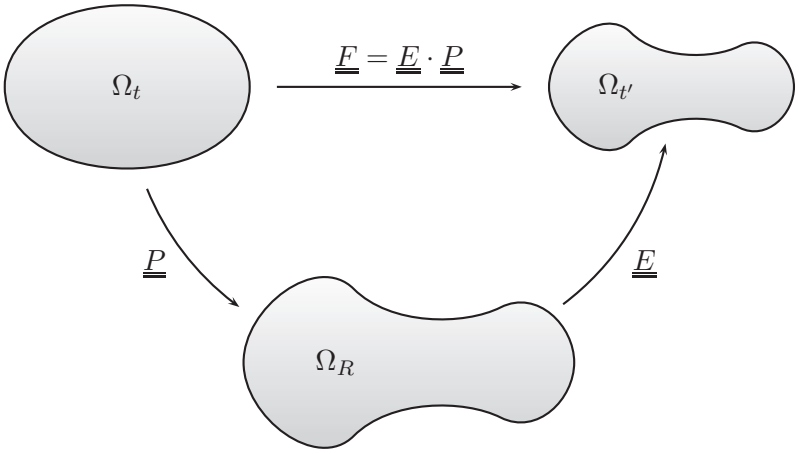


Figure 5.1 – Parties réversible et irréversible de la transformation

Le tenseur taux de déformation (noté $\underline{\underline{d}}$) qui est la partie symétrique de $\underline{\underline{L}}$, peut être approximé ainsi au second order en $\underline{\underline{\varepsilon}}^e$:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{d}} &= \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^e + \underline{\underline{\varepsilon}}^e \cdot \underline{\underline{L}}_a^P - \underline{\underline{L}}_a^P \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}^e + \underline{\underline{L}}_s^P & (5.7) \\ &\simeq \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^e + \underline{\underline{\varepsilon}}^e \cdot \underline{\underline{\Omega}} - \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}^e + \underline{\underline{d}}^P & (5.8) \end{aligned}$$

où l'on note $\underline{\underline{d}}^P$ la contribution plastique au taux de déformation.

On note :

$$\underline{\underline{\sigma}}'^e = \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}^e \tag{5.9}$$

Après dérivation par rapport au temps, on utilise l'équation (5.8) :

$$\dot{\underline{\underline{\sigma}}}'^e = \dot{\mathbb{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^e + \mathbb{C} : (\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^P - \underline{\underline{\varepsilon}}^e \cdot \underline{\underline{\Omega}} + \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}^e) \tag{5.10}$$

On exprime alors $\underline{\underline{\varepsilon}}^e$ à l'aide de l'équation (5.9) :

$$\dot{\underline{\underline{\sigma}}}'^e + \underline{\underline{\sigma}}'^e \cdot \underline{\underline{\Omega}} - \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}'^e = \dot{\mathbb{C}} : \mathbb{C}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}'^e + \mathbb{C} : (\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^P) \tag{5.11}$$

Enfin, on dérive l'équation (5.1) et on y utilise l'équation précédente. Puisque le tenseur de Biot $\underline{\underline{B}}$ est isotrope, on peut écrire $\underline{\underline{\sigma}}'^e \cdot \underline{\underline{\Omega}} - \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}'^e = \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{\Omega}} - \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}}$ donc on obtient :

$$\boxed{\dot{\underline{\underline{\sigma}}} = \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{\Omega}} + \dot{\mathbb{C}} : \mathbb{C}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}'^e + \mathbb{C} : (\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^P) - \dot{p}\underline{\underline{B}} - p\dot{\underline{\underline{B}}}} \tag{5.12}$$

Evaluation de la porosité

Calculons maintenant $\Delta\phi$. En faisant apparaître l'état relâché défini plus tôt, nous avons :

$$\frac{d\Omega_t^f - d\Omega_0^f}{d\Omega_0} = \frac{d\Omega_R^f - d\Omega_0^f}{d\Omega_0} + \frac{d\Omega_R}{d\Omega_0}\frac{d\Omega_t^f - d\Omega_R^f}{d\Omega_R} \tag{5.13}$$

c'est-à-dire $\quad {}^t\phi = {}^t\phi^P + J_{0t}^{Pt}\phi^e \tag{5.14}$

ce qui donne $\quad \dot{\phi} = \dot{\phi}^P + \dot{J}^{Pt}\phi^e + J_{0t}^P\dot{\phi}^e \tag{5.15}$

Puisque le solide est plastiquement incompressible, on peut écrire :

$$J^P_{0t'} - {}^{t'}\phi^P = 1 - {}^t\phi \qquad \text{d'où} \qquad \dot{J}^P = \dot{\phi}^P \tag{5.16}$$

Donc l'équation (5.15) devient :

$$\dot{\phi} = \dot{\phi}^P(1 + {}^t\phi^e) + J^P_{0t}\dot{\phi}^e \tag{5.17}$$

Et comme la déformation élastique est infinitésimale, ${}^t\phi^e \ll 1$, une approximation au premier ordre donne :

$$\dot{\phi} \simeq \dot{\phi}^P + J^P_{0t}\dot{\phi}^e \tag{5.18}$$

Puisque

$$\dot{J}^P\ {}^{t'}J^{P^{-1}} = tr(\underline{\underline{d}}^P) \tag{5.19}$$

nous avons :

$$\dot{\phi}^P = \dot{J}^P = J^P_{0t} tr(\underline{\underline{d}}^P) \tag{5.20}$$

Comme $J_{0t} \simeq J^P_{0t}$, l'équation (5.18) devient :

$$\frac{\dot{\phi}}{J_{0t}} \simeq tr(\underline{\underline{d}}^P) + \dot{\phi}^e \tag{5.21}$$

L'hypothèse d'une déformation élastique infinitésimale nous permet d'utiliser la loi de Biot :

$${}^t\phi^e = {}^t\underline{\underline{B}} : {}^t\underline{\underline{\varepsilon}}^e + \frac{{}^tp}{{}^tM} \tag{5.22}$$

ce qui donne par dérivation par rapport au temps :

$$\dot{\phi}^e = \dot{\underline{\underline{B}}} : {}^t\underline{\underline{\varepsilon}}^e + {}^t\underline{\underline{B}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^e + \frac{\dot{p}}{{}^tM} + {}^tp\,\overbrace{\frac{1}{M}}^{\cdot} \tag{5.23}$$

Comme le tenseur de Biot est isotrope, nous avons :

$${}^t\underline{\underline{B}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^e = {}^t\underline{\underline{B}} : (\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^P) \tag{5.24}$$

donc on obtient :

$$\dot{\phi}^e = \dot{\underline{\underline{B}}} : {}^t\underline{\underline{\varepsilon}}^e + {}^t\underline{\underline{B}} : (\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^P) + \frac{\dot{p}}{{}^tM} + {}^tp\,\overbrace{\frac{1}{M}}^{\cdot} \tag{5.25}$$

En remplacant $\dot{\phi}^e$ dans l'équation (5.21) on obtient :

$$\boxed{\frac{\dot{\phi}}{J_{0t}} = \dot{\underline{\underline{B}}} : {}^t\underline{\underline{\varepsilon}}^e + {}^t\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{d}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{d}}^P + \frac{\dot{p}}{M} + {}^tp\,\overbrace{\frac{1}{M}}^{\cdot}} \tag{5.26}$$

5.1.2 Schéma d'intégration en temps

On choisit pour l'intégration en temps un schéma explicite, c'est-à-dire que pour toute quantité a évoluant au cours du temps, on approxime sa dérivée temporelle à l'instant t (notée ${}^t\dot{a}$) ainsi :

$$ {}^t\dot{a} \simeq \frac{{}^{t'}a - {}^t a}{t' - t} \tag{5.27}$$

Autrement dit, ${}^t\dot{a}\Delta t \simeq \Delta a$.

Application au calcul de l'incrément de contrainte

En multipliant l'équation (5.12) par Δt on a :

$$\begin{aligned} \dot{\underline{\underline{\sigma}}}\Delta t &= (\underline{\underline{\Omega}}\Delta t)\cdot\underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\sigma}}\cdot(\underline{\underline{\Omega}}\Delta t) + (\dot{\mathbb{C}}\Delta t) : \mathbb{C}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}'^e + \mathbb{C} : (\underline{\underline{d}}\Delta t - \underline{\underline{d}}^P\Delta t) \\ &\quad -(\dot{p}\Delta t)\underline{\underline{B}} - p(\dot{\underline{\underline{B}}}\Delta t) \end{aligned} \tag{5.28}$$

En évaluant cette équation à l'instant t, le schéma d'intégration en temps explicite donne :

$$\begin{aligned} \Delta\underline{\underline{\sigma}} &= ({}^t\underline{\underline{\Omega}}\Delta t)\cdot{}^t\underline{\underline{\sigma}} - {}^t\underline{\underline{\sigma}}\cdot({}^t\underline{\underline{\Omega}}\Delta t) + ({}^t\dot{\mathbb{C}}\Delta t) : {}^t\mathbb{C}^{-1} : {}^t\underline{\underline{\sigma}}'^e + {}^t\mathbb{C} : ({}^t\underline{\underline{d}}\Delta t - {}^t\underline{\underline{d}}^P\Delta t) \\ &\quad -({}^t\dot{p}\Delta t){}^t\underline{\underline{B}} - {}^t p({}^t\dot{\underline{\underline{B}}}\Delta t) \qquad (5.29) \\ &= {}^t\mathbb{A}^\omega_\sigma : \{{}^t\nabla(\underline{\mathcal{U}})\}_a + \Delta\mathbb{C} : {}^t\mathbb{C}^{-1} : {}^t\underline{\underline{\sigma}}'^e + {}^t\mathbb{C} : (\underline{\underline{\mathcal{E}}} - \underline{\underline{\mathcal{E}}}^P) - \mathcal{P}\,{}^t\underline{\underline{B}} - {}^t p\Delta\underline{\underline{B}} \qquad (5.30) \end{aligned}$$

où l'on introduit la notation $\mathbb{A}^\omega_\sigma$ définie par :

$$\left[{}^t\mathbb{A}^\omega_\sigma\right]_{ijkl} = {}^t\underline{\underline{\sigma}}_{lj}\delta_{ik} - {}^t\underline{\underline{\sigma}}_{ki}\delta_{jl} \tag{5.31}$$

Comme ${}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} = {}^t\underline{\underline{\sigma}} + \Delta\underline{\underline{\sigma}}$, on a alors :

$${}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} = {}^t\underline{\underline{\sigma}} + {}^t\mathbb{A}^\omega_\sigma : \{{}^t\nabla(\underline{\mathcal{U}})\}_a + \Delta\mathbb{C} : {}^t\mathbb{C}^{-1} : {}^t\underline{\underline{\sigma}}'^e + {}^t\mathbb{C} : (\underline{\underline{\mathcal{E}}} - \underline{\underline{\mathcal{E}}}^P) - \mathcal{P}\,{}^t\underline{\underline{B}} - {}^t p\Delta\underline{\underline{B}} \tag{5.32}$$

Application au calcul de l'incrément de porosité Lagrangienne

En évaluant l'équation (5.26) à l'instant t et en la multipliant par Δt, le schéma d'intégration en temps explicite donne :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\phi}{J_{0t}} &= \dot{\underline{\underline{B}}}\Delta t : {}^t\underline{\underline{\varepsilon}}^e + {}^t\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{d}}\Delta t + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{d}}^P\Delta t + \frac{\dot{p}\Delta t}{M} + {}^t p\dot{\overbrace{M^{-1}}}\Delta t \qquad (5.33) \\ &= \Delta\underline{\underline{B}} : {}^t\underline{\underline{\varepsilon}}^e + {}^t\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathcal{P}}{{}^tM} + {}^t p\Delta(M^{-1}) \qquad (5.34) \end{aligned}$$

Application aux paramètres liés à la microstructure

On fait l'hypothèse que les paramètres liés à la microstructure $\mathbb{C}$, $\underline{\underline{B}}$, M^{-1} et $\underline{\underline{\mathcal{K}}}$ ne dépendent que de la porosité φ. En appliquant le même schéma, on a ainsi :

$$\begin{aligned} \Delta\mathbb{C} &= {}^t\dot{\mathbb{C}}\Delta t \qquad (5.35) \\ &= \left.\frac{\partial\mathbb{C}}{\partial\varphi}\right|_t {}^t\dot{\varphi}\Delta t \qquad (5.36) \\ &= \left.\frac{\partial\mathbb{C}}{\partial\varphi}\right|_t \Delta\varphi \qquad (5.37) \end{aligned}$$

De même :

$$\Delta \underline{\underline{B}} = \frac{\partial \underline{\underline{B}}}{\partial \varphi}\Big|_t \Delta\varphi \tag{5.38}$$

$$\Delta M^{-1} = \frac{\partial M^{-1}}{\partial \varphi}\Big|_t \Delta\varphi \tag{5.39}$$

$$\Delta \underline{\underline{\mathcal{K}}} = \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi}\Big|_t \Delta\varphi \tag{5.40}$$

Application au calcul de l'incrément de porosité Eulérienne

On part de la définition de la porosité Eulérienne :

$${}^{t'}\varphi = \frac{{}^{t'}\phi}{J_{0t'}} = \frac{\Delta\phi + {}^{t}\phi}{J_{0t}}\frac{J_{0t}}{J_{0t'}} \tag{5.41}$$

On évalue $J_{0t'}$ en utilisant le schéma d'intégration en temps explicite :

$$\dot{J} = \frac{\dot{\Omega}}{\Omega_0} = \frac{\Omega}{\Omega_0}\frac{\dot{\Omega}}{\Omega} = J_{0t} tr(\underline{\underline{d}}) \tag{5.42}$$

$$\Delta J = \dot{J}\Delta t = J_{0t} tr(\underline{\underline{d}})\Delta t = J_{0t} tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}) \tag{5.43}$$

$$J_{0t'} = (1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))J_{0t} \tag{5.44}$$

L'équation (5.41) devient ainsi :

$${}^{t'}\varphi = \Big(\frac{\Delta\phi}{J_{0t'}} + {}^{t}\varphi\Big)(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))^{-1} \tag{5.45}$$

On exprime alors $\Delta\phi$ grâce à l'équation (5.34) et on obtient après calcul :

$$\Delta\varphi = \Big({}^{t}\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathcal{P}}{{}^{t}M} + {}^{t}\varphi\Big)\frac{1}{\alpha - {}^{t}\beta} + \frac{{}^{t}\varphi}{1 - {}^{t}\beta\alpha^{-1}} \tag{5.46}$$

où l'on introduit la notation β définie par :

$${}^{t}\beta = \frac{\partial \underline{\underline{B}}}{\partial \varphi}\Big|_t : {}^{t}\underline{\underline{\varepsilon}}^e + {}^{t}p\frac{\partial M^{-1}}{\partial \varphi}\Big|_t \tag{5.47}$$

On reprend maintenant les équations (5.32) et (5.34) pour y utiliser cette expression :

$$\begin{aligned} {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} &= {}^{t}\underline{\underline{\sigma}} + {}^{t}\mathbb{A}^{\omega}_{\sigma} : \{{}^{t}\nabla(\underline{\mathcal{U}})\}_a + {}^{t}\mathbb{C} : (\underline{\underline{\mathcal{E}}} - \underline{\underline{\mathcal{E}}}^P) - \mathcal{P}\,{}^{t}\underline{\underline{B}} \\ &\quad + {}^{t}\underline{\underline{\gamma}}\Big(\Big({}^{t}\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathcal{P}}{{}^{t}M} + {}^{t}\varphi\Big)\frac{1}{\alpha - {}^{t}\beta} + \frac{{}^{t}\varphi}{1 - {}^{t}\beta\alpha^{-1}}\Big) \end{aligned} \tag{5.48}$$

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\phi}{J_{0t}} &= {}^{t}\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathcal{P}}{{}^{t}M} \\ &\quad + {}^{t}\beta\Big(\Big({}^{t}\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathcal{P}}{{}^{t}M} + {}^{t}\varphi\Big)\frac{1}{\alpha - {}^{t}\beta} + \frac{{}^{t}\varphi}{1 - {}^{t}\beta\alpha^{-1}}\Big) \end{aligned} \tag{5.49}$$

où l'on introduit la notation $\underline{\underline{\gamma}}$ définie par :

$${}^{t}\underline{\underline{\gamma}} = \frac{\partial \mathbb{C}}{\partial \varphi}\Big|_t : {}^{t}\mathbb{C}^{-1} : {}^{t}\underline{\underline{\sigma}}'^{e} - {}^{t}p\frac{\partial \underline{\underline{B}}}{\partial \varphi}\Big|_t \tag{5.50}$$

5.1.3 Système à résoudre

En utilisant les équations (5.32) et (5.34), l'équation (4.52) devient :

$$\begin{aligned}
&\int_{\Omega_t} \Big({}^t\underline{\underline{\sigma}} + {}^t\mathbb{A}^{\omega}_{\sigma} : \{{}^t\nabla(\underline{\mathcal{U}})\}_a + {}^t\underline{\gamma}\Delta\varphi + {}^t\mathbb{C} : (\underline{\underline{\mathcal{E}}} - \underline{\underline{\mathcal{E}}}^P) - \mathcal{P}\,{}^t\underline{\underline{B}} \Big) : ({}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}})\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Big({}^t\rho + \rho^f \Big({}^t\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathcal{P}}{{}^tM} + {}^t\beta\Delta\varphi \Big) \Big) \underline{g} \cdot \hat{\underline{\mathcal{U}}}\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Gamma^T_t} {}^{t'}p\hat{\underline{\mathcal{U}}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}}^T \cdot \underline{dS}_t \quad = \quad 0 \qquad (5.51)
\end{aligned}$$

$$\text{que l'on notera} \qquad \mathcal{G}_M = 0 \qquad (5.52)$$

En utilisant les équations (5.32) et (5.34), l'équation (4.53) devient :

$$\begin{aligned}
&- \int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}} \Big({}^t\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathcal{P}}{{}^tM} + {}^t\beta\Delta\varphi \Big)\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}} \cdot {}^t\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot (-{}^t\underline{\nabla}\, {}^{t'}p + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_t + \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^t\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot ({}^t\underline{\nabla}\, {}^{t'}p \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}))\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial\varphi}\Big|_t \Delta\varphi \cdot (-{}^t\underline{\nabla}\, {}^{t'}p + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_t + \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial\varphi}\Big|_t \Delta\varphi \cdot ({}^t\underline{\nabla}\, {}^{t'}p \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}))\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Gamma^w_t} \Delta t \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f}\, {}^{t'}w^{dt}\underline{n} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}} \cdot {}^t\underline{n}\, dS_t \quad = \quad 0 \qquad (5.53)
\end{aligned}$$

$$\text{que l'on notera} \qquad \mathcal{G}_F = 0 \qquad (5.54)$$

Afin de garder une écriture compacte, nous ne développons pas ici l'expression de $\Delta\varphi$, mais on garde à l'esprit que l'équation (5.46) l'exprime comme une combinaison linéaire de $\underline{\underline{\mathcal{E}}}$, $\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P$ et $\mathcal{P}$. Le système d'équations (5.51) et (5.53) constitue donc un système linéarisé en fonction de $\underline{\underline{\mathcal{E}}}$, $\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P$ et $\mathcal{P}$.

5.2 Méthode de résolution

5.2.1 Algorithme de Newton-Raphson

Fonctionnement

On doit résoudre le système non linéaire $\mathcal{G}(X) = 0$. Pour cela, on veut construire une suite $(X^i)_{i\in\mathbb{N}}$ convergant vers la racine de $\mathcal{G}$. L'idée de l'algorithme de Newton-Raphson est d'approximer la fonction $\mathcal{G}$ à sa tangente au point X^i et de prendre la racine de cette tangente comme solution X^{i+1} (voir fig.(5.2)).

Notant $\mathcal{J}$ la matrice jacobienne associée à $\mathcal{G}$, un développement en séries de Taylor donne :

$$\mathcal{G}(X^{i+1}) = \mathcal{G}(X^i) + \mathcal{J}(X^i)\delta X + \mathcal{O}(\delta X^{i2}) \qquad \text{avec} \qquad \mathcal{J}(X) = \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial X}(X) \qquad (5.55)$$

On choisit X^{i+1} tel que δX satisfasse :

$$\mathcal{J}(X^i)\delta X = -\mathcal{G}(X^i) \qquad (5.56)$$

Remarquons que la solution X^{i+1} est bien la racine de la tangente de $\mathcal{G}$ calculée au point X^i.

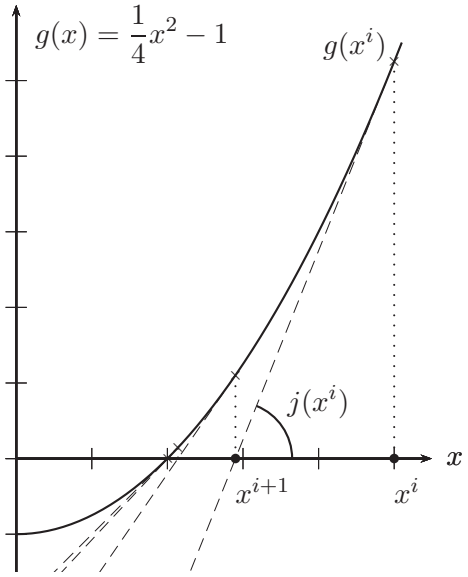


Figure 5.2 – Interpretation géométrique pour une fonction scalaire g à une variable scalaire.

Convergence

Si $\mathcal{J}$ est non nulle à la racine et que $\mathcal{G}$ est convexe, l'algorithme de Newton-Raphson permet une convergence quadratique. Dans notre cas, nous ne vérifions pas nécessairement ces hypothèses et il est possible que la méthode permette une convergence moins rapide, voire diverge ou cycle.

Sensibilité

Une évaluation exacte de $\mathcal{G}$ est nécessaire et suffisante pour avoir un schéma consistant. Une évaluation exacte de $\mathcal{J}$ est uniquement nécessaire pour obtenir la meilleure vitesse de convergence. On peut converger vers le résultat avec par exemple un $\mathcal{J}$ choisi constant. C'est ce que nous avons implémenté actuellement pour simplifier le contrôle du calcul numérique. Ainsi, seule la validité de $\mathcal{G}$ est éprouvée dans la partie (6.2).

Notations

Pour distinguer incréments et écarts entre itérations, on note Δ les variations entre instants (sur lesquelles on travaillait jusqu'à présent) et δ les variations entre deux iterations (les étapes de calcul récemment introduites) : $\Delta a = {}^{t'}a - {}^{t}a$ tandis que $\delta a = a^{i+1} - a^i$.

On note aussi $\Delta^i a = a^i - {}^{t}a$.

5.2.2 Algorithme d'intégration locale de la plasticité

On cherche une contrainte plastiquement admissible pour l'état associé à l'itération $i+1$. Pour cela, on résoud le problème posé dans la section 2.2.2 à configuration fixe. On résoud donc l'équation d'écoulement plastique (équation (2.8)) :

$$\underline{\underline{d}}^P = \dot{\lambda}\frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}$$

avec les conditions de Kuhn-Tucker suivantes :

$$\dot{\lambda} \geq 0 \qquad f(\underline{\underline{\sigma}}) \leq 0 \qquad \dot{\lambda} f(\underline{\underline{\sigma}}) = 0 \tag{5.57}$$

Ainsi, soit $\dot{\lambda} = 0$ et $f(\underline{\underline{\sigma}}) < 0$ au quel cas il n'y a pas de déformation plastique le matériau évolue dans le domaine élastique, soit $\dot{\lambda} > 0$ et $f(\underline{\underline{\sigma}}) = 0$ au quel cas la matériau sort du domaine élastique et il y a un écoulement plastique.

Pour résoudre ce système, on choisit d'utiliser la méthode des contraintes initiales avec prédicteur élastique (voir par exemple [Sudret 1999]). On commence par proposer une contrainte candidate (notée $\underline{\underline{\sigma}}^{*i+1}$) qui ne suppose aucune déformation plastique entre les configurations de l'instant t et de l'itération $i+1$. Si $\underline{\underline{\sigma}}^{*i+1}$ est plastiquement admissible, l'hypothèse $\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{Pi+1} = \underline{\underline{0}}$ est correcte. Sinon on évalue la déformation plastique qui engendre une contrainte plastiquement admissible en *projetant* $\underline{\underline{\sigma}}^{*i+1}$ sur le critère de plasticité :

$$\underline{\underline{\sigma}}^{*i+1} = \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\mathcal{U}}^i, \mathcal{P}^i, \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{Pi+1} = \underline{\underline{0}}) \tag{5.58}$$

Si $f(\underline{\underline{\sigma}}^{*i+1}) \leq 0$, $\quad \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{Pi+1} = 0 \quad$ et $\quad \underline{\underline{\sigma}}^{i+1} = \underline{\underline{\sigma}}^{*i+1}$

Si $f(\underline{\underline{\sigma}}^{*i+1}) > 0$, $\quad \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{Pi+1} \quad$ tel que $\quad f(\underline{\underline{\sigma}}^{i+1}) = 0 \quad$ où $\quad \underline{\underline{\sigma}}^{i+1} = \underline{\underline{\sigma}}^{*i+1} - \mathbb{C} : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{Pi+1}$ (5.59)

En cohérence avec cet algorithme (voir l'équation (5.58)), la contrainte candidate est évaluée en fonction de $\underline{\mathcal{U}}^i$ et $\mathcal{P}^i$, en supposant la déformation plastique nulle : $\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{Pi+1} = \underline{\underline{0}}$. L'équation (5.48) donne donc :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}}^{*i+1} \;=\; & {}^t\underline{\underline{\sigma}} + {}^t\mathbb{A}^{\omega}_{\sigma} : \{{}^t\nabla(\underline{\mathcal{U}}^i)\}_a + {}^t\mathbb{C} : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^i - \mathcal{P}^i\, {}^t\underline{\underline{B}} \\ & + {}^t\underline{\gamma}\Big(\Big({}^t\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^i + \frac{\mathcal{P}^i}{{}^tM} + {}^t\varphi\Big)\frac{1}{\alpha^i - {}^t\beta} + \frac{{}^t\varphi}{1 - {}^t\beta(\alpha^i)^{-1}}\Big) \end{aligned} \tag{5.60}$$

Dans l'équation (5.59), $\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{Pi+1}$ dépend de $\underline{\underline{\sigma}}^{i+1}$ donc il s'agit d'une équation non linéaire. Un algorithme de Newton-Raphson est alors utilisé pour projeter itérativement la contrainte sur le critère jusqu'à ce que $\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{Pi+1}$ et $\underline{\underline{\sigma}}^{i+1}$ convergent vers leur valeur définitive.

Cet algorithme là est distinct de celui utilisé pour satisfaire l'équilibre du système hydromécanique. La section 5.2.3 présente comment ces deux processus numériques interagissent.

5.2.3 Algorithme général

Au début de l'itération $i+1$, on dispose d'une estimation des champs de déplacement et de pression ($\underline{u}^i$ et p^i). Dans cette configuration fixée, on évalue localement la réponse élasto-plastique selon la méthode expliquée dans la section 5.2.2, ce qui conduit à une nouvelle évaluation de la

déformation plastique. Celle-ci est alors utilisée pour reconstruire la formulation du problème hydromécanique ($\mathcal{G}(X^i)$ et $\mathcal{J}(X^i)$) et permettre ainsi de calculer de nouveaux champs de déplacement et de pression ($\underline{u}^{i+1}$ et p^{i+1}) (voir figure 5.3). Le processus boucle ainsi jusqu'à ce qu'un critère de convergence (évalué à chaque itération) soit satisfait.

De la même manière qu'on a étoilé la contrainte candidate, on étoile toutes les quantités qui sont évaluées sans prendre en compte la déformation plastique calculée à l'itération i.

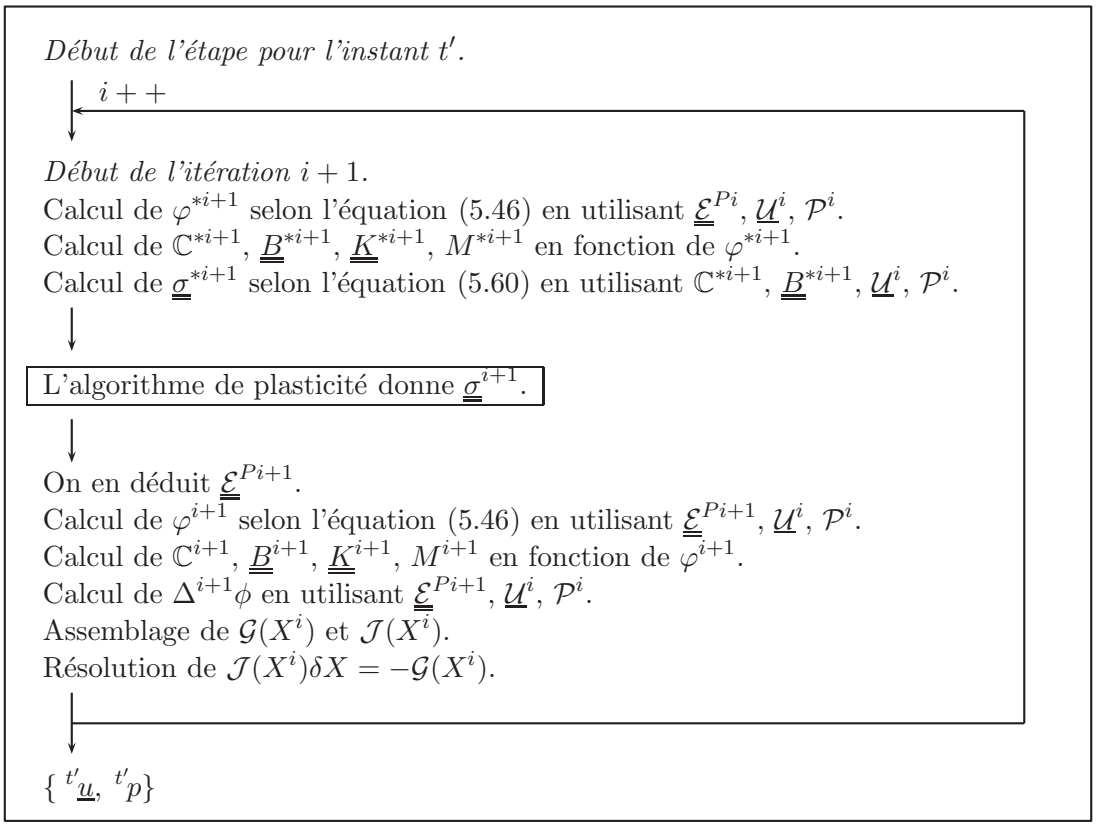


Figure 5.3 – Algorithme général pour traiter l'instant t'

Dans la suite nous détaillerons l'écriture des termes du second membre $\mathcal{G}(X^i)$, le calcul des contributions des termes non linéaires dans la matrice tangente et l'écriture de la matrice tangente $\mathcal{J}(X^i)$.

5.3 Evaluation du second membre

Pour l'évaluation de $\mathcal{G}(X^i)$, on considère connues les quantités suivantes : $\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{Pi+1}$, $\underline{\mathcal{U}}^i$, $\mathcal{P}^i$, $\mathbb{C}^{i+1}$, $\underline{\underline{B}}^{i+1}$, $\underline{\underline{K}}^{i+1}$, M^{i+1} (voir section 5.2.3). On explicite ainsi l'écriture de $\mathcal{G}(X^i)$ à partir des

équations (5.51) et (5.53) :

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_M^i &= \int_{\Omega_t} \Big({}^t\underline{\underline{\sigma}} + {}^t\mathbb{A}_\sigma^\omega : \{{}^t\nabla(\underline{\mathcal{U}}^i)\}_a + {}^t\underline{\underline{\gamma}}\Delta^{i+1}\varphi + {}^t\mathbb{C} : (\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i - \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{Pi+1}) - \mathcal{P}^i {}^t\underline{\underline{B}} \Big) : ({}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}}^i)\, d\Omega_t \\
&\quad - \int_{\Omega_t} \Big({}^t\rho + \rho^f \Big({}^t\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^i + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{Pi+1} + \frac{\mathcal{P}^i}{{}^tM} + {}^t\beta\Delta^{i+1}\varphi \Big) \Big) \underline{g} \cdot \hat{\underline{\mathcal{U}}}\, d\Omega_t \\
&\quad + \int_{\Gamma_t^T} {}^{t'}p\hat{\underline{\mathcal{U}}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}}^{iT} \cdot \underline{dS}_t \qquad (5.61) \\
\mathcal{G}_F^i &= - \int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}} \Big({}^t\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^i + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{Pi+1} + \frac{\mathcal{P}^i}{{}^tM} + {}^t\beta\Delta^{i+1}\varphi \Big)\, d\Omega_t \\
&\quad + \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}}^i \cdot {}^t\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot (-{}^t\underline{\nabla}p^i + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_t + \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^t\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot ({}^t\underline{\nabla}p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}))\, d\Omega_t \\
&\quad + \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial\varphi}\Big|_t \Delta^{i+1}\varphi \cdot (-{}^t\underline{\nabla}p^i + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_t \\
&\quad + \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial\varphi}\Big|_t \Delta^{i+1}\varphi \cdot ({}^t\underline{\nabla}p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}))\, d\Omega_t - \int_{\Gamma_t^w} \Delta t \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f}\, {}^{t'}w^{dt}\underline{n} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}}^i \cdot {}^t\underline{n}\, dS_t \qquad (5.62)
\end{aligned}$$

où l'on évalue $\Delta^{i+1}\varphi$ à partir de l'équation (5.46) :

$$\Delta^{i+1}\varphi = \Big({}^t\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^i + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{Pi+1} + \frac{\mathcal{P}^i}{{}^tM} + {}^t\varphi \Big) \frac{1}{\alpha^i - {}^t\beta} + \frac{{}^t\varphi}{1 - {}^t\beta(\alpha^i)^{-1}} \qquad (5.63)$$

5.4 Evaluation de la matrice tangente

Cette section a pour but d'expliciter l'écriture du système $\mathcal{J}(X^i)\delta X = -\mathcal{G}(X^i)$. Nous travaillons ici à l'itération i et *matrice tangente* refère à $\mathcal{J}(X^i)$ et *second membre* à $\mathcal{G}(X^i)$.

5.4.1 Ecriture de la matrice tangente

Calcul des jacobiennes $\mathcal{J}$

On définit la notation suivante pour les quantités tangentes :

$$\mathrm{d}\cdot = \frac{\partial \cdot}{\partial X}\delta X \qquad (5.64)$$

On a donc en particulier $\mathrm{d}X = \delta X$.

On rappelle que dans cette étude, les paramètres liés à la microstructure ($\mathbb{C}$, $\underline{\underline{B}}$, M, $\underline{\underline{K}}$) sont supposés dépendre uniquement de la porosité. On écrit alors :

$$\mathrm{d}\mathbb{C} = \frac{\partial \mathbb{C}}{\partial\varphi}\Big|_t \mathrm{d}\varphi \qquad (5.65)$$

$$\mathrm{d}\underline{\underline{B}} = \frac{\partial \underline{\underline{B}}}{\partial\varphi}\Big|_t \mathrm{d}\varphi \qquad (5.66)$$

On exprime $\mathcal{J}_F$ la jacobienne de $\mathcal{G}_F$ défini en équation (4.53) suivant l'équation (5.55) approximée au second ordre :

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_F(X^i)\delta X = \; & -\int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}}\frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}}\, d\Omega_t \\
& + \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}}^i \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi}\mathrm{d}\varphi \cdot (-{}^t\underline{\nabla}p^i + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_t \\
& - \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}}^i \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i+1} \cdot {}^t\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P}\, d\Omega_t \\
& + \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{T}}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i+1} \cdot (-{}^t\underline{\nabla}p^i + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_t \\
& + \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi}\mathrm{d}\varphi \cdot ({}^t\underline{\nabla}p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i))\, d\Omega_t \\
& + \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i+1} \cdot ({}^t\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i))\, d\Omega_t \\
& + \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i+1} \cdot ({}^t\underline{\nabla}p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}))\, d\Omega_t \\
& - \int_{\Gamma_t^w} \Delta t \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f}\, {}^{t'}w^d\, {}^t\underline{n} \cdot \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{T}}} \cdot {}^t\underline{n}\, dS_t
\end{aligned} \tag{5.67}$$

où l'on utilise :

$$\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{T}}} = \; tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}})\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}) \tag{5.68}$$

On exprime $\mathcal{J}_M$ la jacobienne de $\mathcal{G}_M$ défini en équation (4.52) suivant l'équation (5.55) approximée au second ordre :

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_M(X^i)\delta X = \; & \int_{\Omega_t} \mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} : {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}}^i\, d\Omega_t \\
& + \int_{\Omega_t} \underline{\underline{\sigma}}^i : {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) \cdot \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{T}}}^i\, d\Omega_t \\
& - \int_{\Omega_t} \rho^f \frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} \underline{g} \cdot \hat{\underline{\mathcal{U}}}\, d\Omega_t \\
& + \int_{\Gamma_t^T} \mathrm{d}\mathcal{P}\hat{\underline{\mathcal{U}}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}}^{iT} \cdot \underline{dS_t} \\
& + \int_{\Gamma_t^T} p^i \hat{\underline{\mathcal{U}}} \cdot \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{T}}}^{iT} \cdot \underline{dS_t}
\end{aligned} \tag{5.69}$$

Pour expliciter l'écriture de $\mathcal{J}$ à partir de ces expressions, il faut exprimer les quantités tangentes ($\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}}$, $\dfrac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}}$ et $\mathrm{d}\varphi$) comme combinaisons linéaires de δX. Comme on sait évaluer les gradients sur la configuration à l'instant t (et donc évaluer $\underline{\underline{\mathcal{E}}}$ et $\underline{\underline{\omega}}$), nous nous permettrons d'exprimer les quantités tangentes comme combinaisons linéaires de $\delta\underline{\mathcal{U}}$, $\delta\underline{\underline{\mathcal{E}}}$, $\delta\underline{\underline{\omega}}$ ou $\delta\mathcal{P}$.

Nous commencons par les écrire comme combinaison linéaire de $\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}$, $\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P$, $\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}$ et $\mathrm{d}\mathcal{P}$, puis nous exprimons $\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P$ comme combinaison linéaire de $\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}$, $\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}$ et $\mathrm{d}\mathcal{P}$.

Calcul de dφ

Comme $\varphi = \dfrac{\phi}{J}$, nous avons :

$$\mathrm{d}\varphi \quad = \quad \frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} - \frac{{}^t\phi}{J_{0t}^2}\mathrm{d}J \quad = \quad \frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} - {}^t\varphi\frac{\mathrm{d}J}{J_{0t}} \tag{5.70}$$

On évalue dJ à partir de la dérivée temporelle de J donnée par l'équation (5.42) :

$$\mathrm{d}J = J_{0t}\ tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}) \tag{5.71}$$

Alors on a :

$$\mathrm{d}\varphi = \frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} - {}^t\varphi\ tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}) \tag{5.72}$$

Calcul de $\dfrac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}}$

Partant de l'équation (5.26), on obtient :

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} = \mathrm{d}\underline{\underline{B}} : {}^t\underline{\underline{\varepsilon}}^e + {}^t\underline{\underline{B}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{{}^tM} + {}^tp\mathrm{d}(M^{-1}) \tag{5.73}$$

On utilise la notation β définie par l'équation (5.47) :

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} = {}^t\beta\mathrm{d}\varphi + {}^t\underline{\underline{B}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{{}^tM} \tag{5.74}$$

En reprenant l'équation (5.72), on a :

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} = {}^t\beta\Big(\frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} - {}^t\varphi\ tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}})\Big) + {}^t\underline{\underline{B}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{{}^tM} \tag{5.75}$$

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} = (1 - {}^t\beta)^{-1}\Big[({}^t\underline{\underline{B}} - {}^t\beta{}^t\varphi\underline{\underline{1}}) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{{}^tM}\Big]} \tag{5.76}$$

On utilise cette expression dans l'équation (5.72) pour obtenir dφ :

$$\boxed{\mathrm{d}\varphi = (1 - {}^t\beta)^{-1}\Big[({}^t\underline{\underline{B}} - {}^t\varphi\underline{\underline{1}}) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{{}^tM}\Big]} \tag{5.77}$$

Calcul de d$\underline{\underline{\sigma}}$

Puisque $\delta X \simeq \dfrac{\partial X}{\partial t}\Delta t$, on peut écrire :

$$\underline{\underline{\Omega}}\Delta t = \Delta_t^{t'}\Big\{\frac{\partial \underline{v}}{\partial \underline{x}}\Big\}_a \Delta t = \Delta_t^{t'}\Big\{\frac{\partial}{\partial \underline{x}}\Big(\frac{\partial \underline{u}}{\partial t}\Delta t\Big)\Big\}_a \simeq \Big\{\frac{\partial \delta \underline{u}}{\partial \underline{x}}\Big\}_a \tag{5.78}$$

On peut aussi écrire pour $\dot{\underline{\underline{\sigma}}}$ (et similairement pour $\dot{\mathbb{C}}$, $\underline{\underline{d}} = \dot{\underline{\underline{\mathcal{E}}}}$, $\underline{\underline{d}}^P = \dot{\underline{\underline{\mathcal{E}}}}^P$, $\dot{p}$ et $\dot{\underline{\underline{B}}}$) :

$$\dot{\underline{\underline{\sigma}}}\Delta t = \frac{\partial \underline{\underline{\sigma}}}{\partial t}\Delta t = \frac{\partial \underline{\underline{\sigma}}}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial t}\Delta t \simeq \frac{\partial \underline{\underline{\sigma}}}{\partial X}\delta X = \mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} \tag{5.79}$$

Alors l'équation (5.28) devient, évaluée à l'instant t :

$$\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} = \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} \cdot {}^t\underline{\underline{\sigma}} - {}^t\underline{\underline{\sigma}} \cdot \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \mathrm{d}\mathbb{C} : {}^t\mathbb{C}^{-1} : {}^t\underline{\underline{\sigma}}'^e + {}^t\mathbb{C} : (\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} - \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P) - \mathrm{d}p\,{}^t\underline{\underline{B}} - {}^t p\mathrm{d}\underline{\underline{B}} \tag{5.80}$$

où l'on a introduit $\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} = \left\{\dfrac{\partial \mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}}{\partial \underline{x}}\right\}_a$.

On utilise la notation ${}^t\underline{\underline{\gamma}}$ définie en équation (5.50), ainsi :

$$\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} = \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} \cdot {}^t\underline{\underline{\sigma}} - {}^t\underline{\underline{\sigma}} \cdot \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + {}^t\underline{\underline{\gamma}}\mathrm{d}\varphi + {}^t\mathbb{C} : (\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} - \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P) - \mathrm{d}p\,{}^t\underline{\underline{B}} \tag{5.81}$$

En reprenant l'équation (5.77) donnant $\mathrm{d}\varphi$, on a :

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} &= \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} \cdot {}^t\underline{\underline{\sigma}} - {}^t\underline{\underline{\sigma}} \cdot \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + {}^t\mathbb{C} : (\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} - \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P) - \mathrm{d}p\,{}^t\underline{\underline{B}} \\ &\quad + {}^t\underline{\underline{\gamma}}(1 - {}^t\beta)^{-1}\Big[({}^t\underline{\underline{B}} - {}^t\varphi\underline{\underline{1}}) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{{}^tM}\Big]\end{aligned} \tag{5.82}$$

On note de façon synthétique :

$$\boxed{\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} = {}^t\mathbb{A}^{\mathcal{E}}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + {}^t\mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + {}^t\underline{\underline{A}}^p_{\sigma}\mathrm{d}\mathcal{P} + {}^t\mathbb{A}^{\omega}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}} \tag{5.83}$$

avec
$$\left\{\begin{array}{rcl} {}^t\mathbb{A}^{\mathcal{E}}_{\sigma} &=& (1 - {}^t\beta)^{-1}{}^t\underline{\underline{\gamma}} \otimes ({}^t\underline{\underline{B}} - {}^t\varphi\underline{\underline{1}}) + {}^t\mathbb{C} \\ {}^t\mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma} &=& (1 - {}^t\beta)^{-1}{}^t\underline{\underline{\gamma}} \otimes (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) - {}^t\mathbb{C} \\ {}^t\underline{\underline{A}}^p_{\sigma} &=& (1 - {}^t\beta)^{-1}{}^tM^{-1}{}^t\underline{\underline{\gamma}} - {}^t\underline{\underline{B}} \end{array}\right.$$

5.4.2 Contribution de la plasticité

En dérivant $\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P$ et en écrivant la relation de consistance $f = 0$, on exprime $\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P$ en fonction de $\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}$, $\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}$ et $\mathrm{d}\mathcal{P}$. Les détails sont donnés dans l'annexe C et aboutissent à l'expression (C.14) :

$$\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P = \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \mathbb{B}^{\omega}_{\mathcal{E}^P} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \underline{\underline{B}}^P_{\mathcal{E}^P}\mathrm{d}\mathcal{P}$$

où les quantités $\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P}$, $\mathbb{B}^{\omega}_{\mathcal{E}^P}$ et $\underline{\underline{B}}^P_{\mathcal{E}^P}$ sont explicitées dans l'équation (C.15) et l'ensemble des quantités nécessaires à leur évaluation est donné dans l'annexe E (voir figure E.1).

Une fois l'expression de $\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P$ réinjectée dans les équations (5.76), (5.77) et (5.83), on obtient les formes (D.3), (D.7) et (D.12) :

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} = \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\phi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\phi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A^p_{\phi}\mathrm{d}\mathcal{P} \tag{5.84}$$

$$\mathrm{d}\varphi = \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A^p_{\varphi}\mathrm{d}\mathcal{P} \tag{5.85}$$

$$\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C}^{\mathcal{E}}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \mathbb{C}^{\omega}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \underline{\underline{C}}^p_{\sigma}\mathrm{d}\mathcal{P} \tag{5.86}$$

Les notations et étapes de calcul sont détaillées dans l'annexe D.

5.4.3 Expression des Jacobiennes

Dans cette section, on reprend les calculs de $\mathcal{J}_F$ et $\mathcal{J}_M$ donnés par les équations (5.67) et (5.69) et on remplace les termes tangents $\mathrm{d}\phi$, $\mathrm{d}\varphi$ et $\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}}$ par leur expression sous forme de combinaison linéaire des variables du système (équations (5.84), (5.85) et (5.86) respectivement) :

$$
\begin{aligned}
\mathcal{J}_F(X^i) = &- \int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}}\Big(\underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\phi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\phi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A^{p}_{\phi}\mathrm{d}\mathcal{P}\Big)\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi}\Big(\underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A^{p}_{\varphi}\mathrm{d}\mathcal{P}\Big) \cdot (-{}^t\underline{\nabla}p^i + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i+1} \cdot {}^t\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P}\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}) \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i+1} \cdot (-{}^t\underline{\nabla}p^i + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi}\Big(\underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A^{p}_{\varphi}\mathrm{d}\mathcal{P}\Big) \cdot (-{}^t\underline{\nabla}p^i + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i+1} \cdot {}^t\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P}\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi}\Big(\underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A^{p}_{\varphi}\mathrm{d}\mathcal{P}\Big) \cdot ({}^t\underline{\nabla}p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i))\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i+1} \cdot ({}^t\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i))\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i+1} \cdot ({}^t\underline{\nabla}p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}))\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi}\Big(\underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A^{p}_{\varphi}\mathrm{d}\mathcal{P}\Big) \cdot (-{}^t\underline{\nabla}p^i + \rho^f \underline{g})\, tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i)\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i+1} \cdot {}^t\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P}\, tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i)\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i+1} \cdot (-{}^t\underline{\nabla}p^i + \rho^f \underline{g})\, tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}})\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Gamma^w_t} \Delta t \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f}\, {}^{t'}w^d\Big(\, tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}) - {}^t\underline{n} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}) \cdot {}^t\underline{n}\Big)\, dS_t
\end{aligned}
\tag{5.87}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathcal{J}_M(X^i) = &\int_{\Omega_t} \Big(\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \mathbb{B}^{\omega}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \underline{\underline{B}}^{p}_{\sigma}\mathrm{d}\mathcal{P}\Big) : {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) \cdot \Big(\underline{\underline{1}} + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i)\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i)\Big)\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \underline{\underline{\sigma}}^i : {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) \cdot \Big(\, tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}})\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}})\Big)\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \rho^f \Big(\underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\phi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\phi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A^{p}_{\phi}\mathrm{d}\mathcal{P}\Big)\underline{g} \cdot \hat{\underline{\mathcal{U}}}\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Gamma^T_t} \mathrm{d}\mathcal{P}\hat{\underline{\mathcal{U}}} \cdot (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}^T(\underline{\mathcal{U}}^i) + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i)\underline{\underline{1}}) \cdot \underline{dS}_t \\
&+ \int_{\Gamma^T_t} p^i\hat{\underline{\mathcal{U}}} \cdot (-{}^t\underline{\underline{\nabla}}^T(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}) + \ tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}})\underline{\underline{1}}) \cdot \underline{dS}_t
\end{aligned}
\tag{5.88}
$$

Chapitre 6

Conclusion

Sommaire

6.1 Retour sur la conception du code 94
6.1.1 Réflexions sur l'implémentation numérique 94
6.1.2 Cas d'applications limites 95
6.2 Capacités de calcul actuelles 96
6.3 Perspectives de développement 99
6.4 Conclusion générale 100

Fréquemment au cours de l'implémentation numérique de ce code, des problématiques inattendues ont reporté les bénéfices des efforts investis.

A l'heure actuelle, le code donne des résultats satisfaisants dans des configurations simples et constitue une base qui permettra de développer des simulations innovantes car elle est conçue pour traiter de grandes déformations et des contraintes latérales . Nous nous proposons ici de partager un retour sur la conception du code. A la suite de cette analyse (section 6.1), nous faisons le point sur les capacités actuelles du code (section 6.2), puis terminons par des propositions de développements futurs (section 6.3).

6.1 Retour sur la conception du code

6.1.1 Réflexions sur l'implémentation numérique

La spécificité du sujet traité a amené à développer une implémentation numérique sur mesure. Voici quelques uns des thèmes de réflexion qui ont été engendrés :

- le choix des espaces d'interpolation (détaillé dans cette section)
- la gestion du maillage ouvert (voir annexe F, section 2.4 de [Guilmin et al. 2012])
- la subdivision de la sédimentation en étapes supplémentaires (pour que le maillage ne comporte pas d'éléments trop écrasés) (voir annexe F, section 2.5 de [Guilmin et al. 2012])

D'autres points ont fait l'objet de nombreuses interrogations, comme la gestion des conditions aux limites non linéaires ou l'évaluation des intégrales aux noeuds [1] mais n'ont pas constitués de réels obstacles.

Nous détaillons ici une réflexion sur les **espaces d'interpolation**.

L'approximation nodale que l'on fait pour le champ solution (voir section 4.2.2) est aussi utilisée sur les données caractérisant le matériau (comme $\mathbb{C}$, φ et $\underline{\underline{K}}$ par exemple). On utilise ainsi différents espaces d'interpolation dépendamment du type de champ de valeurs. Dans notre première tentative, on avait défini :

- une interpolation quadratique continue pour le champ de déplacement
- une interpolation linéaire continue pour le champ de pression
- une interpolation linéaire discontinue pour les champs de données

Or la formulation mise au point dans le chapitre 5 comporte de nombreux produits de données et le produit de deux interpolations est une interpolation de degré moindre. Ces choix dégradaient donc l'estimation de la solution.

Etudions un exemple particulier. En utilisant l'équation (5.60) dans (5.61), il apparaît qu'on doit évaluer notamment l'intégrale suivante :

$$\int_{\Omega_t} \Big({}^t\underline{\underline{\sigma}} + {}^t\mathbb{A}_\sigma^\omega : \{{}^t\nabla(\underline{\mathcal{U}}^{i-1})\}_a + \Delta^{i-1}\mathbb{C} : {}^t\mathbb{C}^{-1} : {}^t\underline{\underline{\sigma}}'^e + {}^t\mathbb{C} : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{i-1} - \mathcal{P}^{i-1}\,{}^t\underline{\underline{B}} - {}^tp\Delta^{i-1}\underline{\underline{B}} \Big) : ({}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) \cdot \underline{\underline{\mathcal{T}}}^i)\; d\Omega_t \tag{6.1}$$

1. L'évaluation classique des intégrales se fait aux points de Gauss. Dans notre cas, GetFEM++ l'impose aux noeuds.

Interessons nous à deux des termes de cette intégrale :

$$\int_{\underline{x}\in\Omega_t} {}^t\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) : {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}})(\underline{x})\ d\underline{x} \tag{6.2}$$

$$\int_{\underline{x}\in\Omega_t} {}^t\mathbb{C}(\underline{x}) : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^i(\underline{x}) : {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}})(\underline{x})\ d\underline{x} \tag{6.3}$$

A l'itération $i+1$, les quantités ${}^t\underline{\underline{\sigma}}$, ${}^t\mathbb{C}$ et $\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i$ sont connues aux noeuds et sont interpolées dans la formulation comme les autres données caractérisant le matériau (interpolation linéaire discontinue). Le champ de déplacement virtuel $\hat{\mathcal{U}}$ est lui interpolé avec la même interpolation que le champ de déplacement solution (interpolation quadratique continue).

On retire maintenant les exposants t et i pour alléger l'écriture et on note ψ_d et ψ_u les fonctions de forme respectivement associées aux champs de données et au champ de déplacement. Les intégrales (6.2) et (6.3) étaient respectivement calculées sous la forme des intégrales (6.4) et (6.5) :

$$\int_{\underline{x}\in\Omega_t} \underline{\underline{\sigma}}^a\psi_d^a(\underline{x}) : \underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}^c)\psi_u^c(\underline{x})\ d\underline{x} \tag{6.4}$$

$$\int_{\underline{x}\in\Omega_t} \mathbb{C}^a\psi_d^a(\underline{x}) : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^b\psi_d^b(\underline{x}) : \underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}^c)\psi_u^c(\underline{x})\ d\underline{x} \tag{6.5}$$

c'est-à-dire, en sortant les quantités constantes pour l'intégration :

$$\underline{\underline{\sigma}}^a : [\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}})]^c \qquad \int_{\underline{x}\in\Omega_t} \psi_d^a(\underline{x})\psi_{\nabla u}^c(\underline{x})\ d\underline{x} \tag{6.6}$$

$$\mathbb{C}^a : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^b : [\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}})]^c \qquad \int_{\underline{x}\in\Omega_t} \psi_d^a(\underline{x})\psi_d^b(\underline{x})\psi_{\nabla u}^c(\underline{x})\ d\underline{x} \tag{6.7}$$

où l'on note de façon symbolique $\psi_{\nabla u}(\underline{x})$ la fonction d'interpolation équivalente pour l'évaluation du gradient d'un champ de déplacement.

Le fait qu'il y ait un produit de données dans la deuxième intégrale étudiée génère une dégradation de l'interpolation. La formulation que l'on évalue est donc appauvrie.

Pour palier à cela, on a alors défini un autre espace d'interpolation enrichi (degré 3 discontinue) pour les données susceptibles d'être multipliées entre elles. Il s'agit d'un artefact pour la multiplication et les données réellement calculées aux noeuds le sont suivant l'ancienne interpolation (degré 1 discontinue).

6.1.2 Cas d'applications limites

Le code de simulation est capable de traiter une grande variété de cas de charges, la plupart étant décorellés de toute signification physique. Il faut donc être particulièrement vigilant lorsqu'on crée un cas de charge synthétique.

Certaines configurations m'ont amenée à remettre en question la modélisation physique et le traitement numérique alors qu'il s'agissait simplement de données d'entrée absurdes ou non désirées. En voici quelques exemples :

- une sédimentation au-dessus du niveau de la mer
- un temps simulé si long que la compaction s'est poursuivie jusqu'à obtenir une porosité négative
- un paramétrage qui viole les hypothèses utilisées pour la modélisation physique (ex : porosité supérieure à 50% alors qu'on a utilisé un modèle de Biot)
- un écrouissage quasi nul et une grande déformation plastique : le cas de charge converge alors très mal pour des raisons physiques, et non numériques.

6.2 Capacités de calcul actuelles

Nous avons confronté les résultats numériques de notre code à trois solutions analytiques disponibles dans la littérature dans les cas oedométriques suivants :

- cas élastique sans force volumique,
- cas élastique avec gravité,
- cas élasto-plastique drainé avec gravité.

Ceci a permis de valider les capacités du code dans ces configurations. Ces résultats sont publiés dans [Guilmin et al. 2012] (voir annexe F, section 3.).

Dans les cas élastiques, le code est capable de retrouver numériquement les solutions analytiques à la précision numérique près (10^{-12}). Nous ne détaillons pas davantage ces cas mais illustrons le cas élasto-plastique drainé avec gravité dans une configuration oedométrique (dont la solution analytique a été présentée dans [Deudé et al. 2004]).

Les figures 6.1 et 6.2 présentent des résultats pour le cas d'une sédimentation à vitesse constante pendant 20 Ma d'un matériau élasto-plastique en condition oedométrique. On a déposé durant cette période 2000 m de sédiments (soit 100 m par Ma) qui se sont compactés au fur et à mesure des incréments de calculs. La surface de l'eau est située à 1200 m et la colonne sédimentaire affleure tout juste la surface à la fin de la période simulée. Dans ces figures, la solution analytique est représentée en noir et la solution numérique en rouge.

La figure 6.1 montre les contraintes horizontales (de 0 à -6000 kPa environ) et verticales (de 0 à -13000 kPa environ) en fonction de l'altitude (0 m : socle ; 1200 m : surface). On peut y voir un décrochement de la contrainte calculée numériquement (en rouge). Il s'agit de l'élement du maillage où s'effectue l'activation de la plasticité. Cette anomalie n'a pas encore été corrigée. Heureusement, la solution n'est altérée que localement.

La figure 6.2 montre la hauteur de la colonne sédimentaire (en m) en fonction du temps (en Ma) durant toute la période simulée. Les résultats de la simulation sous-estiment légèrement le tassement en comparaison avec les solutions analytiques (environ 2% à la fin de la période simulée).

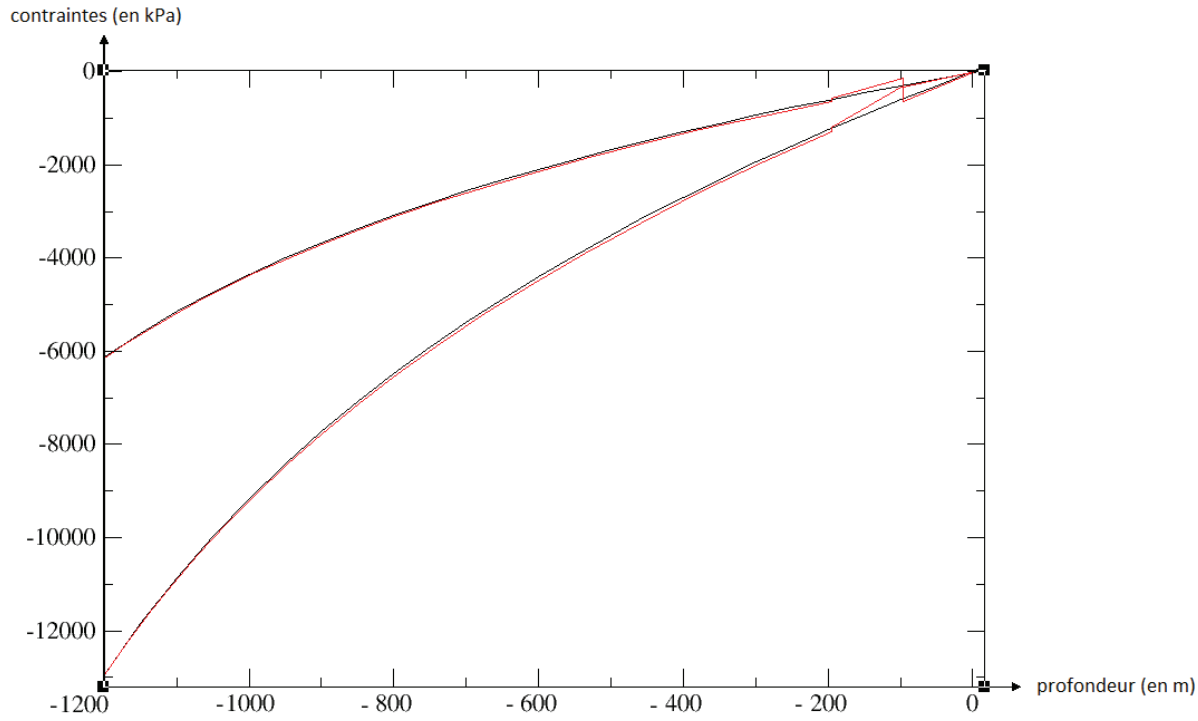


Figure 6.1 – Comparaison des contraintes latérales et verticales en fonction de la profondeur après 20 Ma

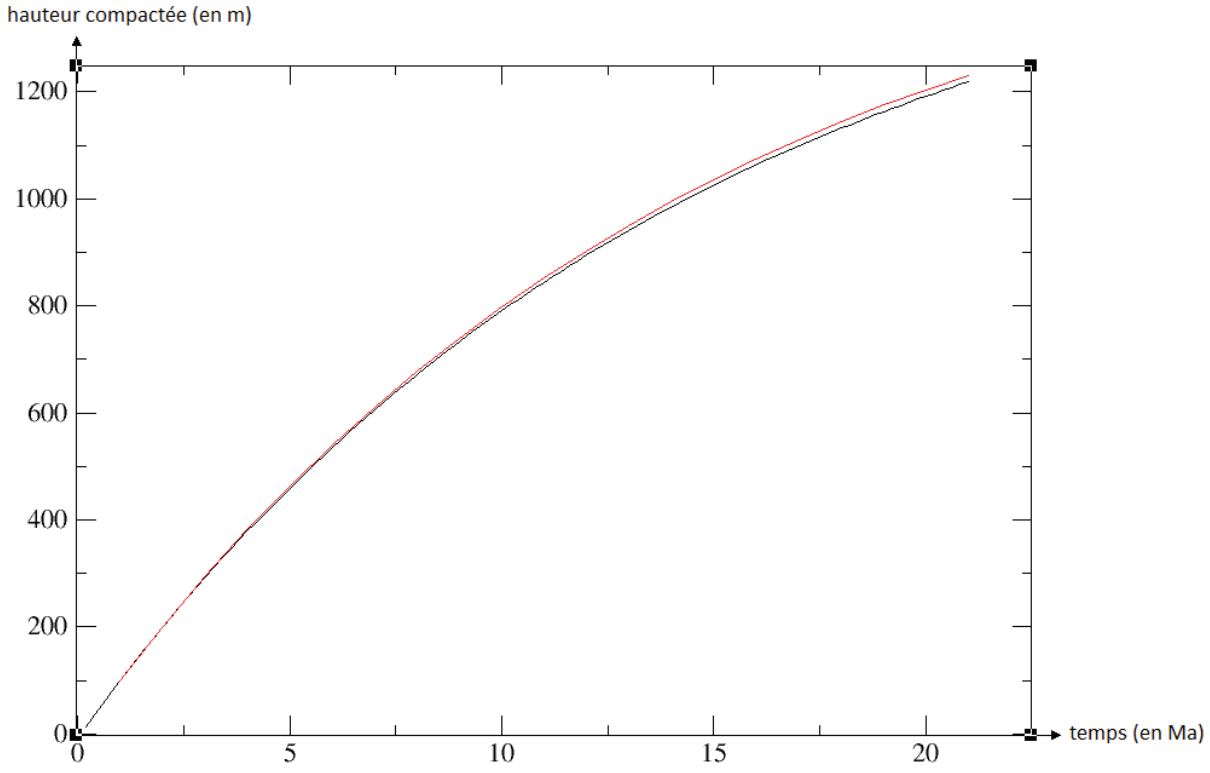


Figure 6.2 – Comparaison du tassement au cours du temps pour une sédimentation à vitesse constante

6.3 Perspectives de développement

Différentes pistes de développement ont été lancées pour améliorer ce code et faire des simulations plus réalistes :

- gérer différentes lithologies
  Cela permettrait de simuler des surpressions développées pour des assemblages de lithologies particulier (comme fig.3.15)
- appliquer des conditions aux limites tectoniques (uniformes ou continues linéaires par morceaux)
- coupler à un code d'écoulement fluide complexe
- implémenter les travaux sur la pression-dissolution de la section 3.2.

6.4 Conclusion générale

Ce projet de recherche a été initié avec le souhait d'améliorer la simulation de la compaction des bassins sédimentaires grâce à une approche mécanique. Comme la compaction de la roche au cours de son enfouissement est gouvernée successivement par une compaction mécanique puis chimique, nous avons fait le choix de concentrer les efforts de simulation sur la compaction mécanique uniquement, dans l'optique de disposer ainsi d'un état initial de qualité lors de l'activation de la simulation de la compaction chimique.

Nous avons donc traité un problème hydromécanique couplé de façon tensorielle et en grandes transformations, permettant la prise en compte d'effets tectoniques (voir chapitre 4). Une formulation numérique complète a alors été rédigée pour traiter le système d'équations correspondant en respectant les non linéarités du géomatériau (voir chapitre 5). L'implémentation de cette formulation est quasiment aboutie et a déjà été validée sur des cas oedométriques (voir chapitre 6) : nous avons vérifié que les termes du couplage hydromécanique permettent de retrouver à la précision numérique près (10^{-12}) les résultats analytiques pour un comportement élastique, et que les termes du comportement élasto-plastique permettent de retrouver à quelques pourcents près les résultats analytiques dans un cas sec.

En parallèle de ce travail, deux modèles ont été proposés pour obtenir une équation d'état macroscopique reliée au phénomène de pression-dissolution (phénomène participant à la compaction chimique) (voir chapitre 3). Le premier modèle s'appuie sur une description microscopique du matériau poreux selon laquelle les grains solides sont des sphères rigides avec une interface élasto-visqueuse. La définition des propriétés de ce modèle impose que la contrainte locale dans la phase solide soit en traction. Or nous avons montré que ce modèle ne permet pas de satisfaire cette hypothèse dans tous les cas (en particulier dans des conditions oedométriques). Des pistes de travail sont actuellement explorées pour proposer une technique d'homogénéisation permettant de traiter une description microscopique enrichie.

Le deuxième modèle s'appuie sur une description microscopique de la déformation chémomécanique due à la pression-dissolution (dite déformation libre) en fonction de la contrainte dans la phase solide et de la pression de pore. Une équation différentielle macroscopique a été obtenue et une méthode de traitement a été proposée pour estimer l'évolution du géomatériau selon ce modèle. Nous avons mené une étude simplifiée dans des conditions oedométriques et conclu que ce modèle permet de s'affranchir des limites du modèle précédent.

Ainsi, nous proposons donc deux contributions complémentaires à l'étude de bassin : un outil de simulation quasiment abouti conçu pour traiter des modélisations variées en respectant les lois fondamentales de la mécanique et des modèles de compaction chimique issus de la micromécanique qui pourront être incorporés dans cet outil.

Annexe A

Détails des développements limités

On veut regarder les solutions de l'équation (3.15) à court-terme ($t \to 0$, $\tau \to \infty$) et long-terme ($t \to \infty$, $\tau \to 0$) en dégradant l'équation suivant les valeurs de τ. Or on ne connaît pas explicitement la dépendance de X avec τ. On fait donc des hypothèses sur cette dépendance, on résoud l'équation ainsi dégradée et on vérifie que l'hypothèse est bien vérifiée.

A.1 A court-terme ($t \to 0^+$, $\bar{\tau} \to \infty$)

L'équation (3.15) équivaut à :

$$\begin{aligned} & 3(3\varphi-1)X + 6(2\varphi-1) \\ + \;& 2\Big((3\varphi+2)X + (12\varphi-5)\Big)\frac{X}{\bar{\tau}} \\ + \;& 4(X+3\varphi-1)\frac{X^2}{\bar{\tau}^2} \\ = \;& 0 \end{aligned} \tag{A.1}$$

On commence par faire l'hypothèse que $X = \mathcal{O}(1)$, ce qui signifie ici que X reste borné quand τ tend vers l'infini. L'équation (A.1) alors devient à l'ordre 0 en $1/\tau$:

$$3(3\varphi-1)X + 6(2\varphi-1) = \mathcal{O}\Big(\frac{1}{\tau}\Big) \tag{A.2}$$

qui a pour solution :

$$X = X_0 + \mathcal{O}\Big(\frac{1}{\tau}\Big) \qquad \text{où l'on note} \quad X_0 = \frac{2(1-2\varphi)}{(3\varphi-1)} \tag{A.3}$$

L'équation (A.1) devient à l'ordre 1 en $1/\tau$:

$$3(3\varphi-1)X + 6(2\varphi-1) + \Big((3\varphi+2)X + (12\varphi-5)\Big)2X\frac{1}{\bar{\tau}} = \mathcal{O}\Big(\frac{1}{\tau^2}\Big) \tag{A.4}$$

qui a pour solution :

$$X = X_0 + \frac{X_1}{\bar{\tau}} + \mathcal{O}\Big(\frac{1}{\tau^2}\Big) \qquad \text{où l'on note} \quad X_1 = -\frac{4(1-2\varphi)(24\varphi^2-29\varphi+9)}{3(3\varphi-1)^3} \tag{A.5}$$

On remarque que X_0 est positif pour $1/3 < \varphi < 1/2$ et qu'il a une branche infinie quand φ tend vers $1/3$ par valeurs supérieures. Notre hypothèse $X = \mathcal{O}(1)$ est donc valable seulement sur l'intervalle de porosité $]1/3; 1/2]$.

On remarque que dans cet intervalle X_1 est négatif, ce qui correspond bien au relachement physique attendu.

Pour définir une solution pour une porosité inférieure à $1/3$, on reprend les développements limités en considérant maintenant que $X = \mathcal{O}(\tau)$. On note d'ailleurs $Y = X/\bar{\tau}$. En divisant l'équation (3.15) par $\bar{\tau}^3$ on obtient :

$$\begin{aligned} & \Big(3(3\varphi-1)Y + 6(2\varphi-1)\frac{1}{\bar{\tau}}\Big) \\ + \quad & 2\Big((3\varphi+2)Y + (12\varphi-5)\frac{1}{\bar{\tau}}\Big)Y \\ + \quad & 4\Big(Y + (3\varphi-1)\frac{1}{\bar{\tau}}\Big)Y^2 \\ = \quad & 0 \end{aligned} \tag{A.6}$$

L'équation devient à l'ordre 0 en $1/\tau$:

$$3(3\varphi-1)Y + 2(3\varphi+2)Y^2 + 4Y^3 = \mathcal{O}\Big(\frac{1}{\tau}\Big) \tag{A.7}$$

qui admet 3 solutions mathématiques :

$$0 \quad , \quad -\frac{3}{2} \quad , \quad \frac{1-3\varphi}{2} \tag{A.8}$$

On cherche une solution positive donc seule la dernière est admissible, en vérifiant $\varphi \leq 1/3$.

$$Y = Y_0 + \mathcal{O}\Big(\frac{1}{\tau}\Big) \qquad \text{où l'on note} \quad Y_0 = \frac{1-3\varphi}{2} \tag{A.9}$$

Pour que $Y = Y_0 + \dfrac{Y_1}{\bar{\tau}}$ soit solution de l'équation à l'ordre 1 en $1/\tau$, il faut et suffit que Y_1 satisfasse :

$$\begin{aligned} & 3(3\varphi-1)Y_1 + 6(2\varphi-1) \\ + \quad & 2Y_0\Big((3\varphi+2)Y_1 + 12\varphi - 5\Big) + 2(3\varphi+2)Y_0Y_1 \\ + \quad & 4(Y_1 + 3\varphi - 1)Y_0^2 + 8Y_0^2Y_1 \\ = \quad & 0 \end{aligned} \tag{A.10}$$

$$\text{ce qui donne} \qquad Y_1 = \frac{3(1-\varphi)(2-3\varphi)^2}{(1-3\varphi)(4-3\varphi)} \tag{A.11}$$

A.2 A long-terme ($t \to \infty$, $\bar{\tau} \to 0$)

L'équation (3.15) équivaut à :

$$\begin{aligned} & 3\Big((3\varphi-1)X + 2(2\varphi-1)\Big)\bar{\tau}^2 \\ + & \Big((3\varphi+2)X + (12\varphi-5)\Big)2X\bar{\tau} \\ + & \Big(X + 3\varphi - 1\Big)4X^2 \\ = & \ 0 \end{aligned} \tag{A.12}$$

Comme précédemment, on commence par faire l'hypothèse que $X = \mathcal{O}(1)$, ce qui signifie ici que X reste borné quand τ tend vers 0. Quand τ tend vers 0, cette équation admet pour solution :

$$X^\infty = X_0^\infty + \bar{\tau} X_1^\infty + \mathcal{O}(\tau^2) \qquad \text{avec} \quad X_0^\infty = 1 - 3\varphi \tag{A.13}$$

$$X_1^\infty = \frac{1 + (2-3\varphi)(1-3\varphi)}{2(1-3\varphi)} \tag{A.14}$$

On a donc une solution X^∞ qui est positive pour une porosité inférieure à 1/3. Pour définir une solution pour une porosité supérieure à 1/3, on reprend les développements limités en considérant maintenant que $X = \mathcal{O}(\tau)$. On note d'ailleurs $Y = X/\bar{\tau}$. En divisant par $\bar{\tau}^2$, l'équation (3.15) devient :

$$\begin{aligned} & 3\Big((3\varphi-1)\bar{\tau}Y + 2(2\varphi-1)\Big) \\ + & \Big((3\varphi+2)\bar{\tau}Y + (12\varphi-5)\Big)2Y \\ + & \Big(\bar{\tau}Y + (3\varphi-1)\Big)4Y^2 \\ = & \ 0 \end{aligned} \tag{A.15}$$

Quand τ tend vers 0, cette équation admet pour solution :

$$Y^\infty = Y_0^\infty + \bar{\tau} Y_1^\infty + \mathcal{O}(\tau^2) \qquad \text{avec} \quad Y_0^\infty = \frac{3(1-2\varphi)}{2(3\varphi-1)}$$

$$Y_1^\infty = -\frac{9(1-2\varphi)(2-3\varphi)^2\varphi}{4(3\varphi-1)^3}$$

Annexe B

Retour dans l'espace temporel

B.1 Calculs pour une contrainte générale

Comme annoncé dans la section 3.1.4, nous reprenons ici les résultats de l'annexe (A) pour écrire le comportement dans le domaine de Carson comme un polynome en τ (forme générale donnée par l'équation (B.1)) afin d'en déduire une équation différentielle dans l'espace temporel (forme générale donnée par l'équation (B.2)) :

$$\mathbb{C}^\star_{ac} = \sum_i \mathbb{C}_i \tau^i \tag{B.1}$$

$$\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \sum_i \mathbb{C}_i : \underline{\underline{E}}^{(i)}(t) \tag{B.2}$$

On rappelle que $\mathbb{C}^\star$ est isotrope donc $\mathbb{C}^\star = 2\mu^\star_{ac}\mathbb{K} + 3k^\star_{ac}\mathbb{J}$. On note $\nu = \dfrac{k_n}{k_t}$. Ainsi $\bar{\tau} = \nu\tau$.

B.1.1 A court-terme ($t \to 0$, $\bar{\tau} \to \infty$) et pour $\varphi < 1/3$

$$\mathbb{C}^\star = \mathbb{C}_1\tau + \mathbb{C}_0 + \mathcal{O}\Big(\frac{1}{\tau}\Big) \qquad \text{avec} \qquad \begin{aligned} \mathbb{C}_0 &= \frac{Rk_t}{2} Y_1 \mathbb{K} + Rk_t \frac{1-\varphi}{\varphi + Y_0} Y_1 \frac{\varphi}{\varphi + Y_0} \mathbb{J} \\ \mathbb{C}_1 &= \frac{Rk_t}{2} Y_0 \nu \mathbb{K} + Rk_t \frac{1-\varphi}{\varphi + Y_0} Y_0 \nu \mathbb{J} \end{aligned}$$

$$\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \mathbb{C}_0 : \underline{\underline{E}}(t) + \mathbb{C}_1 : \underline{\underline{\dot{E}}}(t) \tag{B.3}$$

B.1.2 A court-terme ($t \to 0$, $\bar{\tau} \to \infty$) et pour $\varphi > 1/3$

Dans ce cas, les développements limités de $\mu^\star_{ac}$ et $k^\star_{ac}$ donnent :

$$\mathbb{C}^\star = \mathbb{C}_0 + \frac{\mathbb{C}_{-1}}{\tau} + \mathcal{O}\Big(\frac{1}{\tau^2}\Big) \qquad \text{avec} \qquad \begin{aligned} \mathbb{C}_0 &= \frac{Rk_t}{2} X_0 \mathbb{K} + Rk_t \frac{1-\varphi}{\varphi} X_0 \mathbb{J} \\ \mathbb{C}_{-1} &= \frac{Rk_t}{2} \frac{X_1}{\nu} \mathbb{K} + Rk_t \frac{1-\varphi}{\nu\varphi} (X_1 - \frac{X_0^2}{\varphi}) \mathbb{J} \end{aligned}$$

En multipliant par p on obtient alors $\mathbb{C}^\star p = \mathbb{C}_{-1} + \mathbb{C}_0 p + \mathcal{O}(p^2)$ ce qui permet d'exprimer $\dot{\underline{\underline{\Sigma}}}(t)$:

$$\dot{\underline{\underline{\Sigma}}}(t) = \mathbb{C}_{-1} : \underline{\underline{E}}(t) + \mathbb{C}_0 : \dot{\underline{\underline{E}}}(t) \tag{B.4}$$

B.1.3 A long-terme ($t \to \infty$, $\bar{\tau} \to 0$) et pour $\varphi < 1/3$

$$\mathbb{C}^\star = \mathbb{C}_0 + \mathbb{C}_1\tau + \mathcal{O}(\tau^2) \qquad \text{avec} \qquad \begin{aligned} \mathbb{C}_0 &= \frac{Rk_t}{2} X_0^\infty \mathbb{K} \\ \mathbb{C}_1 &= \frac{Rk_t}{2} X_1^\infty \nu \mathbb{K} + Rk_t(1-\varphi)\nu\mathbb{J} \end{aligned}$$

$$\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \mathbb{C}_0 : \underline{\underline{E}}(t) + \mathbb{C}_1 : \dot{\underline{\underline{E}}}(t) \tag{B.5}$$

B.1.4 A long-terme ($t \to \infty$, $\bar{\tau} \to 0$) et pour $\varphi > 1/3$

$$\mathbb{C}^\star = \mathbb{C}_1\tau + \mathcal{O}(\tau^2) \qquad \text{avec} \qquad \mathbb{C}_1 = \frac{Rk_t}{2} Y_0^\infty \nu \mathbb{K} + Rk_t \frac{(1-\varphi)Y_0^\infty}{Y_0^\infty + \varphi} \nu \mathbb{J}$$

$$\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \mathbb{C}_1 : \dot{\underline{\underline{E}}}(t) \tag{B.6}$$

B.2 Calculs pour un échelon de contrainte : $\underline{\underline{\Sigma}}(t) = \underline{\underline{\Sigma}}_0 H(t)$

Méthode

On a $\underline{\underline{E}}(t) = \mathbb{S}(t) : \underline{\underline{\Sigma}}_0$ donc on cherche à évaluer $\widetilde{\mathbb{S}}$ l'originale de $(\mathbb{C}^\star)^{-1}$.
Comme $\mathbb{C}^\star$ est isotrope, $\mathbb{C}^\star = 2\mu_{ac}^\star \mathbb{K} + 3k_{ac}^\star \mathbb{J}$ donc :

$$\widetilde{\mathbb{S}}(t) = \frac{1}{2}\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{1}{\mu_{ac}^\star}\Big)\mathbb{K} + \frac{1}{3}\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{1}{k_{ac}^\star}\Big)\mathbb{J} \tag{B.7}$$

$$= \frac{1}{2}\frac{4}{Rk_t}\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{1}{X}\Big)\mathbb{K} + \frac{1}{3}\frac{3}{(1-\varphi)Rk_t}\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{X+\bar{\tau}\varphi}{\bar{\tau}X}\Big)\mathbb{J} \tag{B.8}$$

où $\mathcal{C}^{-1}$ est la transformation inverse de Carson.

On introduit alors $\tilde{\mu}$ et $\tilde{k}$ tels que :

$$\widetilde{\mathbb{S}}(t) = \frac{\mathbb{K}}{2\tilde{\mu}(t)} + \frac{\mathbb{J}}{3\tilde{k}(t)} \quad \text{avec} \quad \tilde{\mu}(t) = \frac{Rk_t}{4}\Big[\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{1}{X}\Big)\Big]^{-1} \tag{B.9}$$

$$\tilde{k}(t) = \frac{(1-f)Rk_t}{3}\Big[\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{X+\bar{\tau}\varphi}{\bar{\tau}X}\Big)\Big]^{-1} \tag{B.10}$$

On explicite $\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{1}{X}\Big)$ et $\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{X+\bar{\tau}\varphi}{\bar{\tau}X}\Big)$ dans chacun des cas limites étudiés.

A court-terme ($t \to 0$, $\bar{\tau} \to \infty$) et pour $\varphi < 1/3$

On a pour solution $X = \bar{\tau} Y_0 + Y_1/\bar{\tau} + \mathcal{O}(1/\bar{\tau})$.

$$\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{1}{X}\Big) = \frac{1}{Y_0}\Big[\frac{t}{\nu} - \frac{Y_1}{Y_0}\frac{t^2}{2\nu^2}\Big]H(t) \tag{B.11}$$

$$\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{X+\bar{\tau}\varphi}{\bar{\tau}X}\Big) = \frac{1}{Y_0}\Big[(Y_0+\varphi)\frac{t}{\nu} - \frac{Y_1\varphi}{Y_0}\frac{t^2}{2\nu^2}\Big]H(t) \tag{B.12}$$

A court-terme ($t \to 0$, $\bar{\tau} \to \infty$) et pour $\varphi > 1/3$

On a pour solution $X = X_0 + X_1/\bar{\tau} + \mathcal{O}(1/\bar{\tau}^2)$.

$$\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{1}{X}\Big) = \frac{1}{X_0}\Big[1 - \frac{X_1}{X_0}\frac{t}{\nu}\Big]H(t) \tag{B.13}$$

$$\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{X+\bar{\tau}\varphi}{\bar{\tau}X}\Big) = \frac{1}{X_0}\Big[\varphi + \Big(X_0 - \frac{X_1\varphi}{X_0}\Big)\frac{t}{\nu}\Big]H(t) \tag{B.14}$$

A long-terme ($t \to \infty$, $\bar{\tau} \to 0$) et pour $\varphi > 1/3$

On a pour solution $X = X_0^\infty + X_1^\infty \bar{\tau} + \mathcal{O}(\bar{\tau}^2)$.

$$\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{1}{X}\Big) = \frac{1}{X_0^\infty}\Big[H(t) - \frac{X_1^\infty}{X_0^\infty}\delta(t)\Big] \tag{B.15}$$

$$\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{X+\bar{\tau}\varphi}{\bar{\tau}X}\Big) = \Big[\frac{t}{\nu} + \frac{\varphi}{X_0^{\infty 2}}\frac{t^2}{2\nu^2}\Big]H(t) \tag{B.16}$$

A long-terme ($t \to \infty$, $\bar{\tau} \to 0$) et pour $\varphi < 1/3$

On a pour solution $X = Y_1^\infty + Y_0^\infty \bar{\tau} + \mathcal{O}(\bar{\tau}^2)$.

$$\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{1}{X}\Big) = \frac{1}{Y_1^\infty}\Big[\frac{t}{\nu} - \frac{Y_1^\infty}{Y_0^\infty}\Big]H(t) \tag{B.17}$$

$$\mathcal{C}^{-1}\Big(\frac{X+\bar{\tau}\varphi}{\bar{\tau}X}\Big) = \frac{1}{Y_0^\infty}\Big[Y_0^\infty + \varphi - \frac{Y_1^\infty\varphi}{Y_0^\infty}\frac{t}{\nu}\Big]H(t) \tag{B.18}$$

Annexe C

Contribution de la plasticité au comportement tangent

Après la projection sur le critère plastique, on explicite la contribution de la déformation plastique au comportement tangent, c'est-à-dire qu'on écrit $\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P$ en fonction de $\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}$, $\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}$ et $\mathrm{d}\mathcal{P}$.

La règle d'écoulement plastique (équation (2.8)) nous donne :

$$\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P = \sum_{j\in C_a} \Delta\lambda_j \frac{\partial g_j}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}({}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} + {}^{t'}p\underline{\underline{1}}, p_c) \tag{C.1}$$

On obtient par dérivation :

$$\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P = \sum_{j\in C_a} \frac{\partial g_j}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}\mathrm{d}\lambda_j + \sum_{j\in C_a} \Delta\lambda_j \frac{\partial^2 g_j}{\partial \underline{\underline{\sigma}}^2} : (\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} + \mathrm{d}\mathcal{P}\underline{\underline{1}}) + \sum_{j\in C_a} \Delta\lambda_j \frac{\partial^2 g_j}{\partial \underline{\underline{\sigma}}\partial p_c}\mathrm{d}p_c \tag{C.2}$$

Considérant que p_c ne dépend que de J^p, on a :

$$\mathrm{d}p_c \;=\; \frac{\partial p_c}{\partial J^p}\, {}^t J^p \underline{\underline{1}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^p \tag{C.3}$$

On peut alors écrire eq.(C.2) sous la forme :

$$\Big(\mathbb{I} - \frac{\partial p_c}{\partial J^p}\, {}^t J^p \sum_{j\in C_a} \Delta\lambda_j \frac{\partial^2 g_j}{\partial \underline{\underline{\sigma}}\partial p_c} \otimes \underline{\underline{1}}\Big) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P = \sum_{j\in C_a} \frac{\partial g_j}{\partial \underline{\underline{\sigma}}}\mathrm{d}\lambda_j + \sum_{j\in C_a} \Delta\lambda_j \frac{\partial^2 g_j}{\partial \underline{\underline{\sigma}}^2} : (\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} + \mathrm{d}\mathcal{P}\underline{\underline{1}}) \tag{C.4}$$

que l'on note :

$$\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P = \sum_{j\in C_a} \underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j}\mathrm{d}\lambda_j + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{A}}^{P}_{\mathcal{E}^P}\mathrm{d}\mathcal{P} \tag{C.5}$$

avec

$$\left\{\begin{array}{rcl} \underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} & = & \Big(\mathbb{I} - \dfrac{\partial p_c}{\partial J^p}\, {}^t J^p \displaystyle\sum_{k\in C_a} \Delta\lambda_k \frac{\partial^2 g_k}{\partial \underline{\underline{\sigma}}\partial p_c} \otimes \underline{\underline{1}}\Big)^{-1} : \dfrac{\partial g_j}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \\ \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} & = & \Big(\mathbb{I} - \dfrac{\partial p_c}{\partial J^p}\, {}^t J^p \displaystyle\sum_{k\in C_a} \Delta\lambda_k \frac{\partial^2 g_k}{\partial \underline{\underline{\sigma}}\partial p_c} \otimes \underline{\underline{1}}\Big)^{-1} : \displaystyle\sum_{j\in C_a} \Delta\lambda_j \frac{\partial^2 g_j}{\partial \underline{\underline{\sigma}}^2} \\ \underline{\underline{A}}^{P}_{\mathcal{E}^P} & = & \Big(\mathbb{I} - \dfrac{\partial p_c}{\partial J^p}\, {}^t J^p \displaystyle\sum_{k\in C_a} \Delta\lambda_k \frac{\partial^2 g_k}{\partial \underline{\underline{\sigma}}\partial p_c} \otimes \underline{\underline{1}}\Big)^{-1} : \displaystyle\sum_{j\in C_a} \Delta\lambda_j \frac{\partial^2 g_j}{\partial \underline{\underline{\sigma}}^2} : \underline{\underline{1}} \end{array}\right. \tag{C.6}$$

Nous allons maintenant écrire $\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}}$ et $\mathrm{d}\lambda_j$ en fonction de $\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}$, $\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}$ et $\mathrm{d}\mathcal{P}$.

C.1 Expression de $\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}}$

Nous avons établi eq.(5.83) :

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} &= \mathbb{A}_\sigma^{\mathcal{E}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \mathbb{A}_\sigma^{\mathcal{E}^P} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \underline{\underline{A}}_\sigma^p \mathrm{d}p + \mathbb{A}_\sigma^{\omega} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} \\ &= \mathbb{A}_\sigma^{\mathcal{E}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}_\sigma^p \mathrm{d}p + \mathbb{A}_\sigma^{\omega} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \mathbb{A}_\sigma^{\mathcal{E}^P} : \Big(\sum_{j\in C_a} \underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} \mathrm{d}\lambda_j + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{A}}^P_{\mathcal{E}^P} \mathrm{d}\mathcal{P} \Big)\end{aligned}$$

Cela donne :

$$\Big(\mathbb{I} - \mathbb{A}_\sigma^{\mathcal{E}^P} : \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\Big)\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{A}_\sigma^{\mathcal{E}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \Big(\underline{\underline{A}}_\sigma^p + \mathbb{A}_\sigma^{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{A}}^P_{\mathcal{E}^P}\Big)\mathrm{d}p + \mathbb{A}_\sigma^{\omega} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \mathbb{A}_\sigma^{\mathcal{E}^P} : \Big(\sum_{j\in C_a} \underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} \mathrm{d}\lambda_j \Big)$$

que l'on note :

$$\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{B}_\sigma^{\mathcal{E}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{B}}_\sigma^p \mathrm{d}p + \mathbb{B}_\sigma^{\omega} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \sum_{j\in C_a} \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j} \mathrm{d}\lambda_j \tag{C.7}$$

$$\text{avec} \quad \left\{ \begin{array}{rcl} \mathbb{B}_\sigma^{\mathcal{E}} &=& \Big(\mathbb{I} - \mathbb{A}_\sigma^{\mathcal{E}^P} : \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\Big)^{-1} : \mathbb{A}_\sigma^{\mathcal{E}} \\ \underline{\underline{B}}_\sigma^p &=& \Big(\mathbb{I} - \mathbb{A}_\sigma^{\mathcal{E}^P} : \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\Big)^{-1} : \Big(\underline{\underline{A}}_\sigma^p + \mathbb{A}_\sigma^{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{A}}^P_{\mathcal{E}^P}\Big) \\ \mathbb{B}_\sigma^{\omega} &=& \Big(\mathbb{I} - \mathbb{A}_\sigma^{\mathcal{E}^P} : \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\Big)^{-1} : \mathbb{A}_\sigma^{\omega} \\ \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j} &=& \Big(\mathbb{I} - \mathbb{A}_\sigma^{\mathcal{E}^P} : \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\Big)^{-1} : \mathbb{A}_\sigma^{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} \end{array} \right. \tag{C.8}$$

C.2 Expression de $\mathrm{d}\lambda_j$

Puisque l'on assure $\forall i \in C_a$:

$$f_i\Big({}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} + {}^{t'}p\underline{\underline{1}}, p_c \Big) = 0 \tag{C.9}$$

on vérifie :

$$\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} : \Big(\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} + \mathrm{d}\mathcal{P}\underline{\underline{1}}\Big) + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\mathrm{d}p_c = 0 \tag{C.10}$$

c'est-à-dire en reprenant eq.(C.3) :

$$\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} : \Big(\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} + \mathrm{d}\mathcal{P}\underline{\underline{1}}\Big) + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^p}{}^t J^p \underline{\underline{1}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^p = 0 \tag{C.11}$$

En reprenant l'expression de $\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^p$ donnée par eq.(C.5) et celle de $\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}}$ donnée par eq.(C.7), on a donc :

$$\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} : \Big(\mathbb{B}_\sigma^{\mathcal{E}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{B}}_\sigma^p \mathrm{d}p + \mathbb{B}_\sigma^{\omega} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \sum_{j\in C_a} \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j} \mathrm{d}\lambda_j + \mathrm{d}\mathcal{P}\underline{\underline{1}}\Big) +$$

$$\frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^p}{}^t J^p \underline{\underline{1}} : \Big(\sum_{j\in C_a} \underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} \mathrm{d}\lambda_j + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \Big(\mathbb{B}_\sigma^{\mathcal{E}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{B}}_\sigma^p \mathrm{d}p + \mathbb{B}_\sigma^{\omega} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \sum_{j\in C_a} \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j} \mathrm{d}\lambda_j \Big) + \underline{\underline{A}}^P_{\mathcal{E}^P} \mathrm{d}\mathcal{P} \Big) = 0$$

On obtient en regroupant les termes en $\mathrm{d}\lambda_j$:

$$\begin{aligned}\sum_{j\in C_a}[A_\lambda]_{ij}\mathrm{d}\lambda_j &= -\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} : \Big(\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{B}}^p_{\sigma} + \underline{\underline{1}})\mathrm{d}\mathcal{P} + \mathbb{B}^{\omega}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}\Big) \\ &\quad -\frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^p}{}^t J^p \underline{\underline{1}} : \Big(\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : (\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \mathbb{B}^{\omega}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}) + (\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^p_{\sigma} + \underline{\underline{A}}^P_{\mathcal{E}^P})\mathrm{d}\mathcal{P}\Big) \\ \text{avec}\quad [A_\lambda]_{ij} &= \frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} : \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j} + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^p}{}^t J^p \underline{\underline{1}} : \Big(\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j}\Big)\end{aligned}$$

$[A_\lambda]_{ij}$ est un terme scalaire qui peut être vu comme le terme situé à la ligne i et la colonne j d'une matrice $[A_\lambda]$. On définit alors $[A_\lambda^{-1}]$ l'inverse de cette matrice.

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\lambda_j = -\sum_{i\in C_a}[[A_\lambda^{-1}]_{ji}\Big[&\Big(\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} : (\underline{\underline{B}}^p_{\sigma} + \underline{\underline{1}}) + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^p}{}^t J^p \underline{\underline{1}} : (\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^p_{\sigma} + \underline{\underline{A}}^P_{\mathcal{E}^P})\Big)\mathrm{d}\mathcal{P} \\ &+\Big(\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^p}{}^t J^p \underline{\underline{1}} : \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\Big) : (\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \mathbb{B}^{\omega}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}})\Big]\end{aligned}$$

On note :

$$\mathrm{d}\lambda_j = \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\lambda_j} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\lambda_j} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A^p_{\lambda_j}\mathrm{d}\mathcal{P} \tag{C.12}$$

$$\text{avec}\quad \begin{cases} \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\lambda_j} &= -\sum_{i\in C_a}[A_\lambda^{-1}]_{ji}\Big(\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^p}{}^t J^p \underline{\underline{1}} : \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\Big) : \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma} \\ \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\lambda_j} &= -\sum_{i\in C_a}[A_\lambda^{-1}]_{ji}\Big(\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^p}{}^t J^p \underline{\underline{1}} : \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\Big) : \mathbb{B}^{\omega}_{\sigma} \\ A^p_{\lambda_j} &= -\sum_{i\in C_a}[A_\lambda^{-1}]_{ji}\Big(\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} : (\underline{\underline{B}}^p_{\sigma} + \underline{\underline{1}}) + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^p}{}^t J^p \underline{\underline{1}} : (\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^p_{\sigma} + \underline{\underline{A}}^P_{\mathcal{E}^P})\Big) \end{cases} \tag{C.13}$$

C.3 Expression de $\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P$

On réinjecte l'expression de $\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}}$ donnée par eq.(C.7) dans eq.(C.5) qui devient :

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P &= \sum_{j\in C_a}\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j}\mathrm{d}\lambda_j + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \Big(\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{B}}^p_{\sigma}\mathrm{d}p + \mathbb{B}^{\omega}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \sum_{j\in C_a}\underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j}\mathrm{d}\lambda_j\Big) + \underline{\underline{A}}^P_{\mathcal{E}^P}\mathrm{d}\mathcal{P} \\ &= \sum_{j\in C_a}(\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j})\mathrm{d}\lambda_j + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \mathbb{B}^{\omega}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + (\underline{\underline{A}}^P_{\mathcal{E}^P} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^P_{\sigma})\mathrm{d}\mathcal{P}\end{aligned}$$

On réinjecte l'expression de $\mathrm{d}\lambda_j$ donnée par eq.(C.12) dans la formule précédente qui devient :

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P &= \sum_{j\in C_a}(\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j}) \times (\underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\lambda_j} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\lambda_j} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A^P_{\lambda_j}\mathrm{d}\mathcal{P}) \\ &\quad +\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \mathbb{B}^{\omega}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + (\underline{\underline{A}}^P_{\mathcal{E}^P} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^P_{\sigma})\mathrm{d}\mathcal{P}\end{aligned}$$

que l'on note :

$$\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P = \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \mathbb{B}^{\omega}_{\mathcal{E}^P} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \underline{\underline{B}}^P_{\mathcal{E}^P}\mathrm{d}\mathcal{P} \tag{C.14}$$

avec

$$\begin{cases} \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P} &= \displaystyle\sum_{j\in C_a} (\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j}) \otimes \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\lambda_j} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma} \\ \mathbb{B}^{\omega}_{\mathcal{E}^P} &= \displaystyle\sum_{j\in C_a} (\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j}) \otimes \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\lambda_j} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \mathbb{B}^{\omega}_{\sigma} \\ \underline{\underline{B}}^P_{\mathcal{E}^P} &= \displaystyle\sum_{j\in C_a} (\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j}) A^P_{\lambda_j} + \underline{\underline{A}}^P_{\mathcal{E}^P} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^P_{\sigma} \end{cases} \tag{C.15}$$

Annexe D

Ecriture finale des paramètres tangents

Finalement on remplace $\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P$ par l'eq.(C.14) dans les expressions de l'annexe 5.4.1. L'eq.(5.76) devient :

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} = \left(1 - {}^t\beta(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))^{-1}\right)^{-1}\Big[\left({}^t\underline{\underline{B}} - {}^t\beta\ {}^{t'}\varphi(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))^{-1}\underline{\underline{1}}\right) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} \tag{D.1}$$

$$+(\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : (\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{B}}^p_{\mathcal{E}^P}\mathrm{d}p + \mathbb{B}^{\omega}_{\mathcal{E}^P} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}) + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{{}^tM}\Big] \tag{D.2}$$

On peut alors écrire

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} = \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\phi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\phi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A^p_{\phi}\mathrm{d}p \tag{D.3}$$

avec
$$\begin{cases} \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\phi} = \left(1 - {}^t\beta(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))^{-1}\right)^{-1}\left({}^t\underline{\underline{B}} - {}^t\beta\ {}^{t'}\varphi\alpha^{-1}\underline{\underline{1}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P}\right) \\ \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\phi} = \left(1 - {}^t\beta(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))^{-1}\right)^{-1}(\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathbb{B}^{\omega}_{\mathcal{E}^P} \\ A^p_{\phi} = \left(1 - {}^t\beta(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))^{-1}\right)^{-1}\left((\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{B}}^p_{\mathcal{E}^P} + ({}^tM)^{-1}\right) \end{cases} \tag{D.4}$$

L'eq.(5.77) devient :

$$\mathrm{d}\varphi = \left(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}) - {}^t\beta\right)^{-1}\Big[\left({}^t\underline{\underline{B}} - \ {}^{t'}\varphi\underline{\underline{1}}\right) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} \tag{D.5}$$

$$+(\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : (\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{B}}^p_{\mathcal{E}^P}\mathrm{d}p + \mathbb{B}^{\omega}_{\mathcal{E}^P} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}) + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{{}^tM}\Big] \tag{D.6}$$

On peut alors écrire

$$\mathrm{d}\varphi = \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A^p_{\varphi}\mathrm{d}p \tag{D.7}$$

$$\text{avec} \quad \left\{ \begin{array}{rcl} \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\varphi} & = & \Big(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}) - {}^{t}\beta\Big)^{-1}\Big({}^{t}\underline{\underline{B}} - \ {}^{t'}\varphi\underline{\underline{1}} + (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{B}}) : \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P}\Big) \\ \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\varphi} & = & \Big(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}) - {}^{t}\beta\Big)^{-1}(\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{B}}) : \mathbb{B}^{\omega}_{\mathcal{E}^P} \\ A^{p}_{\varphi} & = & \Big(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}) - {}^{t}\beta\Big)^{-1}\Big((\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{B}}^{p}_{\mathcal{E}^P} + ({}^{t}M)^{-1}\Big) \end{array} \right. \tag{D.8}$$

L'eq.(5.82) devient :

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} \ = \ & \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} \cdot \ {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} - \ {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} \cdot \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \ {}^{t'}\underline{\underline{\gamma}}\Big(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}) - {}^{t}\beta\Big)^{-1}\Big[\Big({}^{t}\underline{\underline{B}} - \ {}^{t'}\varphi\underline{\underline{1}}\Big) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} && \text{(D.9)} \\ & + (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{B}}) : (\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{B}}^{p}_{\mathcal{E}^P}\mathrm{d}p + \mathbb{B}^{\omega}_{\mathcal{E}^P} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}) + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{{}^{t}M}\Big] && \text{(D.10)} \\ & + {}^{t'}\mathbb{C} : (\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} - (\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{B}}^{p}_{\mathcal{E}^P}\mathrm{d}p + \mathbb{B}^{\omega}_{\mathcal{E}^P} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}})) - \mathrm{d}p \ {}^{t'}\underline{\underline{B}} && \text{(D.11)} \end{aligned}$$

On peut alors écrire

$$\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} \ = \ \mathbb{C}^{\mathcal{E}}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \mathbb{C}^{\omega}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \underline{\underline{C}}^{p}_{\sigma}\mathrm{d}p \tag{D.12}$$

$$\text{avec} \quad \left\{ \begin{array}{rcl} \mathbb{C}^{\mathcal{E}}_{\sigma} & = & \Big(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}) - {}^{t}\beta\Big)^{-1} \ {}^{t'}\underline{\underline{\gamma}} \otimes \Big({}^{t}\underline{\underline{B}} - \ {}^{t'}\varphi\underline{\underline{1}} + (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{B}}) : \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P}\Big) \\ & & + \ {}^{t'}\mathbb{C} : (\mathbb{I} - \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P}) \\ \underline{\underline{C}}^{p}_{\sigma} & = & \Big(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}) - {}^{t}\beta\Big)^{-1} \ {}^{t'}\underline{\underline{\gamma}}\Big((\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{B}}^{p}_{\mathcal{E}^P} + ({}^{t}M)^{-1}\Big) \\ & & - \ {}^{t'}\mathbb{C} : \underline{\underline{B}}^{p}_{\mathcal{E}^P} - \ {}^{t'}\underline{\underline{B}} \\ \Big[\mathbb{C}^{\omega}_{\sigma}\Big]_{ijkl} & = & \ {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}}_{lj}\delta_{ik} - \ {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}}_{ki}\delta_{jl} \\ & & + \Big(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}) - {}^{t}\beta\Big)^{-1} \ {}^{t'}\underline{\underline{\gamma}} \otimes \Big({}^{t}\underline{\underline{B}} - \ {}^{t'}\varphi\underline{\underline{1}} + (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{B}}) : \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P}\Big) \end{array} \right. \tag{D.13}$$

Annexe E

Résumé pour l'implémentation

Voici regroupés les termes nécessaires pour écrire l'équation (5.56) établie dans la section 5.2.1. La figure E.1 à la fin de cette annexe donne les contraintes sur l'ordre d'implémentation des termes relatifs à la matrice tangente.

E.1 Synthèse

On résoud le système (5.56) :

$$\mathcal{J}(X^i)\delta X = -\mathcal{G}(X^i)$$

constitué de deux équations scalaires :

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_M^i \delta X &= -\mathcal{G}_M^i \\ \mathcal{J}_F^i \delta X &= -\mathcal{G}_F^i \end{aligned}$$

Pour écrire la première équation (conservation des moments), on reprend eq.(5.61) et eq.(5.88) :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_M^i = & \int_{\Omega_t} \underline{\underline{\sigma}}^i : \Big({}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\mathcal{U}}) \cdot (\alpha^i \underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathcal{U}^i)) \Big)\, d\Omega_t \\ & - \int_{\Omega_t} \Big({}^t\rho + \rho^f \frac{\Delta^i \phi}{J_{0t}} \Big) \underline{g} \cdot \hat{\mathcal{U}}\, d\Omega_t \\ & + \int_{\Gamma_t^T} p^i \hat{\mathcal{U}} \cdot (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}^T(\mathcal{U}^i) + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i)\underline{\underline{1}}) \cdot \underline{dS}_t \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_M(X^i) = & \int_{\Omega_t} \Big(\mathbb{B}_\sigma^{\mathcal{E}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \mathbb{B}_\sigma^{\omega} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \underline{\underline{B}}_\sigma^p \mathrm{d}\mathcal{P} \Big) : {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\mathcal{U}}) \cdot \Big(\underline{\underline{1}} + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i)\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathcal{U}^i) \Big)\, d\Omega_t \\ & + \int_{\Omega_t} \underline{\underline{\sigma}}^i : {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\mathcal{U}}) \cdot \Big(\ tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}})\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\mathcal{U}) \Big)\, d\Omega_t \\ & - \int_{\Omega_t} \rho^f \Big(\underline{\underline{A}}_\phi^{\mathcal{E}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}_\phi^{\omega} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A_\phi^p \mathrm{d}\mathcal{P} \Big) \underline{g} \cdot \hat{\mathcal{U}}\, d\Omega_t \\ & + \int_{\Gamma_t^T} \mathrm{d}\mathcal{P} \hat{\mathcal{U}} \cdot (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}^T(\mathcal{U}^i) + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i)\underline{\underline{1}}) \cdot \underline{dS}_t \\ & + \int_{\Gamma_t^T} p^i \hat{\mathcal{U}} \cdot (-{}^t\underline{\underline{\nabla}}^T(\mathrm{d}\mathcal{U}) + \ tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}})\underline{\underline{1}}) \cdot \underline{dS}_t \end{aligned}$$

Pour écrire la seconde équation (conservation de la masse fluide), on reprend eq.(5.62) et eq.(5.87) :

$$
\begin{aligned}
\mathcal{G}_F^i = &- \int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}} \frac{\Delta^i \phi}{J_{0t}} \, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t \, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g}) \, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Delta t \, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g}) \, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t \, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot ({}^t\underline{\nabla} p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i)) \, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t \, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g}) \, tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i) \, d\Omega_t \\
&- \int_{\Gamma_t^w} \Delta t \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f} \, {}^{t'}w^d \Big(\alpha^i - {}^t\underline{n} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) \cdot {}^t\underline{n} \Big) \, dS_t
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathcal{J}_F(X^i) = &- \int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}} \Big(\underline{\underline{A}}_\phi^{\mathcal{E}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}_\phi^{\omega} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A_\phi^p \mathrm{d}\mathcal{P} \Big) \, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t \, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi} \Big(\underline{\underline{A}}_\varphi^{\mathcal{E}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}_\varphi^{\omega} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A_\varphi^p \mathrm{d}\mathcal{P} \Big) \cdot (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g}) \, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Delta t \, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot {}^t\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P} \, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Delta t \, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}) \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g}) \, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Delta t \, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi} \Big(\underline{\underline{A}}_\varphi^{\mathcal{E}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}_\varphi^{\omega} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A_\varphi^p \mathrm{d}\mathcal{P} \Big) \cdot (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g}) \, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t \, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot {}^t\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P} \, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t \, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi} \Big(\underline{\underline{A}}_\varphi^{\mathcal{E}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}_\varphi^{\omega} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A_\varphi^p \mathrm{d}\mathcal{P} \Big) \cdot ({}^t\underline{\nabla} p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i)) \, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t \, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot ({}^t\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i)) \, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t \, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot ({}^t\underline{\nabla} p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}})) \, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t \, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi} \Big(\underline{\underline{A}}_\varphi^{\mathcal{E}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}_\varphi^{\omega} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A_\varphi^p \mathrm{d}\mathcal{P} \Big) \cdot (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g}) \, tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i) \, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Delta t \, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot {}^t\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P} \, tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i) \, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t \, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g}) \, tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}) \, d\Omega_t \\
&- \int_{\Gamma_t^w} \Delta t \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f} \, {}^{t'}w^d \Big(\, tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}) - {}^t\underline{n} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}) \cdot {}^t\underline{n} \Big) \, dS_t
\end{aligned}
$$

E.2 Jacobiennes détaillées terme à terme

$$
\begin{aligned}
\mathcal{J}_M(X^i) = \quad & \int_{\Omega_t} \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} : {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\mathcal{U}}) \cdot \left(\alpha^i \underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i)\right) \, d\Omega_t \\
& + \int_{\Omega_t} \mathbb{B}^{\omega}_{\sigma} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} : {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\mathcal{U}}) \cdot \left(\alpha^i \underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i)\right) \, d\Omega_t \\
& + \int_{\Omega_t} \underline{\underline{B}}^p_{\sigma} \mathrm{d}\mathcal{P} : {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\mathcal{U}}) \cdot \left(\alpha^i \underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i)\right) \, d\Omega_t \\
& + \int_{\Omega_t} \underline{\underline{\sigma}}^i : {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\mathcal{U}}) \; tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}) \; d\Omega_t \\
& - \int_{\Omega_t} \underline{\underline{\sigma}}^i : ({}^t\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\mathcal{U}}) \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}})) \; d\Omega_t \\
& - \int_{\Omega_t} \rho^f \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\phi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}\underline{g} \cdot \hat{\mathcal{U}} \; d\Omega_t \\
& - \int_{\Omega_t} \rho^f \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\phi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}\underline{g} \cdot \hat{\mathcal{U}} \; d\Omega_t \\
& - \int_{\Omega_t} \rho^f A^p_{\phi} \mathrm{d}\mathcal{P}\underline{g} \cdot \hat{\mathcal{U}} \; d\Omega_t \\
& + \int_{\Gamma^T_t} \mathrm{d}\mathcal{P}\hat{\mathcal{U}} \cdot (\alpha^i \underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}^T(\underline{\mathcal{U}}^i)) \cdot \underline{dS}_t \\
& - \int_{\Gamma^T_t} p^i \hat{\mathcal{U}} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}^T(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}) \cdot \underline{dS}_t \\
& + \int_{\Gamma^T_t} p^i \; tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}) \hat{\mathcal{U}} \cdot \underline{dS}_t
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathcal{J}_F(X^i) = &- \int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}} \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\phi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}} \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\phi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}} A^{p}_{\phi} \mathrm{d}\mathcal{P}\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}) \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i)) \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi} \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} \cdot (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i)) \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi} \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} \cdot (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i)) \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi} A^{p}_{\varphi} \mathrm{d}\mathcal{P} \cdot (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i)) \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot {}^t\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P}\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi} \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} \cdot \Big({}^t\underline{\nabla} p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) + (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g})\, tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i) \Big)\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi} \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} \cdot \Big({}^t\underline{\nabla} p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) + (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g})\, tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i) \Big)\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial \varphi} A^{p}_{\varphi} \mathrm{d}\mathcal{P} \cdot \Big({}^t\underline{\nabla} p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) + (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g})\, tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i) \Big)\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot \Big({}^t\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P} \cdot ({}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) - \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i)\underline{\underline{1}}) \Big)\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot ({}^t\underline{\nabla} p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}))\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^i \cdot (-{}^t\underline{\nabla} p^i + \rho^f \underline{g})\, tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}})\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Gamma^w_t} \Delta t \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f}\, {}^{t'}w^d\, tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}})\, dS_t \\
&+ \int_{\Gamma^w_t} \Delta t \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f}\, {}^{t'}w^{dt}\underline{n} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}) \cdot {}^t\underline{n}\, dS_t
\end{aligned}
$$

E.3 Notations utilisées

$$
\left\{
\begin{array}{rcl}
\underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\phi} & = & \Big(1 - {}^t\beta\alpha^{-1}\Big)^{-1} \Big({}^t\underline{\underline{B}} - {}^t\beta\alpha^{-1}\, {}^{t'}\varphi\underline{\underline{1}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P} \Big) \\
\underline{\underline{A}}^{\omega}_{\phi} & = & \Big(1 - {}^t\beta\alpha^{-1}\Big)^{-1} (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathbb{B}^{\omega}_{\mathcal{E}^P} \\
A^{p}_{\phi} & = & \Big(1 - {}^t\beta\alpha^{-1}\Big)^{-1} \Big((\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{B}}^{p}_{\mathcal{E}^P} + ({}^tM)^{-1} \Big)
\end{array}
\right. \tag{E.1}
$$

$$\left\{\begin{array}{rcl} \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\varphi} & = & \Big(\alpha - {}^t\beta\Big)^{-1}\Big({}^t\underline{\underline{B}} - {}^{t'}\varphi\underline{\underline{1}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P}\Big) \\ \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\varphi} & = & \Big(\alpha - {}^t\beta\Big)^{-1}(\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathbb{B}^{\omega}_{\mathcal{E}^P} \\ A^{p}_{\varphi} & = & \Big(\alpha - {}^t\beta\Big)^{-1}\Big((\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{B}}^{p}_{\mathcal{E}^P} + ({}^tM)^{-1}\Big) \end{array}\right. \tag{E.2}$$

$$\left\{\begin{array}{rcl} \mathbb{C}^{\mathcal{E}}_{\sigma} & = & \Big(\alpha - {}^t\beta\Big)^{-1}\,{}^{t'}\underline{\underline{\gamma}} \otimes \Big({}^t\underline{\underline{B}} - {}^{t'}\varphi\underline{\underline{1}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P}\Big) \\ & & + {}^{t'}\mathbb{C} : (\mathbb{I} - \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P}) \\ \underline{\underline{C}}^{p}_{\sigma} & = & \Big(\alpha - {}^t\beta\Big)^{-1}\,{}^{t'}\underline{\underline{\gamma}}\Big((\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{B}}^{p}_{\mathcal{E}^P} + ({}^tM)^{-1}\Big) \\ & & - {}^{t'}\mathbb{C} : \underline{\underline{B}}^{p}_{\mathcal{E}^P} - {}^{t'}\underline{\underline{B}} \\ \Big[\mathbb{C}^{\omega}_{\sigma}\Big]_{ijkl} & = & {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}}_{lj}\delta_{ik} - {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}}_{ki}\delta_{jl} \\ & & + \Big(\alpha - {}^t\beta\Big)^{-1}\,{}^{t'}\underline{\underline{\gamma}} \otimes \Big({}^t\underline{\underline{B}} - {}^{t'}\varphi\underline{\underline{1}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P}\Big) \end{array}\right. \tag{E.3}$$

$$\left\{\begin{array}{rcl} \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\mathcal{E}^P} & = & \displaystyle\sum_{j\in C_a} (\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j}) \otimes \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\lambda_j} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma} \\ \mathbb{B}^{\omega}_{\mathcal{E}^P} & = & \displaystyle\sum_{j\in C_a} (\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j}) \otimes \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\lambda_j} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \mathbb{B}^{\omega}_{\sigma} \\ \underline{\underline{B}}^{P}_{\mathcal{E}^P} & = & \displaystyle\sum_{j\in C_a} (\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j}) A^{P}_{\lambda_j} + \underline{\underline{A}}^{P}_{\mathcal{E}^P} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^{P}_{\sigma} \end{array}\right. \tag{E.4}$$

$$\left\{\begin{array}{rcl} \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\lambda_j} & = & -\displaystyle\sum_{i\in C_a} [A^{-1}_{\lambda}]_{ji}\Big(\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^p}\,{}^t J^p\underline{\underline{1}} : \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\Big) : \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma} \\ \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\lambda_j} & = & -\displaystyle\sum_{i\in C_a} [A^{-1}_{\lambda}]_{ji}\Big(\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^p}\,{}^t J^p\underline{\underline{1}} : \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\Big) : \mathbb{B}^{\omega}_{\sigma} \\ A^{p}_{\lambda_j} & = & -\displaystyle\sum_{i\in C_a} [A^{-1}_{\lambda}]_{ji}\Big(\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} : (\underline{\underline{B}}^{p}_{\sigma} + \underline{\underline{1}}) + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^p}\,{}^t J^p\underline{\underline{1}} : (\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^{p}_{\sigma} + \underline{\underline{A}}^{P}_{\mathcal{E}^P})\Big) \end{array}\right. \tag{E.5}$$

$$[A_{\lambda}]_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} : \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j} + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^p}\,{}^t J^p\underline{\underline{1}} : \Big(\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} + \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} : \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j}\Big)$$

$$\left\{\begin{array}{rcl} \mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma} & = & \Big(\mathbb{I} - \mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma} : \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\Big)^{-1} : \mathbb{A}^{\mathcal{E}}_{\sigma} \\ \underline{\underline{B}}^{p}_{\sigma} & = & \Big(\mathbb{I} - \mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma} : \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\Big)^{-1} : \Big(\underline{\underline{A}}^{p}_{\sigma} + \mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma} : \underline{\underline{A}}^{P}_{\mathcal{E}^P}\Big) \\ \mathbb{B}^{\omega}_{\sigma} & = & \Big(\mathbb{I} - \mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma} : \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\Big)^{-1} : \mathbb{A}^{\omega}_{\sigma} \\ \underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j} & = & \Big(\mathbb{I} - \mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma} : \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\Big)^{-1} : \mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma} : \underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} \end{array}\right. \tag{E.6}$$

$$\left\{\begin{array}{rcl} \underline{\underline{\underline{\underline{A}}}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} & = & \left(\mathbb{I} - \dfrac{\partial p_c}{\partial J^p}{}^t J^p \displaystyle\sum_{k\in C_a} \Delta\lambda_k \frac{\partial^2 g_k}{\partial \underline{\underline{\sigma}} \partial p_c} \otimes \underline{\underline{1}}\right)^{-1} : \dfrac{\partial g_j}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \\ \mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P} & = & \left(\mathbb{I} - \dfrac{\partial p_c}{\partial J^p}{}^t J^p \displaystyle\sum_{k\in C_a} \Delta\lambda_k \frac{\partial^2 g_k}{\partial \underline{\underline{\sigma}} \partial p_c} \otimes \underline{\underline{1}}\right)^{-1} : \displaystyle\sum_{j\in C_a} \Delta\lambda_j \frac{\partial^2 g_j}{\partial \underline{\underline{\sigma}}^2} \\ \underline{\underline{\underline{\underline{A}}}}^{P}_{\mathcal{E}^P} & = & \left(\mathbb{I} - \dfrac{\partial p_c}{\partial J^p}{}^t J^p \displaystyle\sum_{k\in C_a} \Delta\lambda_k \frac{\partial^2 g_k}{\partial \underline{\underline{\sigma}} \partial p_c} \otimes \underline{\underline{1}}\right)^{-1} : \displaystyle\sum_{j\in C_a} \Delta\lambda_j \frac{\partial^2 g_j}{\partial \underline{\underline{\sigma}}^2} : \underline{\underline{1}} \end{array}\right. \tag{E.7}$$

$$\left\{\begin{array}{rcl} \mathbb{A}^{\mathcal{E}}_{\sigma} & = & \left(\alpha - {}^t\beta\right)^{-1} {}^{t'}\underline{\underline{\gamma}} \otimes \left({}^t\underline{\underline{B}} - {}^{t'}\varphi \underline{\underline{1}}\right) + {}^{t'}\mathbb{C} \\ \mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma} & = & \left(\alpha - {}^t\beta\right)^{-1} {}^{t'}\underline{\underline{\gamma}} \otimes (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) - {}^{t'}\mathbb{C} \\ \underline{\underline{\underline{\underline{A}}}}^{p}_{\sigma} & = & \left(\alpha - {}^t\beta\right)^{-1} ({}^tM)^{-1} {}^{t'}\underline{\underline{\gamma}} - {}^{t'}\underline{\underline{B}} \\ \left[\mathbb{A}^{\omega}_{\sigma}\right]_{ijkl} & = & {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}}_{ki}\delta_{jl} - {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}}_{lj}\delta_{ik} \end{array}\right.$$

$$\begin{array}{ll} \alpha^i = 1 + \ tr(\Delta^i \underline{\underline{\mathcal{E}}}) & \beta = \dfrac{\partial \underline{\underline{B}}}{\partial \varphi} : {}^t\underline{\underline{\varepsilon}}^e + {}^t p \dfrac{\partial M^{-1}}{\partial \varphi} \\ \underline{\underline{\gamma}} = \dfrac{\partial \mathbb{C}}{\partial \varphi} : {}^t\mathbb{C}^{-1} : {}^t\underline{\underline{\sigma}}'^e - {}^t p \dfrac{\partial \underline{\underline{B}}}{\partial \varphi} & \underline{\pi} = -{}^t\underline{\nabla}{}^t p + \rho^f \underline{g} \end{array} \tag{E.8}$$

$$\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} = \left\{ \frac{\partial \mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}}{\partial {}^t\underline{x}} \right\}_a \tag{E.9}$$

E.4 Simplifications

On suppose que le tenseur de Biot est isotrope :

$$\underline{\underline{B}} = b\underline{\underline{1}} \qquad \text{donc} \qquad \frac{\partial \underline{\underline{B}}}{\partial \varphi} = b'\underline{\underline{1}} \qquad \text{où l'on note} \qquad b' = \frac{\partial b}{\partial \varphi} \tag{E.10}$$

On suppose aussi que le tenseur de comportement $\mathbb{C}$ est homogène isotrope :

$$\mathbb{C} = 3k\mathbb{J} + 2\mu\mathbb{K} \qquad \text{où} \qquad \mathbb{I}_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \qquad \mathbb{J}_{ijkl} = \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl} \qquad \mathbb{K} = \mathbb{I} - \mathbb{J} \tag{E.11}$$

On peut alors écrire :

$$\frac{\partial \mathbb{C}}{\partial \varphi} : {}^t\mathbb{C}^{-1} = \frac{k'}{k}\mathbb{J} + \frac{\mu'}{\mu}\mathbb{K} \qquad \text{où l'on note} \qquad k' = \frac{\partial k}{\partial \varphi} \qquad \text{et} \qquad \mu' = \frac{\partial \mu}{\partial \varphi} \tag{E.12}$$

Les hypothèses eq.(E.10) et eq.(E.11) nous permettent de simplifier :

$$\begin{array}{ll} \beta = b' tr({}^t\underline{\underline{\varepsilon}}^e) + {}^t p \dfrac{\partial M^{-1}}{\partial \varphi} & \underline{\underline{\gamma}} = (\dfrac{k'}{k}\mathbb{J} + \dfrac{\mu'}{\mu}\mathbb{K}) : {}^t\underline{\underline{\sigma}}'^e - {}^t p b' \underline{\underline{1}} \\ & \quad = \dfrac{k'}{k}\{{}^t\underline{\underline{\sigma}}'^e\}_s + \dfrac{\mu'}{\mu}\{{}^t\underline{\underline{\sigma}}'^e\}_a - {}^t p b' \underline{\underline{1}} \end{array} \tag{E.13}$$

$$\left\{\begin{array}{rcl} \mathbb{A}_{\sigma}^{\mathcal{E}} & = & \Big(\alpha - {}^{t}\beta\Big)^{-1}({}^{t}b - {}^{t'}\varphi)\ {}^{t'}\underline{\underline{\gamma}} \otimes \underline{\underline{1}} + {}^{t'}\mathbb{C} \\ \mathbb{A}_{\sigma}^{\mathcal{E}^P} & = & \Big(\alpha - {}^{t}\beta\Big)^{-1}(1 - {}^{t}b)\ {}^{t'}\underline{\underline{\gamma}} \otimes \underline{\underline{1}} - {}^{t'}\mathbb{C} \\ \underline{\underline{A}}_{\sigma}^{p} & = & \Big(\alpha - {}^{t}\beta\Big)^{-1}({}^{t}M)^{-1}\ {}^{t'}\underline{\underline{\gamma}} - {}^{t'}b\underline{\underline{1}} \\ \Big[\mathbb{A}_{\sigma}^{\omega}\Big]_{ijkl} & = & {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}}_{ki}\delta_{jl} - {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}}_{lj}\delta_{ik} \end{array}\right.$$

$$\left\{\begin{array}{rcl} \underline{\underline{A}}_{\phi}^{\mathcal{E}} & = & \Big(1 - {}^{t}\beta\alpha^{-1}\Big)^{-1}\Big({}^{t}b\underline{\underline{1}} - {}^{t}\beta\alpha^{-1}\ {}^{t'}\varphi\underline{\underline{1}} + (1 - {}^{t}b)\underline{\underline{1}} : \mathbb{B}_{\mathcal{E}^P}^{\mathcal{E}}\Big) \\ \underline{\underline{A}}_{\phi}^{\omega} & = & \Big(1 - {}^{t}\beta\alpha^{-1}\Big)^{-1}(1 - {}^{t}b)\underline{\underline{1}} : \mathbb{B}_{\mathcal{E}^P}^{\omega} \\ A_{\phi}^{p} & = & \Big(1 - {}^{t}\beta\alpha^{-1}\Big)^{-1}\Big((1 - {}^{t}b)tr(B_{\mathcal{E}^P}^{p}) + ({}^{t}M)^{-1}\Big) \end{array}\right. \tag{E.14}$$

$$\left\{\begin{array}{rcl} \underline{\underline{A}}_{\varphi}^{\mathcal{E}} & = & \Big(\alpha - {}^{t}\beta\Big)^{-1}\Big(({}^{t}b - {}^{t'}\varphi)\underline{\underline{1}} + (1 - {}^{t}b)\underline{\underline{1}} : \mathbb{B}_{\mathcal{E}^P}^{\mathcal{E}}\Big) \\ \underline{\underline{A}}_{\varphi}^{\omega} & = & \Big(\alpha - {}^{t}\beta\Big)^{-1}(1 - {}^{t}b)\underline{\underline{1}} : \mathbb{B}_{\mathcal{E}^P}^{\omega} \\ A_{\varphi}^{p} & = & \Big(\alpha - {}^{t}\beta\Big)^{-1}\Big((1 - {}^{t}b)tr(\underline{\underline{B}}_{\mathcal{E}^P}^{p}) + ({}^{t}M)^{-1}\Big) \end{array}\right. \tag{E.15}$$

$$\left\{\begin{array}{rcl} \mathbb{C}_{\sigma}^{\mathcal{E}} & = & \Big(\alpha - {}^{t}\beta\Big)^{-1}\ {}^{t'}\underline{\underline{\gamma}} \otimes \Big(({}^{t}b - {}^{t'}\varphi)\underline{\underline{1}} + (1 - {}^{t}b)\underline{\underline{1}} : \mathbb{B}_{\mathcal{E}^P}^{\mathcal{E}}\Big) + {}^{t'}\mathbb{C} : (\mathbb{I} - \mathbb{B}_{\mathcal{E}^P}^{\mathcal{E}}) \\ \underline{\underline{C}}_{\sigma}^{p} & = & \Big(\alpha - {}^{t}\beta\Big)^{-1}\ {}^{t'}\underline{\underline{\gamma}}\Big((1 - {}^{t}b)\underline{\underline{1}} : \underline{\underline{B}}_{\mathcal{E}^P}^{p} + ({}^{t}M)^{-1}\Big) - {}^{t'}\mathbb{C} : \underline{\underline{B}}_{\mathcal{E}^P}^{p} - {}^{t'}b\underline{\underline{1}} \\ \Big[\mathbb{C}_{\sigma}^{\omega}\Big]_{ijkl} & = & {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}}_{lj}\delta_{ik} - {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}}_{ki}\delta_{jl} + \Big(\alpha - {}^{t}\beta\Big)^{-1}\ {}^{t'}\underline{\underline{\gamma}} \otimes \Big(({}^{t}b - {}^{t'}\varphi)\underline{\underline{1}} + (1 - {}^{t}b)\underline{\underline{1}} : \mathbb{B}_{\mathcal{E}^P}^{\mathcal{E}}\Big) \end{array}\right. \tag{E.16}$$

$$
\begin{aligned}
\mathcal{J}_F(X^i) = &- \int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}} \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\phi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}} \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\phi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}} A^{p}_{\phi} \mathrm{d}\mathcal{P}\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}) \cdot \underline{\pi}^i k^i\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \Big(({}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) - \underline{\underline{1}}) \cdot \underline{\pi}^i - \Big({}^t\underline{\nabla} p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) + \underline{\pi}^i\, tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i) \Big) \Big) k' \underline{\underline{A}}^{\mathcal{E}}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \Big(({}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) - \underline{\underline{1}}) \cdot \underline{\pi}^i - \Big({}^t\underline{\nabla} p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) + \underline{\pi}^i\, tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i) \Big) \Big) k' \underline{\underline{A}}^{\omega}_{\varphi} : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \Big(({}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) - \underline{\underline{1}}) \cdot \underline{\pi}^i - \Big({}^t\underline{\nabla} p^i \cdot {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) + \underline{\pi}^i\, tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i) \Big) \Big) k' A^{p}_{\varphi} \mathrm{d}\mathcal{P}\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \Big(({}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) - \underline{\underline{1}}) + ({}^t\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}^i) - \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^i)\underline{\underline{1}})^T \Big) \cdot {}^t\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P} k^i\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^t\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \Big(\underline{\underline{1}} \otimes {}^t\underline{\nabla} p^i + \underline{\pi}^i \otimes \underline{\underline{1}} \Big) : {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}) k^i\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Gamma^w_t} \Delta t \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f}\, {}^{t'}w^d (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{n} \otimes {}^t\underline{n}) : {}^t\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}})\, dS_t
\end{aligned}
$$

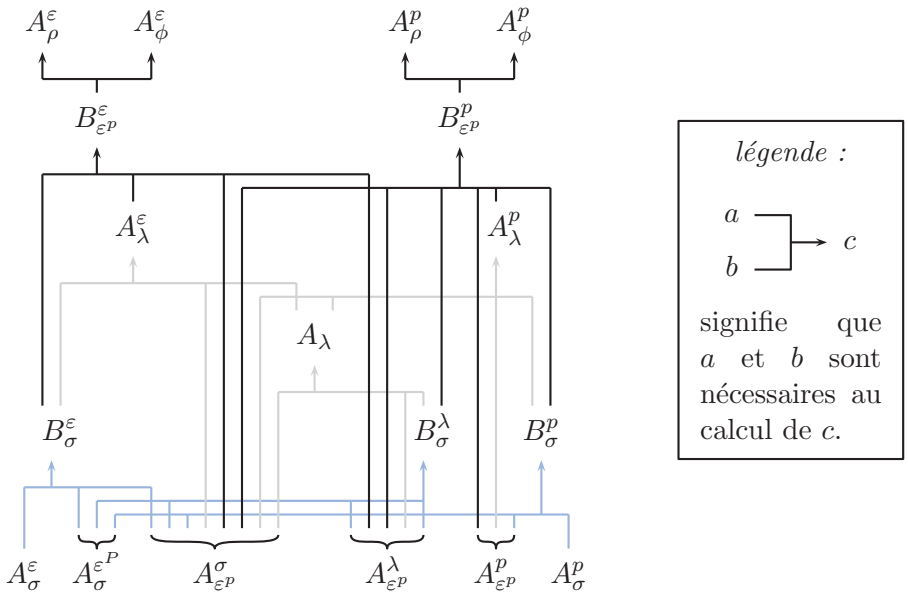


Figure E.1 – Arborescence d'implémentation des termes de la matrice tangente

Annexe F

Article pour le congrès de l'A.R.M.A. 2012

Les travaux de cette thèse concernant la simulation de compaction mécanique ont été présentés au 46^{th} US Rock Mechanics / Geomechanics Symposium qui s'est tenu à Chicago en juin 2012. Voici l'article publié à l'occasion de cette présentation.

ARMA 12-310

A new approach to the sedimentation and compaction of basin based on continuum mechanics concepts

Guilmin, A.-L.
IFP Energies nouvelles, 1 et 4 avenue de Bois-Préau, 92852 Rueil-Malmaison, France
Barthélémy, J.-F.
IFP Energies nouvelles, 1 et 4 avenue de Bois-Préau, 92852 Rueil-Malmaison, France
Sassi, W.
IFP Energies nouvelles, 1 et 4 avenue de Bois-Préau, 92852 Rueil-Malmaison, France

Copyright 2012 ARMA, American Rock Mechanics Association

This paper was prepared for presentation at the 46th US Rock Mechanics / Geomechanics Symposium held in Chicago, IL, USA, 24-27 June 2012.

This paper was selected for presentation at the symposium by an ARMA Technical Program Committee based on a technical and critical review of the paper by a minimum of two technical reviewers. The material, as presented, does not necessarily reflect any position of ARMA, its officers, or members. Electronic reproduction, distribution, or storage of any part of this paper for commercial purposes without the written consent of ARMA is prohibited. Permission to reproduce in print is restricted to an abstract of not more than 300 words; illustrations may not be copied. The ab-

ABSTRACT: This work aims at simulating basin sedimentation subjected to tectonic effects with a poro-mechanical approach. A code is built to solve the fundamental equations of mechanics in a mixed formulation (displacement and pressure). In the range of depth of interest, material is assumed to have an elasto-plastic behaviour. It is adapted for large strains using different assumptions from [1]. Material properties such as porosity or permeability are computed and updated at each step of the compaction. Although this simulation tool is designed to deal with complex cases, we checked that the reference relationships between porosity and depth for œdometric compaction are still satisfied.

INTRODUCTION

With the decrease of oil resources and the increase of energy demand, the oil industry has to face two challenges: to extract more efficiently hydrocarbons from current production fields and to explore more complex sedimentary basin (such as deep offshore sub-salt tectonic settings or fold-and-thrust belt provinces). Now that geophysics imaging has significantly improved with new techniques for 3D and 4D surveys, numerical tools for basin modeling and reservoir simulation need to be improved and optimized to help addressing these two objectives. Of paramount importance among other scientific questions related to petroleum system analyses is how to predict overpressures generation – in particular in basins subjected to tectonic loading.

Current basin simulators are based on assumptions which prevent from dealing with a tectonic history. Indeed, only uniaxial compaction and lithostatic vertical stress [2] are considered to reconstruct the past geometries of a basin. Porosity and effective stress are only related through an empirical scalar constitutive law, so at the end, there is a bijection between porosity and depth - as in the pioneering work of Athy [3]. Today, efforts are dedicated on getting a mechanical modeling approach that should yield more accurate predictions of porosity and pressure evolution in tectonically complex zones.

This paper presents intermediate results about a work that aims at creating a tool which simulates sedimentation with hydro-mechanical coupling at basin-scale, takes into account tectonic stresses and still satisfies the reference relationships between porosity and depth for œdometric compaction.

In the following, we will first explain the global method of our simulation, then we will focus on some innovative items and finally results will be shown.

1. ARCHITECTURE OF THE MODEL

When a rock is buried, first each solid grain is elastically strained, then grains are structurally reorganized and when it goes even deeper, pressure-solution can appear depending on rock chemistry, pressure and temperature (chemical compaction) [4]. In this work, we will focus on modeling the first two steps only, that is mechanical compaction, and assume a poro-elasto-plastic behavior for the rock.

1.1. Poro-mechanical model

It is assumed that the medium is a material with two phases: a solid matrix and a fully fluid-saturated pore phase. Since the irreversible strain of the rock matrix is mainly due to grain reorganization and not micro fracturing, the rock is assumed to be plastically incompressible. The fluid (water) is supposed to be incompressible – relatively to the grains.

The size of our representative volume element (r.v.e.) is chosen large enough so that the medium can be seen as

continuous and homogeneous and small enough to be the characteristic size of the mesh of the whole basin (Ω).

At each point of the studied domain, this porous material must satisfy the momentum balance (Eq. (1)) and the fluid mass conservation (Eq. (2)) equations and the mixed boundary conditions.

$$div\underline{\underline{\sigma}} + \rho \underline{g} = \underline{0} \tag{1}$$

$$\dot{m} + J div\ \underline{w} = 0 \tag{2}$$

where σ is the stress tensor, ρ the total rock density, g the gravity, m the Lagrangian fluid mass content, J the jacobian and w the fluid mass flow. In this paper, vectors are underlined once, second order tensors twice and fourth order tensors are written with a vertical bar.

In the following, specific boundary conditions are chosen to test the physical model and its numerical implementation: we assume that the overburden is growing on a fixed rigid basement at the bottom, and is subjected to tectonic lateral strains (u^d) and to constant hydrostatic profile at top (P^d pressure and T^d weight) (as illustrated in Fig.1).

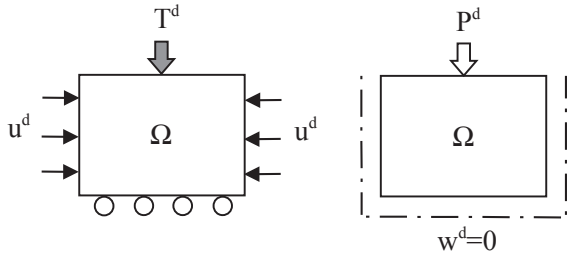


Fig. 1. Illustration of mixed boundary conditions on a 2D case.

Each r.v.e. describes a fixed quantity of solid mass and it moves as the matrix gets strained. As seen in Fig.1, the fluid is only allowed to flow ($w^d \neq 0$) through the top boundary in our test case.

1.2. Constitutive law

Since solid skeleton is plastically incompressible, we assume that the elasticity tensor of the solid phase (noted C^s) is not affected by the plasticity. Then using micromechanics, we get the same macroscopic constitutive law as in [1]:

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}^{\boldsymbol{e}} - p\underline{\underline{B}} \tag{3}$$

$$\underline{\underline{B}} = \underline{\underline{1}} : (\mathbb{I} - \mathbb{C}^{\boldsymbol{s-1}} : \mathbb{C}) \tag{4}$$

$$\mathbb{C} = (1-\varphi)\mathbb{C}^{\boldsymbol{s}} :< \mathcal{A} >_{\Omega^s} \tag{5}$$

where C the behavior of the r.v.e., ε^e the elastic strain tensor, p the pore pressure, B the Biot tensor (assumed isotropic), φ the Eulerian porosity, A the strain concentration tensor and Ω^s the volume of the solid part of the r.v.e..

The fluid flow is locally modeled with Darcy's law:

$$\frac{{}^{t'}\underline{w}}{\rho^f} = {}^{t'}\underline{\underline{K}} \cdot (-{}^{t'}\nabla\, {}^{t'}p + \rho^f \underline{g}) \tag{6}$$

where K is the permeability tensor, ρ^f the fluid density.

1.3. General method

Eq. (1) and Eq. (2) are dualized so that we get the following weak formulation at an instant t' = t+Δt :

$$\int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} :\ {}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{U}})\ d\Omega_{t'} = \int_{\Omega_{t'}} {}^{t'}\rho \underline{g} \cdot \hat{\underline{U}}\ d\Omega_{t'} + \int_{\Gamma^T_{t'}} {}^{t'}\underline{T}^d \cdot \hat{\underline{U}}\ dS_{t'} \tag{7}$$

$$\int_{\Omega_{t'}} \hat{\mathcal{P}} \frac{\Delta\phi}{J_{0t'}}\ d\Omega_{t'} - \int_{\Omega_{t'}} \Delta t\ {}^{t'}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^{t'}\underline{\underline{K}} \cdot (-{}^{t'}\underline{\nabla}\, {}^{t'}p + \rho^f \underline{g})\ d\Omega_{t'} = -\int_{\Gamma^w_{t'}} \Delta t \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f}\, {}^{t'}w^d\ dS_{t'} \tag{8}$$

where Γ is the boundary, U the increment of displacement, P the increment of pressure, ρ the total density, ρ^f the fluid density, T^d a Newman boundary condition (for displacement), w^d a Newman boundary condition (for pressure), K the permeability tensor and p the total pressure. Dual quantities are noted with a hat.

A classical finite element method is employed to solve this system. At the end of the computation, the result needs both to satisfy the mechanical equations on the whole mesh and reach an plastically admissible state locally everywhere – this is done here with a return mapping algorithm [5]. So we put inside a global Newton-Raphson method (see 2.3) a plasticity algorithm with an elastic predictor is called (as [6]). This is illustrated in Fig. 2.

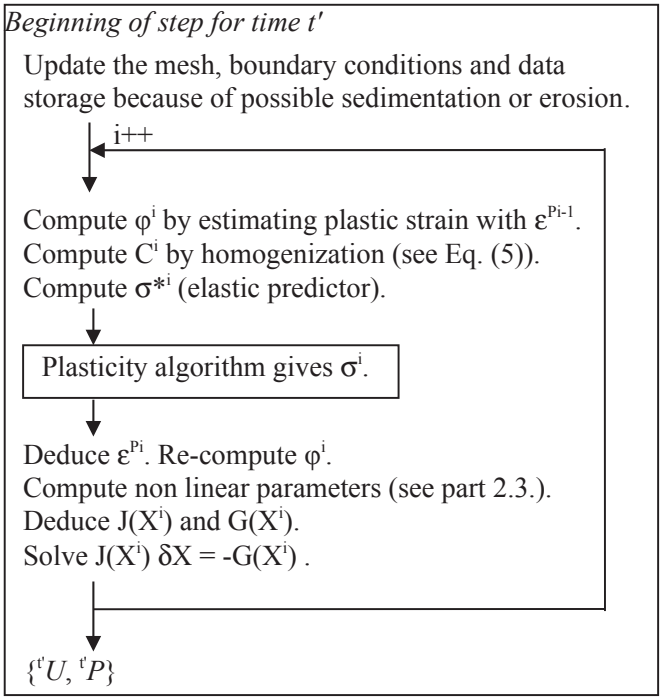


Fig. 2. Scheme of the algorithm for time t'.

This plasticity algorithm uses itself a Newton-Raphson algorithm which converges towards a plastically admissible stress. It is initialized with a trial stress σ^{*i} using an elastic predictor, as detailed in appendix 1.

2. INNOVATIVE WORK

2.1. Improvement of the formulation

We adopt an updated Lagrangian scheme as [7]: time increments are chosen small enough so that the material can be considered as subjected to small strains between two consecutive times. Then all static and kinematic variables are referred to the last configuration and we transform the system of equations (Eq. (7) and Eq. (8)) to get gradients and integrals written on the geometry of the previous time step.

Indeed, between t and t', the gradient of the skeleton's transform writes:

$$\underline{\underline{G}}_{tt'} = \frac{\partial\, {}^{t'}\underline{x}}{\partial\, {}^{t}\underline{x}} = \underline{\underline{1}} + \frac{\partial \underline{\mathcal{U}}}{\partial\, {}^{t}\underline{x}} = \underline{\underline{1}} + {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}) \tag{9}$$

so its inverse is approximated to the second order:

$$\underline{\underline{G}}_{tt'}^{-1} = \underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \tag{10}$$

From there, we write gradients and integrals on the geometry of time t:

$${}^{t'}\underline{\underline{\nabla}}(\ ) = {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\ ) \cdot \underline{\underline{G}}_{tt'}^{-1} \tag{11}$$

$$d\Omega_{t'} = det(\underline{\underline{G}}_{tt'})\, d\Omega_t = (1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))\, d\Omega_t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \tag{12}$$

$$\begin{aligned} {}^{t'}\underline{T}^{d}\, dS_{t'} &= -\,{}^{t'}p\underline{\underline{1}} \cdot \underline{dS}_{t'} \\ &= -\,{}^{t'}p det(\underline{\underline{G}}_{tt'}) \underline{\underline{G}}_{tt'}^{-T} \cdot \underline{dS}_t \\ &\simeq -\,{}^{t'}p(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))(\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}^{T}(\underline{\mathcal{U}})) \cdot \underline{dS}_t \\ &\simeq -\,{}^{t'}p(\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}^{T}(\underline{\mathcal{U}}) + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}})\underline{\underline{1}}) \cdot \underline{dS}_t \end{aligned} \tag{13}$$

So that the weak formulation (Eq. (7) and Eq. (8)) becomes Eq. (14) and Eq. (16), respectively noted Eq. (15) and Eq. (17).

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega_t} {}^{t'}\underline{\underline{\sigma}} : {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\mathcal{U}}}) \cdot \left(\underline{\underline{1}} + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}})\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}})\right) d\Omega_t \\ &- \int_{\Omega_t} {}^{t'}\rho \underline{g} \cdot \hat{\underline{\mathcal{U}}}(1 + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))\, d\Omega_t \\ &+ \int_{\Gamma_t^T} {}^{t'}p\hat{\underline{\mathcal{U}}} \cdot (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}^{T}(\underline{\mathcal{U}}) + \ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}})\underline{\underline{1}}) \cdot \underline{dS}_t \qquad = 0 \end{aligned} \tag{14}$$

$$\mathcal{G}_M = 0 \tag{15}$$

$$\begin{aligned} &- \int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}} \frac{\Delta\phi}{J_{0t}}\, d\Omega_t \\ &+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}\hat{\mathcal{P}} \cdot \ {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot (-{}^{t}\underline{\nabla}\, {}^{t'}p + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_t \\ &- \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}) \cdot \ {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot (-{}^{t}\underline{\nabla}\, {}^{t'}p + \rho^f \underline{g})\, d\Omega_t \\ &+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}\hat{\mathcal{P}} \cdot \ {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot ({}^{t}\underline{\nabla}\, {}^{t'}p \cdot {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}))\, d\Omega_t \\ &+ \int_{\Omega_t} \Delta t\, {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}\hat{\mathcal{P}} \cdot \ {}^{t'}\underline{\underline{\mathcal{K}}} \cdot (-{}^{t}\underline{\nabla}\, {}^{t'}p + \rho^f \underline{g})\, tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}})\, d\Omega_t \\ &- \int_{\Gamma_t^w} \Delta t \frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^f}\, {}^{t'}w^d \left(1 + tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}) - {}^{t}\underline{n} \cdot {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}}) \cdot {}^{t}\underline{n}\right) dS_t = 0 \end{aligned} \tag{16}$$

$$\mathcal{G}_F = 0 \tag{17}$$

A similar work has already been done [1] but with different approximations: they chose $dS_{t'} = dS_t$ and neglected some 1st order terms. Let us remark that neglecting the transform of the surface does not affect Eq. (16) here since all prescribed flows are null (w^d=0).

2.2. Choice of a tangent method

This is an iterative method which gives an approximated solution of a system G(X)=0. To do so, we compute the root of the tangent of G at a candidate solution X^i. This root will be the next candidate X^{i+1}. This means that at each iteration, we solve: $J(X^i)\,\delta X = -G(X^i)$ where J is the Jacobian of G and $\delta X = X^{i+1} - X^i$. With this method, G determines the target of the convergence and J the speed of the convergence. As a result, we could use $J(X^0)$ instead of $J(X^i)$ and still get the same result, but with a much slower computation.

In our case, J is made of J_F and J_M built respectively from Eq. (1) and Eq. (2). Since the characteristics of the geomaterial are highly dependant on the strain and pressure, we need to compute their derivatives too (see appendix 2).

As seen in the global algorithm (see Fig. 2), the computation of $G(X^i)$ and $J(X^i)$ takes place at iteration *i* after the plastic projection and before the new global system resolution. So ε^{Pi} and σ^i are known at this step.

2.2.1. Computation of G(X^i)

All quantities evaluated at time t' in Eq. (14) and (16) must be evaluated at best at iteration i : σ^i, K^i, ρ^i and $\Delta\phi$. K^i is deduced from φ^i through a hydraulic upscaling law – we use the Kozeny-Carman formula as in [8]. Since σ^i is the result of the plastic projection, only ρ^i and $\Delta\phi$ remain to be computed to write $G(X^i)$ explicitly (see appendix 3).

2.2.2. Computation of J(X^i)

We need to express $d\sigma$, $d\rho$, $d\phi$ and $d\varphi$ as linear combinations of derivatives of the variables: $d\varepsilon$, $d\omega$ and dP. First, we write them as linear combinations of $d\varepsilon$, $d\omega$, dP and $d\varepsilon^P$, then we express $d\varepsilon^P$ as linear

combination of dε, dω and dP (see appendix A4). The final explicit formulation of $J(X^i)$ is not detailed here.

A key assumption used for those computations is that K, B, M^{-1} and C depend only on the porosity. As a result, we have:

$$d\mathbb{C} = \frac{\partial \mathbb{C}}{\partial \varphi} d\varphi \tag{18}$$

$$d\underline{\underline{B}} = \frac{\partial \underline{\underline{B}}}{\partial \varphi} d\varphi \tag{19}$$

$$dM^{-1} = \frac{\partial M^{-1}}{\partial \varphi} d\varphi \tag{20}$$

$$d\underline{\underline{K}} = \frac{\partial \underline{\underline{K}}}{\partial \varphi} d\varphi \tag{21}$$

2.3. New evaluation of the porosity

The variation of porosity is evaluated using the assumptions that the solid part is plastically incompressible and that the elastic strain is infinitesimal (which allows to use Biot's law). Details of the process is given in appendix A1.2.

At the end, we get the variation of porosity as a linear combination of variations of total strain, plastic strain, pressure, Biot's modulus and Biot's tensor, as in Eq. (46).

2.4. Specific solution for open mesh

Each volume of the mesh carries a constant quantity of solid rock (and a variable quantity of fluid mass). So sedimentation or erosion is simulated by adding or withdrawing mesh element volumes at or from the top of the mesh.

As seen in Fig. 2, this change of mesh is done at the beginning of each time increment (if prescribed by the geological scenario).

The treatment of a finite element method is greatly facilitated by the call of the GetFEM++ library (italic words in the following are GetFEM++ objects) [9]. This library helps for instance with the assembly of matrices and the computation of integrals. However, it is not designed to deal with open mesh so specific operations need to be done:

- initialize data for new volumes of the mesh
- adapt boundary conditions
- ensure a safe access to data after remeshing.

2.4.1. Access to data after remeshing

The main difficulty comes from the fact that, in GetFEM++, all the data are stored in a *model* which is linked with the mesh. When the number of nodes of the *model* mesh is modified, *model* data are jeopardized.

Each part of the mesh is tagged, whether it will be eroded (Ωe), sedimented (Ωs) or remain (Ωr). So the new total volume would be: $\Omega^{NEW}=\Omega r+\Omega s$ and the old one was: $\Omega^{OLD}=\Omega r+\Omega e$.

First, we create a new mesh (independent from the *model*) and the matching *mesh_fems*. Then we create data vectors on those new *mesh_fems* using tags:

- on Ωr, data are interpolated from the *model* data
- on Ωs, data are initialized (see section 3.2.2.)

After that, all the data which needed to be saved are stored in the new vectors. So we can modify the *model* safely and replace the *model* mesh, *model mesh_fems* and *model* data vectors by the new ones.

This is a safe but costly process since it takes some time and memory to copy the mesh and the data vectors.

2.4.2. Data initialization

The vertical stress of a newly sedimented volume is initialized as hydrostatic and the lateral one is null. Other data are initialized accordingly to the considered geological scenario.

2.4.3. Update of boundary conditions

Since the distance between the basement and the sea level is assumed to remain constant in our current test problem, the hydrostatic profile on top of the mesh is updated, showing the evolution of the accommodation zone. Other boundary conditions are prescribed by the geological scenario.

2.5. Special time subdivisions

Since we use an updated Lagrangian scheme, time increments need to be small enough. If the sedimentation is very fast relatively to the fluid velocity (which depends on permeability), the strain induced by the material deposit is too large to be done in one increment of time. That is why the user can subdivide in time the sedimentation steps.

In that case, the density of the newly sedimented mesh elements is multiplied by a load parameter during the intermediate steps. This way, in the new mesh elements, the weight of the material is progressively activated whereas their whole volume is taken into account to solve the mechanical problem.

To help at evaluating if the sedimentation is fast relatively to the fluid velocity, we compare their respective characteristic time. While the characteristic time of sedimentation (t_s) is a parameter piloted by the user, the characteristic speed of diffusion (t_d) needs to be computed:

$$t_d = \frac{3H^2}{tr(\underline{\underline{K}})}\left(M^{-1} + \frac{b^2}{\lambda + 2\mu}\right) \tag{22}$$

where λ and μ are Lamé coefficients and H is the typical height deposit at each sedimentation step.

To facilitate the interpretation, an adimensional coefficient (r) is defined such that it is 1 when drained and 0 when plugged:

$$r = \frac{1}{1 + \frac{t_d}{t_s}} \tag{23}$$

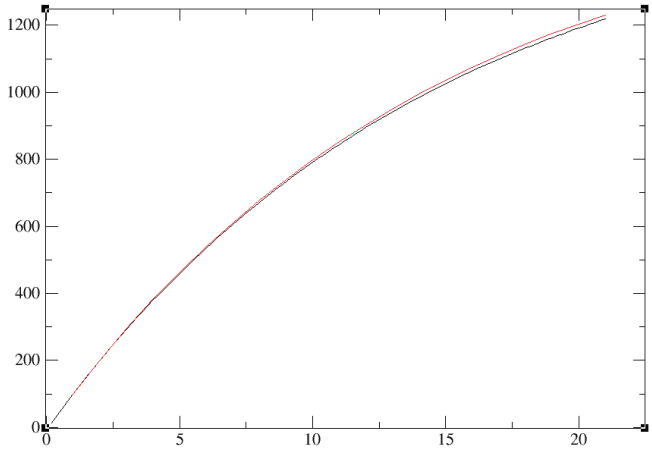
This indicator gives an idea of the participation of sedimentation in the generation of overpressures.

3. RESULTS

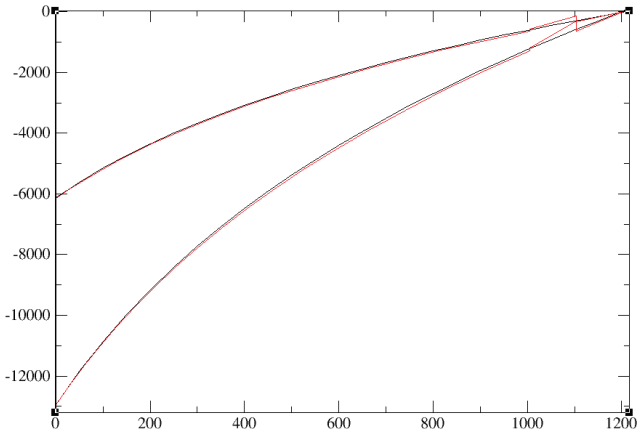
3.1. Validation tests

First, this simulation code has been tested and compared to the analytical solution given for an elastic porous rock in undrained conditions ([10]): numerical results fit the analytical solution to the numerical precision.

Then the simulation of a poro-elasto-plastic rock column in drained conditions has been compared to the analytical solution given by [11]. Using the same set of parameters, numerical results fit the analytical solution to a 1% precision almost everywhere. Here is a plot of the height (in m) of the sedimented column as a function of time (in My) – black line is the analytical solution, red line is the numerical result:



Here is a plot of the horizontal and lateral stresses as a function of depth in the rock column made of 2000 meters of uncompacted sediments (20 My simulation):



Let us note that stresses are badly computed on the mesh element at a depth between 100 and 200 m. In this test case, the plasticity is activated in this element (due to the choice of parameters). A numerical bug may remain such that the code is enable to treat correctly a mesh element subjected partially to an elastic strain and partially to a plastic strain.

3.2. Next runs

Future runs will compare the results of this simulation tool with other numerical results for basins submitted to tectonics.

A various range of runs will be done as a special care has been taken so that some modeling choices can be parametrized by the user without compiling the code again. Several options are available for many modelling choices: elasticity homogenization scheme (constant or Hashin-Strickman), plastic criterion (linear cap model or standard modified Cam-Clay), hardening law (constant hardening modulus or relationship between the volume plastic strain and the consolidation pressure), hydraulic homogenization scheme (constant or Kozeny-Carman).

The structure of the code also allows to easily implement some new options for those categories. In particular, a new hardening law could help at giving a better simulation of the rock behavior. Indeed, the limit of the current hardening law is that we cannot get a high decrease of the porosity at the beginning of the burial without using a soft material.

CONCLUSION

The poro-mechanical approach to improve porosity and effective stress calculation in a mixed displacement pressure numerical solver raises several difficulties: non linear behavior demand to build an adapted resolution algorithm; large strains demand not to neglect first order terms; open mesh demands specific implementation cares. Now that all this is successfully managed, our simulation code is able to find back reference results in poro-plasticity [11].

The code is also designed to simulate sedimentation, fluid transfer and tectonics effects at competitive time scales. In this case, we expect to show that the chronology is decisive and phenomena cannot be neglected compared to others.

A tangent formulation has been written to shorten the computation time. It should be implemented and tested soon. Next steps will be the implementation of a new hardening law based on a micromechanics reasoning and the treatment of a viscous behavior modeling pressure-solution as in deeper basins.

REFERENCES

1. Bernaud, D., V. Deudé, L. Dormieux, S. Maghous and D.P. Schmitt. 2002. Evolution of elastic properties in finite poroplasticity and finite element analysis. *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech*. 26:845-871.
2. Schneider, F., J.-L. Potdevin, S. Wolf and I. Faille. 1996. Mechanical and chemical compaction model for sedimentary basin simulators. *Tectonophysics*. 263:307-317.
3. Athy, L.F.. 1930. Density, porosity, and compaction of sedimentary rocks. *AAPG Bulletin*. 14:1-22.
4. Giles, M.R., 1997. Diagenesis: a Quantitative Perspective. *Kluwer Academic Publishers*, 526 pp
5. Simo, J.C. and T.J.R. Hughes. 1998. *Computational Inelasticity*. Springer Verlag. 113-153.
6. Sudret, B.. 1999. Modélisation multiphasique des ouvrages renforcés par inclusions, *ENPC*.
7. Bourgeois, E., P. de Buhan and L. Dormieux. 1995. Formulation d'une loi élastoplastique pour un milieu poreux saturé en transformation finie. *C. R. Acad. Sci. Paris*. 321: 175-182.
8. Bernaud, D., L. Dormieux and S. Maghous. 2006. A constitutive and numerical model for mechanical compaction in sedimentary basins. *Computers and Geotechnics*. 33:316-329.
9. Renard, Y. and J. Pommier. 2009. Short User Documentation. http://download.gna.org/getfem/html/homepage/.
10. Dormieux, L., D. Kondo and F.-J. Ulm, 2006, Microporomechanics, *Wiley*.
11. Deudé, V., L. Dormieux, S. Maghous, J.-F. Barthélémy and D. Bernaud, 2004. Compaction process in sedimentary basins: the role of stiffness increase and hardening induced by large plastic strains. *Int. J. Nuler. Anal. Meth. Geomech*. 28:1279-1303.

APPENDIX 1 : TRIAL STRAIN COMPUTATION

A1.1. Writing of σ^{*i}

Starting from the poro-elasto-plastic constitutive law (Eq. (3)), we compute the Jauman derivative of stress:

$$\dot{\underline{\underline{\sigma}}} - \underline{\underline{\Omega}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{\Omega}} = \dot{\mathbb{C}} : \mathbb{C}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}'^{e} + \mathbb{C} : (\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^{P}) - \dot{p}\underline{\underline{B}} - p\dot{\underline{\underline{B}}} \quad (24)$$

where we note: $$\underline{\underline{\sigma}}'^{e} = \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}^{e} \quad (25)$$

We get the increment of stress with an explicit scheme:

$$\Delta\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\omega}} \cdot {}^{t}\underline{\underline{\sigma}} - {}^{t}\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{\omega}} + \Delta\mathbb{C} : {}^{t}\mathbb{C}^{-1} : {}^{t}\underline{\underline{\sigma}}'^{e} + {}^{t}\mathbb{C} : (\underline{\underline{\mathcal{E}}} - \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{P}) - \mathcal{P}^{t}\underline{\underline{B}} - {}^{t}p\Delta\underline{\underline{B}} \quad (26)$$

with $$\underline{\underline{\omega}} = \{{}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\mathcal{U}})\}_{a} \quad (27)$$

At this state, i.e. before entering the plastic algorithm, we assume that there is no plastic strain between times t and t'. The trial stress at iteration i is then:

$$\underline{\underline{\sigma}}^{*i} = {}^{t}\underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{\omega}} \cdot {}^{t}\underline{\underline{\sigma}} - {}^{t}\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{\omega}} + \Delta\mathbb{C} : {}^{t}\mathbb{C}^{-1} : {}^{t}\underline{\underline{\sigma}}'^{e} + {}^{t}\mathbb{C} : \underline{\underline{\mathcal{E}}} - \mathcal{P}^{t}\underline{\underline{B}} - {}^{t}p\Delta\underline{\underline{B}} \quad (28)$$

All the quantities which are linear combination of the variables (ω, ε, P) are evaluated based on the variables at iteration i-1.

So the remaining terms to express are ΔC and ΔB. C^i and B^i are deduced from φ^i through a homogenization scheme.

A1.2. Estimation of φ^i

Let us define a virtual relaxed state and its associated volume Ω_R between Ω_t and $\Omega_{t'}$ such that there exist a purely plastic transformation from Ω_t to Ω_R and a purely elastic transformation from Ω_R to $\Omega_{t'}$. Then we have:

$$\frac{d\Omega_t^f - d\Omega_0^f}{d\Omega_0} = \frac{d\Omega_R^f - d\Omega_0^f}{d\Omega_0} + \frac{d\Omega_R}{d\Omega_0}\frac{d\Omega_t^f - d\Omega_R^f}{d\Omega_R} \quad (29)$$

$${}^{t}\phi = {}^{t}\phi^{P} + J_{0t}^{Pt}\phi^{e} \quad (30)$$

$$\dot{\phi} = \dot{\phi}^{P} + \dot{J}^{Pt}\phi^{e} + J_{0t}^{P}\dot{\phi}^{e} \quad (31)$$

Assumption that the solid is plastically incompressible yields Eq. (32) from which we get Eq. (33). And since the elastic strain is infinitesimal, a first order approximation on Eq. (31) gives Eq.(34).

$$J_{0t'}^{P} - {}^{t'}\phi^{P} = 1 - {}^{t}\phi \quad (32)$$

$$j^{P} = \dot{\phi}^{P} \quad (33)$$

$$\dot{\phi} \simeq \dot{\phi}^{P} + J_{0t}^{P}\dot{\phi}^{e} \quad (34)$$

From Eq. (35), we get Eq. (36). Assuming that the strain is mainly plastic (Eq. (37)) and using Eq. (36), Eq. (34) becomes Eq. (38).

$$j^{P}\,{}^{t'}J^{P\,-1} = tr(\underline{\underline{d}}^{P}) \quad (35)$$

$$\dot{\phi}^{P} = j^{P} = J_{0t}^{P}tr(\underline{\underline{d}}^{P}) \quad (36)$$

$$J_{0t} \simeq J_{0t}^{P} \tag{37}$$

$$\frac{\dot{\phi}}{J_{0t}} \simeq tr(\underline{\underline{d}}^{P}) + \dot{\phi}^{e} \tag{38}$$

Assuming an infinitesimal elastic strain, we can use Biot's law:

$${}^{t}\phi^{e} = {}^{t}\underline{\underline{B}} : {}^{t}\underline{\underline{\varepsilon}}^{e} + \frac{{}^{t}p}{{}^{t}M} \tag{39}$$

Time derivation yields:

$$\dot{\phi}^{e} = \dot{\underline{\underline{B}}} : {}^{t}\underline{\underline{\varepsilon}}^{e} + {}^{t}\underline{\underline{B}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{e} + \frac{\dot{p}}{{}^{t}M} + {}^{t}p\,\overbrace{\frac{1}{M}}^{\cdot} \tag{40}$$

Since Biot's tensor is isotropic, let us remark that:

$${}^{t}\underline{\underline{B}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{e} = {}^{t}\underline{\underline{B}} : (\underline{\underline{d}} - \underline{\underline{d}}^{P}) \tag{41}$$

Putting Eq. (41) back in Eq. (40), we have:

$$\frac{\dot{\phi}}{J_{0t}} = \dot{\underline{\underline{B}}} : {}^{t}\underline{\underline{\varepsilon}}^{e} + {}^{t}\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{d}} + (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{d}}^{P} + \frac{\dot{p}}{M} + {}^{t}p\,\overbrace{\frac{1}{M}}^{\cdot} \tag{42}$$

Assuming Eq. (43), we can write Eq. (44).

$$\Delta\phi \simeq \dot{\phi}\Delta t \tag{43}$$

$$\frac{\Delta\phi}{J_{0t}} = \Delta\underline{\underline{B}} : {}^{t}\underline{\underline{\varepsilon}}^{e} + {}^{t}\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{P} + \frac{\mathcal{P}}{{}^{t}M} + {}^{t}p\Delta(M^{-1}) \tag{44}$$

Starting back from the definition of the Eulerian porosity, we have:

$$\varphi^{i} = \frac{\Delta^{i}\phi + {}^{t}\phi}{J_{0t}}\frac{J_{0t}}{J^{i}} = \left(\frac{\Delta^{i}\phi}{J_{0t}} + {}^{t}\varphi\right)(1 + tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{i}))^{-1} \tag{45}$$

Using Eq. (44), we obtain finally:

$$\varphi^{i} = \left(\Delta\underline{\underline{B}} : {}^{t}\underline{\underline{\varepsilon}}^{e} + {}^{t}\underline{\underline{B}} : \underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{B}}) : \underline{\underline{\mathcal{E}}}^{P} + \frac{\mathcal{P}}{{}^{t}M} + {}^{t}p\Delta(M^{-1}) + {}^{t}\varphi\right)(1 + tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{i}))^{-1} \tag{46}$$

APPENDIX 2 : JACOBIAN COMPUTATION

Let us note Eq. (47). Then deriving Eq. (15) gives Eq. (48) and deriving Eq. (17) gives Eq.(49).

$$\mathrm{d}\cdot = \frac{\partial\cdot}{\partial X}\delta X \tag{47}$$

$$\begin{aligned}
&\mathcal{J}_{M}(X^{i})\delta X = \\
&\int_{\Omega_t} \mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} : {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\underline{\mathcal{U}}}}) \cdot \left(\underline{\underline{1}} + tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{i})\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\underline{\underline{\mathcal{U}}}^{i})\right) d\Omega_t \\
&+ \int_{\Omega_t} \underline{\underline{\sigma}}^{i} : {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\hat{\underline{\underline{\mathcal{U}}}}) \cdot \left(tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}})\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{U}}})\right) d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \mathrm{d}\rho\underline{g} \cdot \hat{\underline{\underline{\mathcal{U}}}}(1 + tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{i}))\, d\Omega_t \\
&- \int_{\Omega_t} \rho^{i}\underline{g} \cdot \hat{\underline{\underline{\mathcal{U}}}}\, tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}})\, d\Omega_t \\
&+ \int_{\Gamma_t^{T}} \mathrm{d}\mathcal{P}\hat{\underline{\underline{\mathcal{U}}}} \cdot (\underline{\underline{1}} - {}^{t}\underline{\underline{\nabla}}^{T}(\underline{\underline{\mathcal{U}}}^{i}) + tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{i})\underline{\underline{1}}) \cdot \underline{dS}_t \\
&+ \int_{\Gamma_t^{T}} p^{i}\hat{\underline{\underline{\mathcal{U}}}} \cdot (-{}^{t}\underline{\underline{\nabla}}^{T}(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{U}}}) + tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}})\underline{\underline{1}}) \cdot \underline{dS}_t
\end{aligned} \tag{48}$$

$$\begin{aligned}
&\mathcal{J}_{F}(X^{i})\delta X = \\
&-\int_{\Omega_t} \hat{\mathcal{P}}\frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}}\, d\Omega_t \\
&+\int_{\Omega_t} \Delta t\,{}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \frac{\partial\underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial\varphi}\mathrm{d}\varphi \cdot (-{}^{t}\underline{\nabla}p^{i} + \rho^{f}\underline{g})\, d\Omega_t \\
&-\int_{\Omega_t} \Delta t\,{}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i} \cdot {}^{t}\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P}\, d\Omega_t \\
&-\int_{\Omega_t} \Delta t\,{}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^{t}\underline{\nabla}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}) \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i} \cdot (-{}^{t}\underline{\nabla}p^{i} + \rho^{f}\underline{g})\, d\Omega_t \\
&-\int_{\Omega_t} \Delta t\,{}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^{t}\underline{\nabla}(\underline{\mathcal{U}}^{i}) \cdot \frac{\partial\underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial\varphi}\mathrm{d}\varphi \cdot (-{}^{t}\underline{\nabla}p^{i} + \rho^{f}\underline{g})\, d\Omega_t \\
&+\int_{\Omega_t} \Delta t\,{}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot {}^{t}\underline{\nabla}(\underline{\mathcal{U}}^{i}) \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i} \cdot {}^{t}\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P}\, d\Omega_t \\
&+\int_{\Omega_t} \Delta t\,{}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \frac{\partial\underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial\varphi}\mathrm{d}\varphi \cdot ({}^{t}\underline{\nabla}p^{i} \cdot {}^{t}\underline{\nabla}(\underline{\mathcal{U}}^{i}))\, d\Omega_t \\
&+\int_{\Omega_t} \Delta t\,{}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i} \cdot ({}^{t}\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P} \cdot {}^{t}\underline{\nabla}(\underline{\mathcal{U}}^{i}))\, d\Omega_t \\
&+\int_{\Omega_t} \Delta t\,{}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i} \cdot ({}^{t}\underline{\nabla}p^{i} \cdot {}^{t}\underline{\nabla}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}))\, d\Omega_t \\
&+\int_{\Omega_t} \Delta t\,{}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \frac{\partial\underline{\underline{\mathcal{K}}}}{\partial\varphi}\mathrm{d}\varphi \cdot (-{}^{t}\underline{\nabla}p^{i} + \rho^{f}\underline{g})\, tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{i})\, d\Omega_t \\
&-\int_{\Omega_t} \Delta t\,{}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i} \cdot {}^{t}\underline{\nabla}\mathrm{d}\mathcal{P}\, tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{i})\, d\Omega_t \\
&+\int_{\Omega_t} \Delta t\,{}^{t}\underline{\nabla}\hat{\mathcal{P}} \cdot \underline{\underline{\mathcal{K}}}^{i} \cdot (-{}^{t}\underline{\nabla}p^{i} + \rho^{f}\underline{g})\, tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}})\, d\Omega_t \\
&-\int_{\Gamma_t^{w}} \Delta t\frac{\hat{\mathcal{P}}}{\rho^{f}}\,{}^{t'}w^{d}\left(tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}) - {}^{t}\underline{n} \cdot {}^{t}\underline{\nabla}(\mathrm{d}\underline{\mathcal{U}}) \cdot {}^{t}\underline{n}\right) dS_t
\end{aligned} \tag{49}$$

APPENDIX 3 : COMPUTATION OF G(X^{i})

In this appendix, we compute ρ^{i} and $\Delta\phi$ which are needed to write G(X^{i}) explicitly.

A3.1. Computation of ρ^{i}

Since the mass variation of the r.v.e. is only due to mass variation of the fluid, we can write:

$$\rho^{i}\, d\Omega_{i} = {}^{t}\rho\, d\Omega_{t} + \Delta m\, d\Omega_{0} \tag{50}$$

where m is a Lagrangian quantity with respect to the reference configuration. Since fluid is assumed to be incompressible, we have:

$$\Delta m = \rho^f \Delta\phi \tag{51}$$

Then, dividing Eq. (50) by $d\Omega_i$, we get:

$$\begin{aligned}\rho^i &= {}^t\rho\frac{J_{0t}}{J_{0i}} + \rho^f\frac{\Delta\phi}{J_{0i}} \\ &= (1+\ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))^{-1}\left({}^t\rho - \rho^f{}^t\varphi\right) + \rho^f\varphi^i\end{aligned} \tag{52}$$

A3.2. Increment of Lagrangian porosity

Then B^i and M^{-1i} are deduced from φ^i through a homogenization scheme and we can write completely $G(X^i)$.

APPENDIX 4 : DERIVATIVE QUANTITIES

A4.1. Derivative of Eulerian porosity

Definition of Eulerian porosity (Eq. (53)) gives Eq. (54).

$$\varphi = \frac{\phi}{J} \tag{53}$$

$$\mathrm{d}\varphi = \frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} - \frac{{}^t\phi}{J_{0t}^2}\mathrm{d}J = \frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} - {}^t\varphi\frac{\mathrm{d}J}{J_{0t}} \tag{54}$$

$J_{0t'}$ is then evaluated with an explicit scheme in Eq.(55) from which we compute dJ in Eq. (56).

$$J_{0t'} = (1+\ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))J_{0t} \tag{55}$$

$$\mathrm{d}J = \ tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}) \tag{56}$$

Input of Eq. (56) in Eq. (54) gives Eq. (57).

$$\mathrm{d}\varphi = \frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} - \frac{{}^t\varphi}{J_{0t}}\ tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}) \tag{57}$$

A4.2. Derivative of Lagrangian porosity

Eq. (42) gives Eq. (58) where we introduce β (Eq. (59)).

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} = {}^t\beta\mathrm{d}\varphi + {}^t\underline{\underline{B}} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{{}^tM} \tag{58}$$

$$\beta = \frac{\partial\underline{\underline{B}}}{\partial\varphi} : {}^t\underline{\underline{\varepsilon}}^e + {}^tp\frac{\partial M^{-1}}{\partial\varphi} \tag{59}$$

Then using Eq. (57) we get:

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\phi}{J_{0t}} &= \left(1 - {}^t\beta(1+\ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))^{-1}\right)^{-1} \\ &\left[\left({}^t\underline{\underline{B}} - {}^t\beta\,{}^{t'}\varphi\frac{1}{1+\ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}})}\underline{\underline{1}}\right) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{{}^tM}\right]\end{aligned} \tag{60}$$

Then using Eq. (60) in Eq. (57), we finally get:

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\varphi &= \left(1+\ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}) - {}^t\beta\right)^{-1} \\ &\left[\left({}^t\underline{\underline{B}} - {}^{t'}\varphi\underline{\underline{1}}\right) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{{}^tM}\right]\end{aligned} \tag{61}$$

A4.3. Derivative of stress

Multiplying the Jauman derivative of stress (Eq. (24)) by Δt gives:

$$\begin{aligned}\dot{\underline{\underline{\sigma}}}\Delta t &= (\underline{\underline{\Omega}}\Delta t)\cdot\underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\sigma}}\cdot(\underline{\underline{\Omega}}\Delta t) + (\dot{\mathbb{C}}\Delta t) : \mathbb{C}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}'^e \\ &+ \mathbb{C} : (\underline{\underline{d}}\Delta t - \underline{\underline{d}}^P\Delta t)\ - (\dot{p}\Delta t)\underline{\underline{B}} - p(\dot{\underline{\underline{B}}}\Delta t)\end{aligned} \tag{62}$$

Approximating with Eq. (63), we get Eq. (64).

$$\delta X \simeq \frac{\partial X}{\partial t}\Delta t \tag{63}$$

$$\underline{\underline{\Omega}}\Delta t = \Delta_t^{t'}\left\{\frac{\partial v}{\partial\underline{x}}\right\}_a\Delta t = \Delta_t^{t'}\left\{\frac{\partial}{\partial\underline{x}}\left(\frac{\partial u}{\partial t}\Delta t\right)\right\}_a \simeq \left\{\frac{\partial\delta\underline{u}}{\partial\underline{x}}\right\}_a \tag{64}$$

We can also write for σ (similarly for C, ε, ε^P, p and B):

$$\dot{\underline{\underline{\sigma}}}\Delta t = \frac{\partial\underline{\underline{\sigma}}}{\partial t}\Delta t = \frac{\partial\underline{\underline{\sigma}}}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial t}\Delta t \simeq \frac{\partial\underline{\underline{\sigma}}}{\partial X}\delta X = \mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} \tag{65}$$

Eq. (62) yields Eq. (66) using $d\omega$ introduced in Eq. (67).

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} &= \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}\cdot{}^t\underline{\underline{\sigma}} - {}^t\underline{\underline{\sigma}}\cdot\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \mathrm{d}\mathbb{C} : {}^t\mathbb{C}^{-1} : {}^t\underline{\underline{\sigma}}'^e \\ &+ {}^t\mathbb{C} : (\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} - \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P) - \mathrm{d}p^t\underline{\underline{B}} - {}^tp\mathrm{d}\underline{\underline{B}}\end{aligned} \tag{66}$$

$$\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} = \left\{\frac{\partial\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{U}}}}{\partial\underline{x}}\right\}_a \tag{67}$$

Assumptions given in Eq. (18) and Eq. (19) yields:

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} &= \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}\cdot{}^t\underline{\underline{\sigma}} - {}^t\underline{\underline{\sigma}}\cdot\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + {}^t\underline{\underline{\gamma}}\mathrm{d}\varphi \\ &+ {}^t\mathbb{C} : (\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} - \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P) - \mathrm{d}p^t\underline{\underline{B}}\end{aligned} \tag{68}$$

where we note:

$${}^t\underline{\underline{\gamma}} = \frac{\partial\mathbb{C}}{\partial\varphi} : {}^t\mathbb{C}^{-1} : {}^t\underline{\underline{\sigma}}'^e - {}^tp\frac{\partial\underline{\underline{B}}}{\partial\varphi} \tag{69}$$

Using Eq. (61), we get the final expression:

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} &= \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}\cdot{}^t\underline{\underline{\sigma}} - {}^t\underline{\underline{\sigma}}\cdot\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + {}^t\mathbb{C} : (\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} - \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P) - \mathrm{d}p^t\underline{\underline{B}} \\ &+ {}^t\underline{\underline{\gamma}}\left(1+\ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}) - {}^t\beta\right)^{-1}\left[\left({}^t\underline{\underline{B}} - {}^t\varphi\underline{\underline{1}}\right) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}\right. \\ &\left. + (\underline{\underline{1}} - {}^t\underline{\underline{B}}) : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{{}^tM}\right]\end{aligned} \tag{70}$$

A4.4. Derivative of density

Deriving Eq. (52) we get:

$$\mathrm{d}\rho = -\ tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}})(1+\ tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))^{-2}\left({}^t\rho - \rho^f{}^t\varphi\right) + \rho^f\mathrm{d}\varphi \tag{71}$$

So using Eq. (61) we have:

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\rho &= -tr(\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}})(1+tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}}))^{-2}\left({}^{t}\rho-\rho^{f}{}^{t}\varphi\right) \\ &\quad +\rho^{f}\left(1+tr(\underline{\underline{\mathcal{E}}})-{}^{t}\beta\right)^{-1}\Big[\left({}^{t}\underline{\underline{B}}-{}^{t'}\varphi\underline{\underline{1}}\right):\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} \\ &\quad +(\underline{\underline{1}}-{}^{t}\underline{\underline{B}}):\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{P}+\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{{}^{t}M}\Big] \end{aligned} \tag{72}$$

A4.5. Derivative of plastic stress

In this section, we write $d\varepsilon^P$ as a linear combination of $d\varepsilon$, $d\omega$ and dP.

By definition, plastic strain writes:

$$\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{P}=\sum_{j\in C_a}\Delta\lambda_j\frac{\partial g_j}{\partial\underline{\underline{\sigma}}}\left({}^{t'}\underline{\underline{\sigma}}+{}^{t'}p\underline{\underline{1}},p_c\right) \tag{73}$$

Derivation yields:

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{P} &= \sum_{j\in C_a}\frac{\partial g_j}{\partial\underline{\underline{\sigma}}}\mathrm{d}\lambda_j+\sum_{j\in C_a}\Delta\lambda_j\frac{\partial^2 g_j}{\partial\underline{\underline{\sigma}}^2}:(\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}}+\mathrm{d}\mathcal{P}\underline{\underline{1}}) \\ &\quad +\sum_{j\in C_a}\Delta\lambda_j\frac{\partial^2 g_j}{\partial\underline{\underline{\sigma}}\partial p_c}\mathrm{d}p_c \end{aligned} \tag{74}$$

Assuming that p_c depends only on J^P, we get:

$$\mathrm{d}p_c = \frac{\partial p_c}{\partial J^P}{}^{t}J^P\underline{\underline{1}}:\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{P} \tag{75}$$

So we have:

$$\begin{aligned} &\left(\mathbb{I}-\frac{\partial p_c}{\partial J^P}{}^{t}J^P\sum_{j\in C_a}\Delta\lambda_j\frac{\partial^2 g_j}{\partial\underline{\underline{\sigma}}\partial p_c}\otimes\underline{\underline{1}}\right):\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{P} \\ &=\sum_{j\in C_a}\frac{\partial g_j}{\partial\underline{\underline{\sigma}}}\mathrm{d}\lambda_j+\sum_{j\in C_a}\Delta\lambda_j\frac{\partial^2 g_j}{\partial\underline{\underline{\sigma}}^2}:(\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}}+\mathrm{d}\mathcal{P}\underline{\underline{1}}) \end{aligned} \tag{76}$$

which gives:

$$\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{P}=\sum_{j\in C_a}\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j}\mathrm{d}\lambda_j+\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}:\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}}+\underline{\underline{A}}^{P}_{\mathcal{E}^P}\mathrm{d}\mathcal{P} \tag{77}$$

where some notations are introduced:

$$\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j}=\left(\mathbb{I}-\frac{\partial p_c}{\partial J^P}{}^{t}J^P\sum_{k\in C_a}\Delta\lambda_k\frac{\partial^2 g_k}{\partial\underline{\underline{\sigma}}\partial p_c}\otimes\underline{\underline{1}}\right)^{-1}:\frac{\partial g_j}{\partial\underline{\underline{\sigma}}} \tag{78}$$

$$\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}=\left(\mathbb{I}-\frac{\partial p_c}{\partial J^P}{}^{t}J^P\sum_{k\in C_a}\Delta\lambda_k\frac{\partial^2 g_k}{\partial\underline{\underline{\sigma}}\partial p_c}\otimes\underline{\underline{1}}\right)^{-1}:\sum_{j\in C_a}\Delta\lambda_j\frac{\partial^2 g_j}{\partial\underline{\underline{\sigma}}^2} \tag{79}$$

$$\underline{\underline{A}}^{P}_{\mathcal{E}^P}=\left(\mathbb{I}-\frac{\partial p_c}{\partial J^P}{}^{t}J^P\sum_{k\in C_a}\Delta\lambda_k\frac{\partial^2 g_k}{\partial\underline{\underline{\sigma}}\partial p_c}\otimes\underline{\underline{1}}\right)^{-1}:\sum_{j\in C_a}\Delta\lambda_j\frac{\partial^2 g_j}{\partial\underline{\underline{\sigma}}^2}:\underline{\underline{1}} \tag{80}$$

Now we write $d\sigma$ and $d\lambda$ as a linear combination of $d\varepsilon$, $d\omega$ and dP. Let us start with $d\sigma$.

Using Eq. (77) in Eq.(68), we get:

$$\begin{aligned} &\left(\mathbb{I}-\mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma}:\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\right)\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}} = \\ &\mathbb{A}^{\mathcal{E}}_{\sigma}:\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}+\left(\underline{\underline{A}}^{p}_{\sigma}+\mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma}:\underline{\underline{A}}^{P}_{\mathcal{E}^P}\right)\mathrm{d}p+\mathbb{A}^{\omega}_{\sigma}:\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} \\ &+\mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma}:\left(\sum_{j\in C_a}\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j}\mathrm{d}\lambda_j\right) \end{aligned} \tag{81}$$

We note:

$$\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}}=\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma}:\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}+\underline{\underline{B}}^{p}_{\sigma}\mathrm{d}p+\mathbb{B}^{\omega}_{\sigma}:\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}+\sum_{j\in C_a}\underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j}\mathrm{d}\lambda_j \tag{82}$$

$$\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma} = \left(\mathbb{I}-\mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma}:\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\right)^{-1}:\mathbb{A}^{\mathcal{E}}_{\sigma} \tag{83}$$

$$\underline{\underline{B}}^{p}_{\sigma} = \left(\mathbb{I}-\mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma}:\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\right)^{-1}:\left(\underline{\underline{A}}^{p}_{\sigma}+\mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma}:\underline{\underline{A}}^{P}_{\mathcal{E}^P}\right) \tag{84}$$

$$\mathbb{B}^{\omega}_{\sigma} = \left(\mathbb{I}-\mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma}:\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\right)^{-1}:\mathbb{A}^{\omega}_{\sigma} \tag{85}$$

$$\underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j} = \left(\mathbb{I}-\mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma}:\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}\right)^{-1}:\mathbb{A}^{\mathcal{E}^P}_{\sigma}:\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j} \tag{86}$$

Then we write $d\lambda$ as a linear combination of $d\varepsilon$, $d\omega$ and dP.

Since it is ensured for every active criteria f_i that:

$$f_i\left({}^{t'}\underline{\underline{\sigma}}+{}^{t'}p\underline{\underline{1}},p_c\right)=0 \tag{87}$$

we satisfy:

$$\frac{\partial f_i}{\partial\underline{\underline{\sigma}}}:\left(\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}}+\mathrm{d}\mathcal{P}\underline{\underline{1}}\right)+\frac{\partial f_i}{\partial p_c}\mathrm{d}p_c=0 \tag{88}$$

that is to say, using Eq. (75):

$$\frac{\partial f_i}{\partial\underline{\underline{\sigma}}}:\left(\mathrm{d}\underline{\underline{\sigma}}+\mathrm{d}\mathcal{P}\underline{\underline{1}}\right)+\frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^P}{}^{t}J^P\underline{\underline{1}}:\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^{P}=0 \tag{89}$$

So using Eq. (77) and Eq. (82) we get:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial f_i}{\partial\underline{\underline{\sigma}}}:\left(\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma}:\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}+\underline{\underline{B}}^{p}_{\sigma}\mathrm{d}p+\mathbb{B}^{\omega}_{\sigma}:\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}+\sum_{j\in C_a}\underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j}\mathrm{d}\lambda_j+\mathrm{d}\mathcal{P}\underline{\underline{1}}\right)+ \\ &\frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^P}{}^{t}J^P\underline{\underline{1}}:\Big(\sum_{j\in C_a}\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j}\mathrm{d}\lambda_j+\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}: \\ &\left(\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma}:\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}+\underline{\underline{B}}^{p}_{\sigma}\mathrm{d}p+\mathbb{B}^{\omega}_{\sigma}:\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}+\sum_{j\in C_a}\underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j}\mathrm{d}\lambda_j\right)+\underline{\underline{A}}^{P}_{\mathcal{E}^P}\mathrm{d}\mathcal{P}\Big)=0 \end{aligned} \tag{90}$$

We gather the terms in $d\lambda_j$ using A_λ defined in Eq. (92):

$$\begin{aligned} \sum_{j\in C_a}[A_\lambda]_{ij}\mathrm{d}\lambda_j &= -\frac{\partial f_i}{\partial\underline{\underline{\sigma}}}:\left(\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma}:\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}+(\underline{\underline{B}}^{p}_{\sigma}+\underline{\underline{1}})\mathrm{d}\mathcal{P}+\mathbb{B}^{\omega}_{\sigma}:\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}\right) \\ &\quad -\frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^P}{}^{t}J^P\underline{\underline{1}}:\Big(\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}:(\mathbb{B}^{\mathcal{E}}_{\sigma}:\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}+\mathbb{B}^{\omega}_{\sigma}:\mathrm{d}\underline{\underline{\omega}}) \\ &\quad +(\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}:\underline{\underline{B}}^{p}_{\sigma}+\underline{\underline{A}}^{P}_{\mathcal{E}^P})\mathrm{d}\mathcal{P}\Big) \end{aligned} \tag{91}$$

$$[A_\lambda]_{ij}=\frac{\partial f_i}{\partial\underline{\underline{\sigma}}}:\underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j}+\frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^P}{}^{t}J^P\underline{\underline{1}}:\left(\underline{\underline{A}}^{\lambda}_{\mathcal{E}^P j}+\mathbb{A}^{\sigma}_{\mathcal{E}^P}:\underline{\underline{B}}^{\lambda}_{\sigma j}\right) \tag{92}$$

$[A_\lambda]_{ij}$ is a scalar which can be seen as the element at row i and column j of a matrix $[A_\lambda]$. Let us define $[A_\lambda^{-1}]$ the inverse of this matrix. Then we can isolate $d\lambda_j$:

$$
\begin{aligned}
\mathrm{d}\lambda_j \;= & -\sum_{i\in C_a}[[A_\lambda^{-1}]_{ji}\Big[\\
& \Big(\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} : (\underline{\underline{B}}_\sigma^P + \underline{\underline{1}}) + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^P}{}^t J^P \underline{\underline{1}} : (\mathbb{A}_{\mathcal{E}P}^\sigma : \underline{\underline{B}}_\sigma^P + \underline{\underline{A}}_{\mathcal{E}P}^P)\Big)\mathrm{d}\mathcal{P} \\
& + \Big(\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^P}{}^t J^P \underline{\underline{1}} : \mathbb{A}_{\mathcal{E}P}^\sigma\Big) : (\mathbb{B}_\sigma^\mathcal{E} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \mathbb{B}_\sigma^\omega : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}})\Big]
\end{aligned}
\tag{93}
$$

So we have $\mathrm{d}\lambda_j$ as a linear combination of $\mathrm{d}\varepsilon$, $\mathrm{d}\omega$ and $\mathrm{d}P$:

$$
\mathrm{d}\lambda_j = \underline{\underline{A}}_{\lambda_j}^\mathcal{E} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \underline{\underline{A}}_{\lambda_j}^\omega : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + A_{\lambda_j}^P \mathrm{d}\mathcal{P} \tag{94}
$$

$$
\underline{\underline{A}}_{\lambda_j}^\mathcal{E} = -\sum_{i\in C_a}[A_\lambda^{-1}]_{ji}\Big(\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^P}{}^t J^P \underline{\underline{1}} : \mathbb{A}_{\mathcal{E}P}^\sigma\Big) : \mathbb{B}_\sigma^\mathcal{E} \tag{95}
$$

$$
\underline{\underline{A}}_{\lambda_j}^\omega = -\sum_{i\in C_a}[A_\lambda^{-1}]_{ji}\Big(\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^P}{}^t J^P \underline{\underline{1}} : \mathbb{A}_{\mathcal{E}P}^\sigma\Big) : \mathbb{B}_\sigma^\omega \tag{96}
$$

$$
\begin{aligned}
A_{\lambda_j}^P = -\sum_{i\in C_a}[A_\lambda^{-1}]_{ji}\Big(\frac{\partial f_i}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} : (\underline{\underline{B}}_\sigma^P + \underline{\underline{1}}) + \frac{\partial f_i}{\partial p_c}\frac{\partial p_c}{\partial J^P}{}^t J^P \underline{\underline{1}} : \\
(\mathbb{A}_{\mathcal{E}P}^\sigma : \underline{\underline{B}}_\sigma^P + \underline{\underline{A}}_{\mathcal{E}P}^P)\Big)
\end{aligned}
\tag{97}
$$

Finally, using Eq. (82) and Eq. (93) in Eq. (73), we can write $\mathrm{d}\varepsilon^P$ as a linear combination of $\mathrm{d}\varepsilon$, $\mathrm{d}\omega$ and $\mathrm{d}P$:

$$
\mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}}^P = \mathbb{B}_{\mathcal{E}P}^\mathcal{E} : \mathrm{d}\underline{\underline{\mathcal{E}}} + \mathbb{B}_{\mathcal{E}P}^\omega : \mathrm{d}\underline{\underline{\omega}} + \underline{\underline{B}}_{\mathcal{E}P}^P \mathrm{d}\mathcal{P} \tag{98}
$$

$$
\mathbb{B}_{\mathcal{E}P}^\mathcal{E} = \sum_{j\in C_a}(\underline{\underline{A}}_{\mathcal{E}P_j}^\lambda + \mathbb{A}_{\mathcal{E}P}^\sigma : \underline{\underline{B}}_{\sigma j}^\lambda) \otimes \underline{\underline{A}}_{\lambda_j}^\mathcal{E} + \mathbb{A}_{\mathcal{E}P}^\sigma : \mathbb{B}_\sigma^\mathcal{E} \tag{99}
$$

$$
\mathbb{B}_{\mathcal{E}P}^\omega = \sum_{j\in C_a}(\underline{\underline{A}}_{\mathcal{E}P_j}^\lambda + \mathbb{A}_{\mathcal{E}P}^\sigma : \underline{\underline{B}}_{\sigma j}^\lambda) \otimes \underline{\underline{A}}_{\lambda_j}^\omega + \mathbb{A}_{\mathcal{E}P}^\sigma : \mathbb{B}_\sigma^\omega \tag{100}
$$

$$
\underline{\underline{B}}_{\mathcal{E}P}^P = \sum_{j\in C_a}(\underline{\underline{A}}_{\mathcal{E}P_j}^\lambda + \mathbb{A}_{\mathcal{E}P}^\sigma : \underline{\underline{B}}_{\sigma j}^\lambda) A_{\lambda_j}^P + \underline{\underline{A}}_{\mathcal{E}P}^P + \mathbb{A}_{\mathcal{E}P}^\sigma : \underline{\underline{B}}_\sigma^P \tag{101}
$$

Bibliographie

Joanna M. Ajdukiewicz and Robert H. Lander. Sandstone reservoir quality prediction : The state of the art. *AAPG Bulletin*, 94(8) :1083–1091, 2010.

L F Athy. Density, porosity, and compaction of sedimentary rocks. *AAPG Bulletin*, 14(1) :1–24, 1930a.

L F Athy. Compaction and oil migration. *AAPG Bulletin*, 14(1) :25–35, 1930b.

Jean-Louis Auriault and E. Sanchez-Palencia. Etude du comportement macroscopique d'un milieu poreux saturé déformable. *Journal de Mécanique*, 4(16) :575–603, 1977.

W. Baldwin and C.O. Butler. Compaction curves. *AAPG Bulletin*, 69(4) :622 – 626, 1985.

R. G. C. Bathurst. Diagenetic fabrics in some British Dinantian limestones. . *Liverpool Manchester geol.*, 2 :11–36, 1958.

Denise Bernaud, Vincent Deudé, Luc Dormieux, Samir Maghous, and D.P. Schmitt. Evolution of elastic properties in finite poroplasticity and finite element analysis. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 26(9) :845–871, 2002.

Denise Bernaud, Luc Dormieux, and Samir Maghous. A constitutive and numerical model for mechanical compaction in sedimentary basins. *Computers and Geotechnics*, 33(6-7) :316–329, 2006.

Geneviève Bessereau. La bibliothèque de lithologies dans Temis. Technical report, 2004.

C.M. Bethke. A numerical model of compaction-driven groundwater flow and heat transfer and its application to the paleohydrology of intracratonic sedimentary basins. *J. Geophys. Res.*, 90 :6817 – 6828, 1985.

Maurice A Biot. General theory of three-dimensional consolidation. *Journal of Applied Mechanics*, 12(2) :155–164, 1941.

Emmanuel Bourgeois. *Mécanique des milieux poreux en transformation finie : formulation des problèmes et méthodes de résolution.* Thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 1997.

Emmanuel Bourgeois, Patrick de Buhan, and Luc Dormieux. Formulation d'une loi élastoplastique pour un milieu poreux saturé en transformation finie. *C. R. Acad. Sci. Paris*, 321(II b) :175–182, 1995.

Claude Boutin. Study of permeability by periodic and self-consistent homogenisation. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 19 :603–632, 2000.

A.K. Burnham and R.L. Braun. Development of a detailed model of petroleum formation, destruction and expulsion from lacustrine and marine source rocks. *Adv. Org. Geochem.*, 16 : 27 – 39, 1990.

Grégory Caratini. *Approche multi-échelle des propriétés mécaniques et de transport des matériaux cimentaires soumis à des élévations de température.* Thèse de doctorat, Université Paris-Est, 2012.

Maurice Cassan. *Les essais de perméabilité sur site dans la reconnaissance des sols.* Presses De L'école Nationale Des Ponts Et Chaussées, 2005.

O. Coussy. *Mécanique des milieux poreux.* Technip, p edition, 1991.

J. A. De Waal. *On the Rate Type Compaction Behavior of Sandstone Reservoir Rock.* Thèse de doctorat, Delft University., 1986.

D. Deming and D.S. Chapman. Thermal histories and hydrocarbon generation : an example from the utah-wyoming thrust belt. *AAPG Bulletin*, 73(12) :1455 – 1471, 1989.

Vincent Deudé. *Non linéarités géométriques et physiques dans les milieux poreux : Apport des méthodes de changements d'échelle.* Thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, Mai 2002.

Vincent Deudé. *Non linéarités géométriques et physiques dans les milieux poreux : Apport des méthodes de changement d'échelle.* Thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 2002.

Vincent Deudé, Luc Dormieux, Samir Maghous, Jean-François Barthélémy, and Denise Bernaud. Compaction process in sedimentary basins : the role of stiffness increase and hardening induced by large plastic strains. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 28(13) :1279–1303, November 2004.

G. Dickinson. Reservoir pressures in gulf coast louisiana. *AAPG Bulletin*, 37(2) :410 – 432, 1953.

B.E. Doligez, J. Bessis, J. Burrus, P. Ungerer, and P.Y. Chénet. *Integrated numerical modelling of sedimentation heat transfer and fluid migration in a sedimentary besin : the THEMIS model.* Technip, Paris, 1986.

L. Dormieux and S. Maghous. Poroelasticity and Poroplasticity At Large Strains. *Oil & Gas Science and Technology*, 54(6) :773–784, 1999.

Luc Dormieux, Djimedo Kondo, and Franz-Josef Ulm. *Microporomechanics.* 2006.

Luc Dormieux, Laurent Jeannin, and Julien Sanahuja. Effective Hydraulic and Mechanical Properties of Heterogeneous Media with Interfaces. In *Multiscale Methods in Computational Mechanics*, pages 179–194. 2011.

S. N. Ehrenberg and P. H. Nadeau. Sandstone vs. carbonate petroleum reservoirs : A global perspective on porosity-depth and porosity-permeability relationships. *AAPG Bulletin*, 89 (4) :435–445, 2005.

H. Ene and E. Sanchez-Palencia. Equations et phénomènes de surface pour l'écoulement dans un modèle de milieu poreux. *Journal de Mécanique*, (14) :73–108, 1975.

W.A. England, A.S. Mackenzie, D.M. Mann, and T.M. Quigley. The movement and entrapment of petroleum fluids in the subsurface. *J. Geol. Soc. London*, 144 :327 – 347, 1987.

D.A. Falvey and I. Deighton. Recent advances in burial and thermal geohistory analysis. *Aust. Pet. Explor. Assoc. J.*, 22 :65 – 81, 1982.

R.C. Fletcher. Coupling of diffusional mass transport and deformation in tight rocks. *Tectonophysics*, 83 :275–292, 1982.

J.B. Foster and H.E. Wahlen. Estimation of formation pressures from electrical surveys - offshore louisiana. *J. Pet. Technol.*, 18(2) :165 – 171, 1966.

A. Foucault and J.-F. Raoult. *Dictionnaire de géologie.* Masson, 4ème édition edition, 1995.

W.E. Galloway. Deposition and the diagenetic alteration of sandstone in northeast pacific arc-related basins. implications for graywacke genesis. *Bull. Geol. Soc. Am.*, 85 :379 – 390, 1974.

J. Ghoussoub. *Modélisation du mécanisme de déformation, transfert en solution, à léchelle du joint de grain.* Thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 2000.

Joumana Ghoussoub and Yves M Leroy. Solid-fluid phase transformation within grain boundaries during compaction by pressure solution. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49 :2385–2430, 2001.

M.R. Giles. *Diagenesis : A quantitative perspective . Implications for Basin Modelling and Rock Property Prediction.*, chapter 10. Kluwer Academic Publishers, 1997.

Jean-Pierre Gratier, Robert Guiguet, François Renard, Liliane Jenatton, and Dominique Bernard. A pressure solution creep law for quartz from indentation experiments. *Journal of Geophysical Research*, 114(B3) :1–16, 2009.

Y. Guéguen and V. Palciauskas. *Introduction à la physique des roches.* Hermann edition, 1992.

Anne-Lise Guilmin, Jean-François Barthélémy, and William Sassi. A new approach to the sedimentation and compaction of basin based on continuum mechanics concepts. In *46th US Rock Mechanics / Geomechanics Symposium*, 2012.

Elisabeth Gundersen, François Renard, Dag Dysthe, and Knut Bjø rlykke. Coupling between pressure solution creep and diffusive mass transport in porous rocks. *J. Geophys. Res*, 2002.

T.F. Guo, J. Faleskog, and C.F. Shih. Continuum modeling of a porous solid with pressure-sensitive dilatant matrix. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 56(6) :2188–2212, 2008.

A.L. Gurson. Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth : Part i - yield criteria and flow rules for porous ductile media. *J. Eng. Mater. Technol.*, 99 :2–15, Janvier 1977.

H.H. Ham. New charts help estimate formation pressures. *Oil Gas J.*, 64(51) :58 – 63, 1966.

Thomas Hantschel and Armin I. Kauerauf. *Fundamentals of Basin and Petroleum Systems Modeling*. 2009.

H.D. Hedberg. Gravitational compaction of clays and shales. *Am. J. Sci.*, 31(184) :241–287, 1936.

C. Hermanrud. Basin modelling techniques-an overview. In Eds. A. G. Dore, J. H. Auguston, C. Hermanrud, D. S. Stewart, and O. Sylta, editor, *Basin modelling : advances and applications, v. 3*, pages 1–34. Norwegian Petroleum Society (NPF) Special Publication, 1993.

C. Hermanrud, S. Eggen, T. Jacobsen, E.M. Carlsen, and S. Pallesen. On the accuracy of modelling hydrocarbon generation and migration : the egersund basin oil find, norway. *Org. Geomech.*, 16(1-3) :389 – 399, 1990.

A. V. Hershey. The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals. *Int. J. Engng. Sci.*, 21 :226–240, 1954.

R. Hills. A self-consistent mechanics of composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13 :213–222, 1965.

H. Hosoi. First migration of petroleum in akita and yamagata prefectures. *Jpn. Assoc. Mineral., Petrol. Econ. Geol. J.*, 49(3) :101 – 114, 1963.

D.W. Houseknecht. Influence of grain size and temperature on intergranular pressure solution, quartz cementation, and porosity in a quartzose sandstone. *Journal of Sedimentary Petrology*, 54 :348–361, 1984.

D.W. Houseknecht. Intragranular pressure solution in four quartzose sandstones. *Journal of Sedimentary Petrology*, 58(2) :228–246, 1988.

http ://navier.enpc.fr/, 2012.

https ://www.projet plume.org/fiche/getfem, 2012.

http ://www.beicip.com/, 2012.

http ://www.ifpenergiesnouvelles.fr/, 2012.

http ://www.platte.com/, 2012.

http ://www.slb.com/, 2012.

Violaine Lamoureux-Var. *Modélisation de la compaction dans les bassins sédimentaires. Approche mécanique*. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, Mai 1997.

H.B. Laubsher. Viscous components in jura folding. *Tectonophysics*, 27 :239–254, 1975.

Y. Le Guen. *Etude expérimentale du couplage chimie-mécanique lors de la percolation d'un fluide réactif dans des roches sous contrainte , dans le contexte de la séquestration géologique du CO 2*. Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier - Grenoble 1, 2006.

F. Lehner and Y. Leroy. *Sandstone compaction by intergranular pressure solution*, volume 89, chapter 3, pages 115–168. Elsevier Inc., 2003.

I. Lerche. *Basin analysis. Quantitative methods, Vol. 1.* Academic Press, San Diego, Calif., 1990.

R.G. Loucks, M.M. Dodge, and W.E. Galloway. *Sandstone consolidation analysis to delineate areas of high-quality reservoirs suitable for production of geopresured geothermalenergy along the Texas Gulf Coast.* Bureau of Economic Geology, Texas, 1979.

K. Magara. Compaction and migration of fluids in miocene mudstone, nagaoka plain, japan. *AAPG Bulletin*, 52(12) :2466 – 2501, 1968.

Samir Maghous. A theoretical poro-elasto-visco-plastic model for mechanical and chemo-mechanical deformation in sedimentary basins. In H.S. da Costa Mattos and Marcilio Alves, editors, *Mechanics of Solids*, number 1, pages 331–349. 2009a.

Samir Maghous. A theoretical poro-elasto-visco-plastic model for mechanical and chemo-mechanical deformation in sedimentary basins. *Mechanics of Solids in Brazil*, pages 331–349, 2009b.

M. Mattauer. *Les déformations des matériaux de l'écorce terrestre*. Hermann, Paris, 1973.

R.H. Meade. Factors influencing the early stages of compaction of clays and sands - review. *J. Sediment. Petrol.*, 36 :1085 – 1101, 1966.

Niels Mortensen, Fridolin Okkels, and Henrik Bruus. Reexamination of Hagen-Poiseuille flow : Shape dependence of the hydraulic resistance in microchannels. *Physical Review E*, 71(5) : 1–4, May 2005.

Aurélien Noiret. *Contribution à la caractérisation du comportement géomécanique des roches couverture des réservoirs pétroliers*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, 2009.

Mark J. Osborne and Richard E. Swarbrick. Diagenesis in North Sea HPHT clastic reservoirs - consequences for porosity and overpressure prediction. *Marine and Petroleum Geology*, 16 : 337–353, 1999.

Hervé Oudin. Introduction à la méthode des éléments finis, 2011.

Edgar Alejandro Pachon-Rodriguez, Agnès Piednoir, and Jean Colombani. Pressure solution at the molecular scale. *Phys. Rev. Lett.*, 107, 2011.

Raymond Perrier and Jacques Quiblier. Thickness Changes in Sedimentary Layers During Compaction History ; Methods for Quantitative Evaluation. *AAPG Bulletin*, 58(3) :507–520, 1974.

Sandrine Portier and Christopher Rochelle. Modelling CO2 solubility in pure water and NaCl-type waters from 0 to 300 Â°C and from 1 to 300 bar. *Chemical Geology*, 217(3-4) :187–199, April 2005.

Jean-Luc Potdevin, Olivier Goffette, and Danielle Santallier. Les différences minéralogiques, chimiques et texturales entre coeur et bordures du filon de diabase de la Grande Commune (massif de Rocroi, Ardenne) : des marqueurs d'un épisode d'infiltration par un fluide à CO2 et H2O lors d'un métamorphisme varisque syn. *Bull. Soc. géol. France*, 165(3) :249–260, 1994.

B.K. Proshlyakov. Reservoir properties of rocks as a function of their depth and lithology. *Geol. Nefti Gaza*, 12 :24 – 29, 1960.

Miarana Rakotoniriana. *Contribution à l'étude du transfert en solution.* Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, 2005.

F Roure, R Swennen, F Schneider, J L Faure, H Ferket, and N Guilhaumou. Incidence and Importance of Tectonics and Natural Fluid Migration on Reservoir Evolution in Foreland Fold-and-Thrust Belts. *Science And Technology*, 60(1) :67–106, 2005.

L. Royden and C.E. Keen. Rifting process and thermal evolution of the continental margin of eastern canada determined from subsidence curves. *Earth. Planet. Sci. Letts.*, 51(2) :343 – 361, 1980.

Jean Salençon. *Viscoelasticité pour le calcul de structures.* Les presses des Ponts et Chaussées, 2009.

A. E. Scheidegger. *The physics of flow through porous media.* Univ. of Toronto Press, Toronto, 1974.

M. Scherer. Parameters influencing porosity in sandstones : A model for sandstone porosity prediction. *AAPG Bulletin*, 71(5) :485 – 491, 1987.

Gene W. Schmidt. Interstitial water composition and geochemistry of deep Gulf Coast shales and sandstones. *AAPG Bulletin*, 57 :321–337, 1973.

Volkmar Schmidt and David A. McDonald. The role of secondary porosity in the course of sandstone diagenesis. In *Aspects of Diagenesis*, volume 26, pages 175–207. SEPM (Society for Sedimentary Geology), 1979.

J. Schmittbuhl, François Renard, Jean-Pierre Gratier, and R. Toussaint. Roughness of Stylolites : Implications of 3D High Resolution Topography Measurements. *Physical Review Letters*, 93 (23) :1–4, 2004.

J.W. Schmoker and R.B. Halley. Carbonate porosity versus depth : A predictable relation for south florida. *AAPG Bulletin*, 66 :2561 – 2570, 1982.

F. Schneider and S. Hay. Compaction model for quartzose sandstones application to the Garn Formation, Haltenbanken, Mid-Norwegian Continental Shelf. *Marine and Petroleum Geology*, 18(7) :833–848, August 2001.

F. Schneider, J.L. Potdevin, S. Wolf, and I. Faille. Modèle de compaction elastoplastique et viscoplastique pour simulateur de bassins sédimentaires. Technical report, Institut Français du Pétrole, Septembre 1993.

F Schneider, J L Potdevin, S Wolf, and I Faille. Mechanical and chemical compaction model for sedimentary basin simulators. *Tectonophysics*, 263 :307–317, 1996.

Schneider, F., Potdevin, J. L., Wolf, S., and Faille, I. Modèle de compaction élastoplastique et viscoplastique pour simulateur de bassins sédimentaires. *Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP*, 49(2) :141–148, 1994.

J.G. Sclater and P.A.F. Christie. Continental stretching : an explanation of the post-mid-cretaceous subsidence of the central north sea basin. *J. Geophys. Res.*, 85 :3711 – 3739, 1980.

Maximilien Siavelis. *Modélisation numérique X-FEM de grands glissements avec frottement le long d'un réseau de discontinuités*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Nantes, 2011.

Maged Sidhom. Thèse en cours.

C. J. Spiers and P. M. T. M. Schutjens. Densification of Crystalline Aggregates by Fluid-Phase Diffusional Creep. In D.J. Barber and G. Meredith, editors, *Deformation Processes in Minerals, Ceramics and Rocks.*, pages 334–353. Unwin Hyman, 1990.

Bruno Sudret. *Modélisation Multiphasique des Ouvrages Renforcés par Inclusions*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 1999.

Mark R. P. Tingay, Richard R. Hillis, Richard E. Swarbrick, Chris K. Morley, and Abdul Razak Damit. Origin of overpressure and pore-pressure prediction in the Baram province, Brunei. *AAPG Bulletin*, 93(1) :51–74, 2009.

P Ungerer, J Burrus, B Doligez, PY Chenet, and F Bessis. Evaluation des bassins par modélisation intégrée en deux dimensions des transferts thermiques de l'écoulement des fluids, de la genèse et de la migration des hydrocarbures. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, 46 (3) :309–335, 1991.

Reinier van Noort, Hendrica J. M. Visser, and Christopher J. Spiers. Influence of grain boundary structure on dissolution controlled pressure solution and retarding effects of grain boundary healing. *J. Geophys. Res*, 113 :1–15, 2008.

B.C. Vendeville and M.P.A. Jackson. The rise of diapirs during thin-skinned extension. *Marine and Petroleum Geology*, 9 :331–353, 1992.

A.B. Watts and W.B.F. Ryan. Flexure of the lithosphere and continental margin basins. *Tectonophysics*, 36(1-3) :25 – 44, 1976.

J.M. Weller. Compaction of sediments. *AAPG Bulletin*, 43(2) :273 – 310, 1959.

P.K. Weyl. Pressure solution and the force of crystallization A phenomenological theory. *Journal of Geophysical Research*, 64 :2001–2025, 1959.

J R Willis. The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media. *Ponte*, 43(12) :1919–1951, 1995.

J.R. Willis. Variational and Related Methods for the Overall Properties of Composites. *Advances in Applied Mechanics*, 21 :1–78, 1981.

S. Youssef, E. Rosenberg, N. Gland, S. Bekri, and O. Vizika. Quantitative 3D characterisation of the pore space of real rocks : improved ν-CT resolution and pore extraction methology. *International Symposium of the Society of Core Analysts, Calgary, Canada*, Calgary, Canada, 2007.

André Zaoui. *Matériaux hétérogènes et composites. Cours à l'École Polytechnique.* Presses de edition, 2000.