



HAL
open science

Modeling of damage-permeability coupling in anisotropic geomaterials. Application to Bure underground works

Mohamed Mahjoub

► **To cite this version:**

Mohamed Mahjoub. Modeling of damage-permeability coupling in anisotropic geomaterials. Application to Bure underground works. Earth Sciences. Université Paris sciences et lettres, 2017. English. ⟨NNT: 2017PSLEM043⟩. ⟨tel-01790009⟩

HAL Id: tel-01790009

<https://pastel.hal.science/tel-01790009v1>

Submitted on 11 May 2018

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.



HAL Authorization

THÈSE DE DOCTORAT

de l'Université de recherche Paris Sciences et Lettres
PSL Research University

Préparée à MINES ParisTech

Modélisation du couplage endommagement-perméabilité dans les géomatériaux anisotropes. Application aux ouvrages souterrains du site de Bure

Modeling of damage-permeability coupling in anisotropic geomaterials. Application to Bure underground works

Ecole doctorale n°398

Géosciences, Ressources Naturelles et Environnement

Spécialité Géosciences et Géoingénierie

Soutenue par Mohamed MAHJOUB
le 20 juin 2017

Dirigée par **Michel TIJANI**

COMPOSITION DU JURY :

M. Pierre BEREST
LMS, Ecole Polytechnique, Président du jury

M. Alain MILLARD
CEA Saclay, Rapporteur

M. Amade POUYA
Ecole des Ponts ParisTech, Rapporteur

Mme. Sylvie GRANET
EDF R&D, Examinatrice

M. Ahmed ROUABHI
MINES ParisTech, Examineur

M. Michel TIJANI
MINES ParisTech, Directeur de thèse

M. Darius M. SEYEDI
ANDRA, Invité



Remerciements

Un grand nombre de personnes m'ont aidé et soutenu durant mon doctorat, je souhaite les remercier ici.

Tout d'abord, j'exprime toute ma reconnaissance à mes encadrants du Centre de Géosciences de Mines ParisTech. Leurs supports, rigueurs et disponibilités ont été sans faille pendant cette thèse. Pour cela, je remercie Ahmed ROUABHI, mon maître de thèse, pour ses encouragements et ses conseils qui m'ont toujours motivé même dans les moments les plus difficiles. J'ai beaucoup appris à ses côtés. Je remercie également Michel TIJANI, mon directeur de thèse, pour sa rigueur scientifique et sa gentillesse qui m'ont beaucoup inspiré. Enfin, j'ai été extrêmement sensible à ses qualités humaines d'écoute, sa pédagogie et ses multiples conseils.

Cette thèse s'inscrit dans le cadre d'une collaboration entre le Centre de Géosciences de Mines ParisTech et EDF R&D. Je remercie Sylvie GRANET, de EDF R&D, qui a suivi mon avancement et qui a été toujours disponible pour répondre à mes questions. Ses connaissances sur Code-Aster et le projet CIGEO m'ont été d'une grande utilité. Je n'oublie pas Faouzi HADJ-HASSEN, du Centre de Géosciences, qui a beaucoup travaillé pour mettre cette collaboration en place. Je le remercie pour les efforts constructifs qu'il a déployés pour mon projet de master et ma thèse.

Les diverses réunions de travail entre le Centre de Géosciences, EDF R&D et l'ANDRA m'ont beaucoup servi durant la thèse. Je remercie Jean TALANDIER et Darius SEYEDI, de l'ANDRA, et Sam CUVILLIEZ et Sofia M'JAHAD, de EDF R&D, pour leurs pertinentes remarques et leurs importantes suggestions pour l'amélioration de mes travaux de recherche.

Ma gratitude va ensuite aux membres du jury. Je remercie Alain MILLARD et Ahmad POUYA qui ont accepté d'être les rapporteurs de ma thèse ainsi que Pierre BEREST qui m'a fait l'honneur de présider le jury.

Je souhaiterais aussi adresser ma gratitude à tous les chercheurs et secrétaires de l'équipe GIG pour leur gentillesse et leur bienveillance. Je remercie également tous les doctorants, anciens et nouveaux, que j'ai côtoyés dans cette équipe : Rima, Ha, Abed, Anis, Manon, Mohamed, Paule, Xiangdong, Zezhong, Sara, Hafsa, Dac-Thuong et Aurélien. Ils ont apporté de la vie et du bonheur dans notre étage. Je n'oublie pas les parties de billard avec Mohamed, Charlie, Vincent, Christophe et Nidhal. Je les remercie pour ces moments de joie qui me manquent déjà. Enfin, un grand merci à ma famille et à tous mes amis pour leur aide et leur soutien.

Résumé

La caractérisation du comportement hydromécanique des géomatériaux représente une étape indispensable pour plusieurs projets d'exploitation du sous-sol tels que le stockage géologique des déchets radioactifs, la production non conventionnelle des hydrocarbures et la géothermie. Les processus hydromécaniques y sont, en effet, fortement couplés : l'endommagement mécanique induit une altération des propriétés de transfert hydraulique, d'une part, et les surpressions de pore peuvent avoir des implications sur l'intégrité du matériau, d'autre part. Ces phénomènes sont d'autant plus complexes à décrire lorsque les géomatériaux concernés présentent, en plus de l'anisotropie induite par le chargement, une anisotropie initiale.

Le but de cette thèse est de mettre en place un nouveau modèle de comportement hydromécanique permettant de prendre en compte les anisotropies initiale et induite et l'impact de l'endommagement mécanique sur la perméabilité. Afin de construire ce modèle, une nouvelle approche de modélisation permettant d'étendre les lois de comportement mécaniques des matériaux isotropes aux matériaux anisotropes (plus précisément aux matériaux isotropes transverses) est développée. Cette approche, employée dans le cadre des milieux continus à variables internes, est utilisée pour construire une loi de comportement elasto-viscoplastique qui distingue les régimes de sollicitation en compression et en traction. Un tenseur de second ordre est introduit pour décrire l'anisotropie induite suite à des sollicitations de traction et une variable interne scalaire est utilisée pour traduire le durcissement/adoucissement du matériau suite à des sollicitations de compression. Sous des sollicitations complexes, ces deux mécanismes sont couplés et l'effet de fermeture/réouverture des fissures est traité. Le couplage endommagement-perméabilité est ensuite modélisé par l'introduction d'une loi phénoménologique reliant la perméabilité intrinsèque du matériau aux variables internes de la mécanique.

Ce modèle a été appliqué dans le cas des ouvrages souterrains du site de Bure, suivi par l'agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs (ANDRA), afin de comprendre les mécanismes d'altération des propriétés hydromécaniques de l'argilite Callovo-Oxfordien (COx) autour des galeries et des alvéoles de stockage causée non seulement par les opérations de creusement mais également par les surpressions dues à la production d'hydrogène gazeux suite à la corrosion des parties métalliques des modules de déchets. D'abord, l'analyse d'essais d'injection de gaz dans une argilite initialement saturée en eau sous confinement constant ainsi que les simulations d'injection d'hydrogène sur les parois d'une galerie nous ont fourni d'importants renseignements pour la compréhension du processus de migration de l'hydrogène produit par corrosion. Ensuite, l'interprétation d'essais de compression triaxiale et d'essais brésiliens avec mesures de perméabilité nous a donné une estimation des paramètres hydromécaniques de l'argilite. Enfin, les simula-

tions mécaniques et hydromécaniques du creusement des galeries nous ont permis de bien reproduire les mesures de convergences, les formes des zones endommagées, les perméabilités et les pressions de pore. Les dissymétries des observations dues à l'anisotropie des contraintes *in-situ* sont également bien expliquées.

Table des matières

Remerciements	i
Résumé	iii
Table des matières	v
Introduction générale	1
I.1 Contexte général	1
I.2 Objectifs et plan de la thèse	3
1 Chapitre récapitulatif des travaux de thèse	7
1.1 Introduction	7
1.2 Cadre de la modélisation : couplage hydromécanique dans un milieu poreux	10
1.2.1 Équations de bilan	11
1.2.2 Lois complémentaires	12
1.3 Anisotropies initiale et induite	14
1.3.1 Tenseurs d'élasticité isotrope et isotrope transverse	15
1.3.2 Modèle d'endommagement étendu des matériaux isotropes	16
1.3.3 L'anisotropie en tant qu'endommagement initial	17
1.3.4 Approche d'équivalence entre isotropie et isotropie transverse	17
1.3.5 Modèle de comportement endommagement-viscoplasticité	19
1.3.6 Implémentation numérique	23
1.4 Relation endommagement-perméabilité	26
1.5 Couplage hydromécanique dans un milieu poreux non saturé	28
1.5.1 Problème de transition saturé/non saturé	29
1.5.2 Pression de pore dans un milieu non saturé : modélisation d'un essai d'injection de gaz	30
1.5.3 Endommagement mécanique engendré par des surpressions de gaz dans une structure	32
1.6 Simulation du creusement des galeries	33
1.6.1 Simulations purement mécaniques	34
1.6.2 Simulations couplées hydromécaniques	36
2 Étude Numérique de l'expansion de l'argilite Callovo-Oxfordien due à une injection de gaz	39
2.1 Introduction	40
2.2 Theoretical framework : hydro-mechanical equations of two-phase flow in a deformable porous medium	43

2.2.1	Hydraulic behavior	43
2.2.2	Mechanical behavior	46
2.2.3	Summary of the hydromechanical equations	47
2.3	Model calibration on a gas injection test in an initially water-saturated rock under isotropic mechanical loading	48
2.3.1	Test conditions and material parameters	48
2.3.2	Initial and boundary conditions	49
2.3.3	Hydromechanical simulations starting from the breakthrough time	50
2.3.4	Numerical simulations of the filling stage (before breakthrough)	54
2.3.5	Comparison between the two experimental stages	56
2.4	Model validation on a different test	58
2.5	Conclusions	58
2.A	Appendix : Determination of flow rates at atmospheric pressure	61
3	Une approche de modélisation du comportement mécanique des matériaux isotropes transverses	63
3.1	Introduction	64
3.2	Equivalent fictitious isotropic material approach	66
3.3	Failure criteria	68
3.4	Anisotropic damage behavior law for transversely isotropic materials	73
3.4.1	Uniaxial computational results	74
3.4.2	Simulation of Brazilian tests	75
3.5	Conclusions	82
3.A	Appendix : Mathematical preliminaries	84
3.A.1	Second order symmetric tensors	84
3.A.2	Representation theorem of isotropic functions	84
3.A.3	Transverse isotropy	85
3.A.4	Different writings of a fourth order transversely isotropic tensor	86
4	Analyse numérique de l’anisotropie de l’argilite Callovo-Oxfordien à partir des mesures à long terme de convergence des tunnels	89
4.1	Introduction	90
4.2	An elasto-viscoplastic behavior law considering material elastic and non-elastic anisotropies	93
4.2.1	Isotropy-transverse isotropy transformation	93
4.2.2	Modeling approach	94
4.2.3	Numerical scheme	98
4.2.4	Validation of the model on triaxial compression tests	98
4.3	Application : Drift excavations in Callovo-Oxfordian claystone	101
4.3.1	Modeling using an isotropic material	104
4.3.2	Modeling using an anisotropic material	106
4.3.3	Importance of the non-elastic anisotropy	106
4.3.4	Study of the excavation scenario effect	108
4.3.5	Study of the mesh size effect	111
4.3.6	Discussions about the model parameters and loading regime	112
4.4	Conclusions	115
4.A	Appendix : Canonical and new writings of a fourth order transversely isotropic tensor	116

5	Modélisation de l'altération de la perméabilité due aux sollicitations mécaniques avec prise en compte de l'anisotropie du matériau	119
5.1	Introduction	120
5.2	A hydromechanical model accounting for material anisotropy and permeability alteration	123
5.2.1	Isotropy-transverse isotropy transformation	123
5.2.2	Mechanical behavior law	124
5.2.3	Impact of the mechanical behavior on the permeability	127
5.3	Model validation on laboratory experiments	129
5.3.1	Permeability change in tensile regime : simulation of Brazilian tests with permeability measurements	129
5.3.2	Permeability change in compressive regime : simulation of triaxial compression tests with gas injection	131
5.4	Application 1 : drift excavations in Callovo Oxfordian claystone	132
5.5	Application 2 : study of tensile damage due to hydrogen injection in COx claystone	138
5.6	Conclusions	141
	Conclusions et perspectives	147
A	Cohérence thermodynamique entre les lois d'état et les équations d'équilibre aux interfaces	151
A.1	Définitions thermodynamiques	151
A.2	Mélange de gaz parfait	152
A.3	Application : système hydrogène-eau en milieu poreux	153
	Bibliographie	159

Introduction générale

I.1 Contexte général

La modélisation du couplage entre l'endommagement mécanique et l'altération de la perméabilité représente un élément clé dans plusieurs projets d'exploitation du sous-sol. Alors que l'augmentation de la perméabilité due à un endommagement est un facteur favorable au rendement du projet et donc à sa viabilité pour les applications de géothermie ou de production non conventionnelle des hydrocarbures, elle représente plutôt un élément qui augmente le risque de contamination de l'environnement dû à l'échappement des radionucléides dans un projet de stockage géologique de déchets radioactifs. Quel que soit l'objectif, favoriser ou limiter l'augmentation de la perméabilité, il est indispensable de caractériser ce phénomène via un modèle hydromécanique convenable. Ceci doit d'abord passer par l'établissement de lois de comportement adéquates capables de reproduire la réponse des géomatériaux en question dans la gamme des sollicitations envisagées. Deux aspects doivent particulièrement être bien pris en compte dans cette modélisation : la fissuration de la roche par cisaillement due aux opérations de creusement (de puits pour la géothermie ou les hydrocarbures non conventionnels ou des galeries et des alvéoles de stockage pour le stockage géologique des déchets radioactifs) et la fissuration par traction due aux surpressions de pore (par stimulation hydraulique dans les deux premiers cas ou, par exemple, par production d'hydrogène due à la corrosion des éléments métalliques des modules de déchets dans le troisième cas). Le caractère orienté de la fissuration induite et la nature des géomatériaux considérés, principalement des roches sédimentaires anisotropes, augmentent considérablement la complexité du problème et représentent un verrou scientifique majeur.

Alors que les développements des lois de comportement dans cette thèse sont applicables à plusieurs projets pratiques, on se limite, dans ce travail, à une application précise qu'est le stockage géologique des déchets radioactifs et, plus particulièrement, aux données concernant le projet de stockage profond dans l'argilite de la région de Bure (argilite du Callovo-Oxfordien COx) où l'ANDRA a construit son laboratoire souterrain Laboratoire de Meuse/Haute Marne M/HM. Au niveau principal de ce laboratoire (à 490 m de profondeur), plusieurs galeries d'essai ont été construites et instrumentées et plusieurs expérimentations à échelle réelle ont été réalisées (voir figure 1). Les différentes données collectées via les mesures en laboratoire de surface (menées par différents centres de recherche français et étrangers) et in-situ représentent une importante base de connaissance qui sert à comprendre et à prédire la réponse de la roche face aux différents phénomènes thermo-hydro-mécaniques tout au long du stockage.

Dans le but de prouver la fiabilité du projet de stockage de déchets radioactifs, l'étude

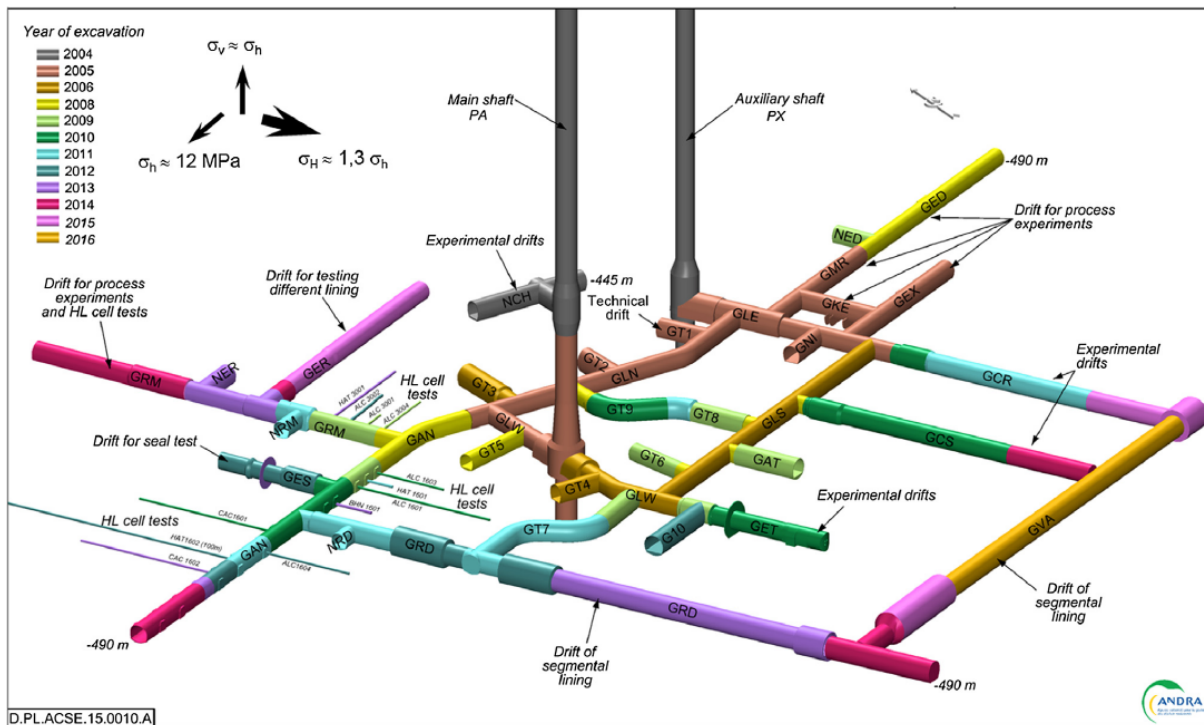


FIGURE 1 – Plan du Laboratoire souterrain Meuse/Haute Marne. Source : [Seyedi et al. \(2016\)](#)

des risques naturels et anthropiques pouvant engendrer une contamination de l'environnement du site de stockage est indispensable. Les divers scénarios d'évolution des propriétés chimiques, thermiques, hydrauliques et mécaniques de ce site doivent faire l'objet d'une étude détaillée en fonction de leur probabilité d'occurrence et de la gravité de leurs conséquences. On peut trouver dans les rapports de l'ANDRA (par exemple [ANDRA \(2005b\)](#)) une description détaillée des phénomènes physiques les plus importants. On se contente ici d'en rappeler quelques uns. D'un point de vue mécanique, les opérations de creusement des galeries et des alvéoles induisent un endommagement de la roche formant ainsi une zone endommagée qui évolue dans le temps et dans l'espace à cause du comportement viscoplastique du matériau. En ce qui concerne la thermique, les réactions chimiques exothermiques pouvant se produire dans les colis des déchets induisent une élévation de température qui peut atteindre $80\text{ }^{\circ}\text{C}$ au bout de quelques dizaines d'années à l'intérieur de la roche. La combinaison des effets mécaniques (creusement) et thermiques (réchauffement) provoquent une désaturation partielle de la roche qui sera compensée dans sa quasi-totalité une fois le site fermé et le pic de température dépassé. Finalement, d'un point de vue chimique, plusieurs réactions chimiques sont susceptibles d'avoir lieu durant la phase d'exploitation du site de stockage. On retient ici les réactions de corrosion des composants métalliques des colis de stockages (voir figure 2) qui peuvent générer d'importantes quantités d'hydrogène sous forme de gaz. Se trouvant bloqué par la faible perméabilité de la roche et son importante pression d'entrée, l'hydrogène peut ainsi induire des surpressions pouvant désaturer et endommager la roche.

En plus de ces différents phénomènes fortement couplés, différents types d'anisotropies viennent ajouter une complexité supplémentaire à la problématique du stockage. La caractérisation des contraintes géostatiques au niveau du laboratoire souterrain de l'ANDRA

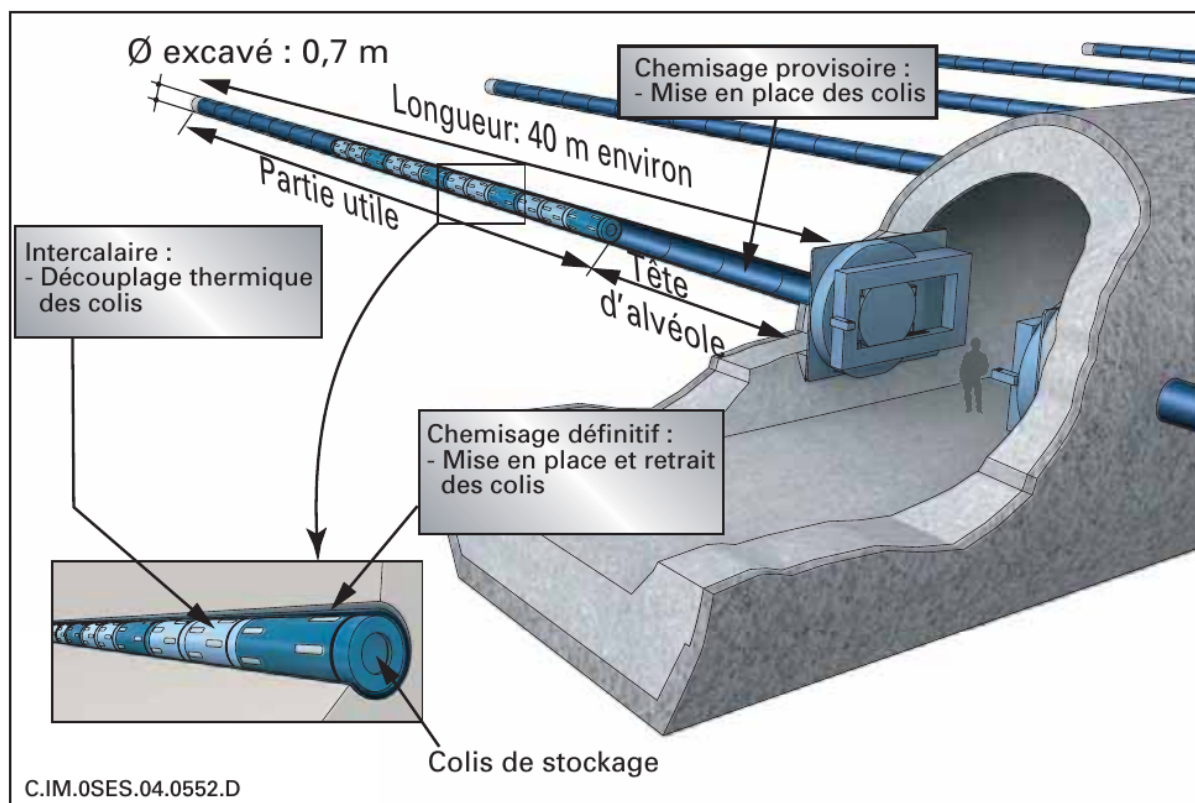


FIGURE 2 – Représentation d’une alvéole contenant des colis de stockage selon le plan d’exploitation de l’ANDRA. Source : ANDRA (2005a)

(Wileveau et al., 2007) a montré une **anisotropie des contraintes in-situ** : la contrainte horizontale majeure (σ_H) est environ 30 % plus importante que la contrainte horizontale mineure (σ_h) qui est presque égale à la contrainte verticale (σ_v). Cette anisotropie induit une différence de comportement entre les galeries creusées dans la direction de σ_h et celle dans la direction perpendiculaire (\perp/σ_H) (Armand et al., 2013, 2014; Guayacán-Carrillo et al., 2016). Comme le montre la figure 3, non seulement les mesures de convergences sont différentes d’une direction à l’autre mais aussi la forme des zones endommagées, la distribution des fissures et leurs modes de rupture. L’**anisotropie intrinsèque** du COx semble aussi jouer un rôle déterminant puisque les dissymétries des mesures de convergence et de la forme de la zone endommagée dans les galeries parallèles à σ_H , dont les sections transversales sont soumises à un état de contraintes isotropes, ne peuvent être expliquées que par l’anisotropie du matériau. Finalement, la combinaison de l’anisotropie des contraintes et du matériau conduit à un dernier type d’anisotropie qui est l’**anisotropie induite** qui, comme le montre la figure 3, se manifeste par l’apparition de fissures orientées autour des galeries souterraines.

I.2 Objectifs et plan de la thèse

L’objectif principal de cette thèse est de fournir un modèle de comportement hydromécanique capable de décrire le phénomène d’altération de la perméabilité due à l’endommagement mécanique tout en prenant en considération, à la fois, les anisotropies initiale et induite du matériau. L’approche est basée sur le formalisme des milieux poreux continus

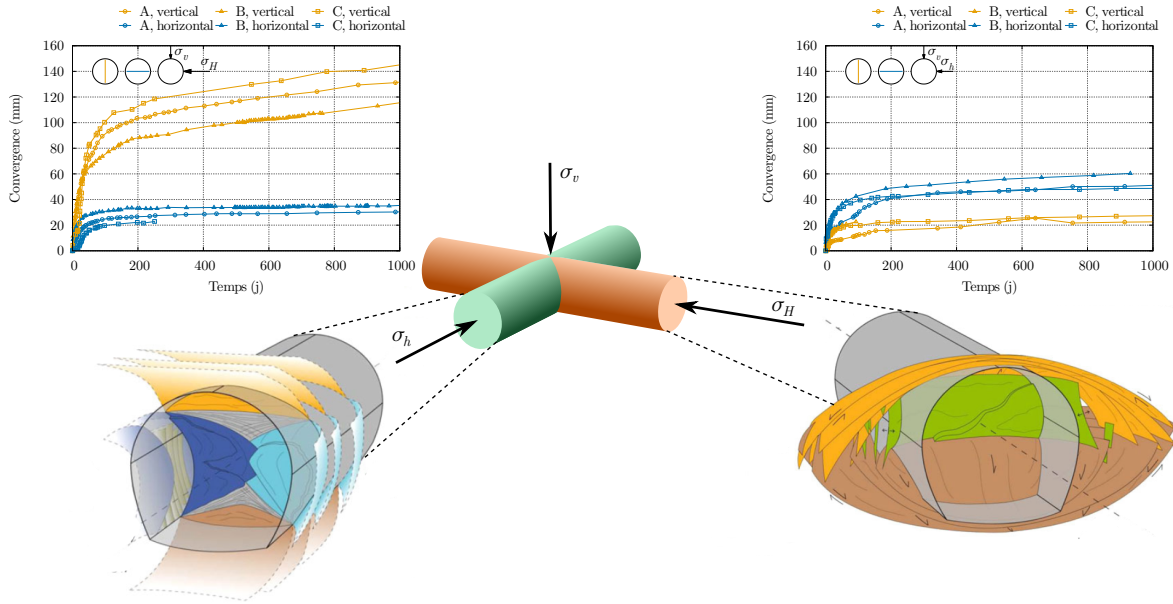


FIGURE 3 – Exemples des mesures de convergence (sections A, B et C des galeries GCS, // σ_H , et GED, // σ_h) et schéma conceptuel du réseau de fissures (adapté de [Armand et al. \(2014\)](#)) autour des galeries parallèles à σ_H et à σ_h .

dans lequel les contraintes totales sont réparties entre le squelette solide et les fluides interstitiels.

Le mémoire de cette thèse est constitué de quatre articles qui sont repris tels quels et représentent les chapitres de 2 à 5. L'article correspondant au troisième chapitre ([Mahjoub et al., 2016](#)) est déjà publié dans une revue à comité de lecture alors que les trois autres sont encore dans le processus de publication.

Le premier chapitre fait l'objet d'une synthèse des travaux de la thèse. Il explique la démarche employée dans ce travail et assure la cohérence entre les différents aspects traités. Dans un premier temps, le cadre du couplage hydromécanique en milieux poreux est expliqué ainsi que les spécificités apportées par cette thèse à savoir les lois de comportement mécaniques et leurs impacts sur les propriétés hydrauliques. Dans un second temps, des précisions et des discussions sur les modèles introduits ainsi que des illustrations des résultats les plus importants sont fournis, le lecteur étant dirigé à chaque fois vers le chapitre correspondant pour les détails.

Le deuxième chapitre est dédié à l'explication du comportement hydromécanique de l'argilite en présence d'eau et de gaz dans son réseau poral. D'abord, le cadre théorique du comportement hydromécanique d'un milieu poreux non saturé est rappelé. L'accent est surtout mis sur la transition entre l'état saturé et l'état non saturé grâce aux phénomènes de dissolution et de diffusion. Ensuite, deux essais d'injection d'hélium dans des échantillons d'argilite initialement saturés en eau et sous confinement constant sont simulés. L'analyse des résultats numériques en comparaison avec les mesures de déformations volumiques montrent la nécessité d'introduire un modèle de comportement mécanique non élastique pour expliquer les mesures de gonflement enregistrées.

Le troisième chapitre est dédié à la mise en place d'une nouvelle méthode de modélisa-

tion du comportement mécanique des matériaux isotropes transverses. Cette approche, basée sur l'idée d'une équivalence entre le matériau réel isotrope transverse et un matériau isotrope fictif, permet d'adapter les lois de comportement des matériaux isotropes vers les matériaux isotropes transverses moyennant deux paramètres uniquement (Module de Young et coefficient de Poisson fictifs). Afin de montrer les capacités de ce processus de modélisation, le critère de rupture de Drucker-Prager ainsi qu'une loi de comportement d'endommagement anisotrope sont adaptés aux matériaux isotropes transverses. Ces modèles sont ensuite utilisés pour reproduire des mesures provenant d'essais de compression et d'essais brésiliens sur plusieurs roches avec plusieurs schistosités.

Le quatrième chapitre, qui est dédié au comportement mécanique en compression, représente une application de la méthode de modélisation décrite au chapitre précédent. Pour expliquer les mesures de convergence des galeries du laboratoire souterrain du M/HM, une nouvelle loi de comportement elasto-viscoplastique basée sur un critère de Drucker-Prager modifié et un potentiel de type Drucker-Prager est définie pour les matériaux isotropes transverses. Après avoir validé ce modèle de comportement sur des essais de laboratoire pour montrer ses capacités, plusieurs simulations numériques de creusement des tunnels parallèles à σ_H et σ_h ont été réalisées. En variant les hypothèses sur le comportement du matériau (isotropie, anisotropie des paramètres élastiques et non élastiques ou anisotropie des paramètres élastiques uniquement), l'importance de chacun des trois types d'anisotropies, des contraintes in-situ, des paramètres élastiques et des paramètres non élastiques, a été soulignée. Enfin, des calculs ont été réalisés en modifiant l'historique de déconfinement afin de montrer l'invariance de la réponse à long terme par rapport au processus de creusement.

Le cinquième chapitre est consacré au modèle de comportement hydromécanique complet développé dans cette thèse. La partie mécanique est constituée de la loi de comportement d'endommagement en traction introduite dans le troisième chapitre et de la loi elasto-viscoplastique en compression utilisée dans le quatrième chapitre. En ce qui concerne le comportement hydraulique, une loi phénoménologique reliant la perméabilité intrinsèque du matériau aux tenseurs d'endommagement et aux déformations volumiques par dilatance est introduite et discutée. Pour le couplage hydromécanique, le formalisme des contraintes effectives tel que défini par Coussy (1991) est employé.

Le modèle est appliqué, dans un premier lieu, au problème de creusement des tunnels et les résultats des calculs hydromécaniques sont comparés aux mesures de convergences, de perméabilité et aux pressions de pore autour des galeries. Dans un second lieu, il a été utilisé pour des calculs d'injection d'hydrogène sur les parois d'une galerie imitant la problématique de production et de migration d'hydrogène dans le projet de stockage des déchets. Même si ces calculs ont un caractère qualitatif plutôt que quantitatif, les simulations sont utilisées pour trouver une relation entre la quantité d'hydrogène injectée et son impact sur l'intégrité de la roche.

Notations : Dans toute la suite, un tenseur d'ordre 1 (vecteur) est désigné par une flèche en dessus d'une lettre (\vec{a}), un tenseur d'ordre 2 est dénoté par deux lignes en dessous d'une lettre ($\underline{\underline{a}}$) et un tenseur d'ordre 4 est désigné par un tilde en dessous d'une lettre ($\underline{\underline{\underline{\underline{A}}}}$). L'exposant 't' indique l'opérateur transposé et 'tr' représente la trace. Le symbole ':' dénote le produit à double contraction, par exemple, $\underline{\underline{a}} : \underline{\underline{b}} = a_{ij}b_{ji}$ où les indices représentent les composantes cartésiennes et la répétition des indices implique une somme sauf indica-

tion contraire. Le produit $\underline{a} \underline{b}$ dénote une simple contraction c'est-à-dire $(\underline{a} \underline{b})_{ij} = a_{ik} b_{kj}$. De la même façon, le produit $\underline{\underline{A}} \underline{\underline{B}}$ est défini par $(\underline{\underline{A}} \underline{\underline{B}})_{ijkl} = A_{ijmn} B_{nmkl}$. Les produits tensoriels sont définis par $(\underline{a} \otimes \underline{b})_{ijkl} = a_{ij} b_{kl}$ et $(\vec{a} \otimes \vec{b})_{ij} = a_i b_j$. Le symbole ' $\overline{\otimes}$ ' représente un produit tensoriel symétrisé défini par $(\underline{a} \overline{\otimes} \underline{b})_{ijkl} = \frac{1}{2}(a_{ik} b_{jl} + a_{il} b_{jk})$. Les tenseurs d'identité sont $\underline{\underline{1}}$ pour l'ordre 2 et $\underline{\underline{\underline{1}}}$ pour l'ordre 4. Pour tout tenseur \underline{a} , sa partie déviatorique est désignée par $\underline{a}' = \underline{a} - (\text{tr}(\underline{a})/3)\underline{\underline{1}}$.

La signification de chaque symbole introduit dans cette thèse est expliquée dans le texte juste après sa première apparition.

Chapitre 1

Chapitre récapitulatif des travaux de thèse

1.1 Introduction

Le modèle de comportement hydromécanique développé dans le cadre de cette thèse respecte un certain nombre d'exigences : (i) il est défini dans le cadre des milieux poreux continus, (ii) le comportement mécanique couvre les régimes de sollicitation en traction et en compression en prenant en compte les anisotropies initiale et induite du matériau et (iii) la perméabilité du matériau évolue en fonction des indicateurs de l'endommagement mécanique.

(i) Milieux poreux saturés/non saturés

Du fait d'utiliser la partition des contraintes totales moyennant la théorie de Biot et par définition de la perméabilité intrinsèque, la loi de comportement mécanique du squelette solide ainsi que la relation perméabilité-endommagement peuvent être définies indépendamment de la nature et du nombre des fluides existants dans le réseau de pore du matériau. Il convient, néanmoins, de préciser nos besoins en terme de comportement hydraulique dans le cadre de l'application souhaitée, le stockage géologique des déchets radioactifs. Comme expliqué plus haut, on s'intéresse ici à deux phénomènes : le creusement des galeries et ce que cela peut induire comme perturbations des caractéristiques hydromécaniques et la migration dans la roche hôte de l'hydrogène produit par corrosion des éléments métalliques des conteneurs de déchets.

Pour la première problématique (creusement), même si la ventilation des galeries peut induire une désaturation de la roche, des études précédentes (voir par exemple [Charlier et al. \(2013\)](#); [Pardoën et al. \(2015\)](#); [Pham \(2006\)](#)) ont montré que le matériau reste proche de la saturation. Par conséquent, les calculs hydromécaniques de la phase de creusement des galeries seront effectués en supposant que le matériau reste toujours saturé en eau. Dans ce cas, la seule inconnue du problème hydraulique est la pression de l'eau interstitielle.

Pour la deuxième problématique (migration d'hydrogène), on considère plutôt un milieu poreux non saturé contenant une phase liquide λ et une phase gazeuse γ avec deux constituants : de l'hydrogène h et de l'eau w (voir figure 1.1). Le constituant h désigne

aussi l'hélium lorsqu'on s'intéresse à des essais d'injection de cet espèce chimique dans des échantillons d'argilite dans le deuxième chapitre. Dans la section 1.5, on explicite les équations nécessaires pour résoudre ce problème et on met l'accent sur trois points clés qu'il faut considérer pour l'écoulement diphasique dans un milieu poreux : (i) la résolution numérique de la phase de transition d'un état saturé à un état non saturé et notamment l'importance des phénomènes de dissolution et de diffusion ; (ii) le choix de la pression de pore p en fonction des pressions des phases, p_λ et p_γ , et du degré de saturation S_λ qui a un impact non négligeable sur la réponse mécanique du milieu poreux ; et (iii) l'endommagement mécanique que peut engendrer les surpressions de pore surtout pour le cas de migration d'hydrogène dans l'argilite.

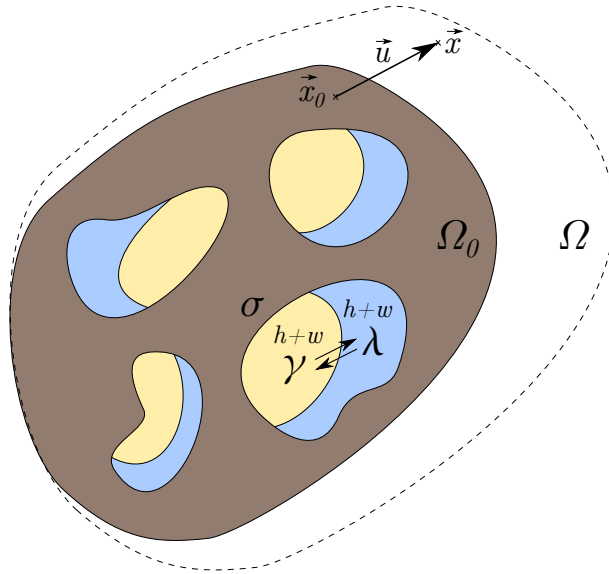


FIGURE 1.1 – Milieux poreux avec une phase solide (σ) et deux phases fluides, liquide (λ) et gazeuse (γ), à deux constituants, eau (w) et hydrogène (h)

Dans les deux cas, il est nécessaire de présenter le cadre de modélisation ce qui fera l'objet de la section 1.2 où on décrit le cas général d'un milieu poreux multiphasique multi-constituants. On y rappellera les équations de bilan de la masse et de la quantité de mouvement ainsi que les lois complémentaires et on veillera sur la fermeture mathématique du problème (nombre d'inconnues = nombre d'équations). Pour ce faire, on fait appel aux travaux théoriques tels que Coussy (1991); Hassanizadeh et Gray (1979); Schrefler et Pesavento (2004).

(ii) Comportement mécanique

Dans la littérature, on trouve plusieurs travaux qui s'intéressent au comportement mécanique des matériaux isotropes transverses. En plus de la caractérisation expérimentale de l'anisotropie des paramètres élastiques comme Cho et al. (2012); Rejeb (1999), beaucoup d'auteurs se sont intéressés à l'anisotropie de la résistance à la compression (Cho et al., 2012; Rejeb, 1999; Rouabhi et al., 2007; Ambrose et al., 2014; Tien et Kuo, 2001; Crawford et al., 2012; Fjær et al., 2013) et de la résistance à la traction (Cho et al., 2012; Claesson et Bohloli, 2002; Chen et al., 1998; Exadaktylos et Kaklis, 2001; Chen et Hsu, 2001; Dan et Konietzky, 2014; Tavallali et Vervoort, 2010, 2013; Dan, 2011; Dan et al., 2013; Vervoort

et al., 2014; Hobbs, 1964, 1965, 1967; Barla et Innaurato, 1973; Barron, 1971; Hudson, 1969; Fine et Vouille, 1970; Barpi et al., 2012). Des études expérimentales, analytiques et numériques ont, en effet, été réalisées pour caractériser l'effet de l'orientation du plan de schistosité sur la réponse des essais de laboratoire comme les essais de compression triaxiale, les essais brésiliens, les essais brésiliens sur des échantillons troués et les essais de flexion à trois points.

Beaucoup de fonctions de charge ont été élaborées pour décrire les essais de compression triaxiale avec différentes orientations comme celles définies par Rouabhi et al. (2007); Ambrose et al. (2014); Crawford et al. (2012); Fjær et al. (2013); Tien et Kuo (2001). Par ailleurs, une multitude de modèles de comportement ont été introduits pour ce type de matériaux. Par exemple, Rouabhi et al. (2007) a proposé une loi de comportement viscoplastique permettant de décrire des essais de fluage triaxial sur l'argilite de Tournemire. (Kolari, 2007, chapitres 4 et 5) et (Gatelier, 2001, chapitres 5 et 6) ont utilisé une méthode discrète de propagation de fissures pour définir un modèle d'endommagement anisotrope pour les matériaux isotropes transverses.

Pour l'interprétation des mesures de convergence et des formes des zones endommagées autour des galeries du laboratoire souterrain de l'ANDRA, plusieurs auteurs ont mis l'accent sur l'importance de l'anisotropie intrinsèque du COx. Les travaux réalisés sur l'anisotropie d'autres roches comme l'argilite de Mont Terri (voir par exemple Marschall et al. (2006)) et de Tournemire (par exemple Noiret et al. (2011)) représentent une importante base de données. Pardoën et Collin (2016) a utilisé une méthode de localisation des déformations avec l'anisotropie des paramètres élastiques et du critère de rupture pour bien décrire les bandes de cisaillement autour des galeries. Il a aussi complété le modèle par des déformations viscoplastiques pour tenir compte des convergences à long terme. Van den Eijnden et al. (2016) a lui aussi utilisé une méthode de localisation des déformations et a montré l'importance de l'anisotropie du matériau pour mieux reproduire les observations autour des galeries parallèles à σ_H . Mánica et al. (2016) a mis en évidence l'importance de l'anisotropie des paramètres non élastiques pour décrire les formes des zones endommagées. Hauseux et al. (2016) a utilisé une méthode de calcul par éléments finis enrichis avec un critère de rupture anisotrope pour étudier la distribution des fissures autour des galeries dans une configuration 3D.

En ce qui concerne l'anisotropie induite, on trouve beaucoup de modèles qui sont définis pour les matériaux isotropes et qui sont souvent utilisés pour la caractérisation du comportement des bétons. On peut citer, par exemple, les modèles d'endommagement anisotrope de Cordebois et Sidoroff (1982); Lemaitre et al. (2000); Lemaitre et Desmorat (2005); Carol et al. (2001a); Rouabhi (2004); Rouabhi et al. (2007). Même si les développements tensoriels sont faits pour un matériau quelconque comme dans Desmorat (2000), les lois d'évolution des variables d'endommagement sont uniquement explicitées pour le cas isotrope. La définition d'un modèle semblable pour les matériaux isotropes transverses reste une question ouverte.

Dans cette thèse, nous avons cherché une nouvelle approche de modélisation qui nous permet de prendre en compte aussi bien l'anisotropie intrinsèque que celle induite tout en assurant (i) un sens physique clair des paramètres introduits, (ii) un nombre réduit de ces paramètres et (iii) une implémentation numérique facile et rapide dans les codes de calcul des structures. Dans la section 1.3, la démarche de modélisation retenue ainsi que

les différentes pistes de modélisation abandonnées sont évoquées.

Afin de couvrir les régimes de sollicitations de traction et de compression, la loi de comportement introduite dans ce travail sera composée de deux parties : une loi d'endommagement anisotrope sera utilisée pour décrire les phénomènes de traction, notamment due aux surpressions de pore, et une loi elasto-viscoplastique sera introduite pour décrire les phénomènes de compression qui se manifestent, par exemple, dans le problème de creusement des galeries souterraines. Ces deux lois de comportement seront définies pour les matériaux isotropes transverses grâce à la même approche de modélisation.

Dans le chapitre 3, l'approche est expliquée et utilisée pour construire un critère de rupture et un modèle d'endommagement anisotrope pour les matériaux anisotropes. Les modèles sont comparés aux résultats d'essais de compression triaxiale et d'essais brésiliens sur différentes roches sédimentaires. Dans le chapitre 4, le processus de modélisation est étendu pour mettre en place une loi de comportement viscoplastique avec écrouissage positif et négatif pour les matériaux isotropes transverses. Ce modèle est validé, d'abord, sur des essais de compression triaxiale et appliqué, ensuite, pour simuler le creusement des galeries du laboratoire souterrain de l'Andra. Dans le chapitre 5, les deux lois de comportement précédentes sont combinées pour fabriquer une seule loi de comportement elasto-viscoplastique. Celle-ci est utilisée pour les simulations hydromécaniques du creusement des galeries et de migration d'hydrogène dans le CO_x.

(iii) Effet de l'endommagement mécanique sur la perméabilité

On se limitera dans le cadre de ce travail à l'impact des sollicitations mécaniques sur la perméabilité car son influence sur la réponse hydromécanique du matériau est probablement prépondérante. Cette hypothèse reste, néanmoins, à vérifier dans des travaux futurs. En effet, les variations du tenseur de Biot et de la pression d'entrée peuvent également être importantes (Rahal, 2015; Leverett et al., 1941).

L'approche de modélisation de l'évolution de la perméabilité est expliquée dans la section 1.4 où nous avons eu recours à un raisonnement qualitatif inspiré de la littérature. En effet, on peut trouver plusieurs modèles qui font dépendre la perméabilité de plusieurs quantités macroscopiques : l'endommagement isotrope (Tegguer et al., 2013; Picandet et al., 2001; Gawin et al., 2002, 2003; Jason, 2004; Jason et al., 2007; Chen et al., 2014a; Souley et al., 2001), l'endommagement anisotrope (Bary et al., 2000; Chen et al., 2014b; Maleki et Pouya, 2010), les niveaux de contraintes et de déformations (Zhang, 2016; Saito, 1995; Yang, 2011; Rahal, 2015), l'ouverture des fissures (Picandet et al., 2009; Rastiello, 2013; Olivella et Alonso, 2008), la pression de confinement, la température et la pression des fluides (Zhang, 2016; Gawin et al., 2002, 2003; Chen et al., 2014a). Les détails de la relation perméabilité-endommagement introduite dans ce travail sont explicités dans la section 1.4 et dans le chapitre 5.

1.2 Cadre de la modélisation : couplage hydromécanique dans un milieu poreux

Les modèles hydromécaniques développés dans cette thèse s'inscrivent dans le cadre général des milieux poreux continus. Il convient alors de rappeler les définitions de base

avant de préciser les spécificités des lois de comportement introduites dans ce travail. Dans cette section, on commence tout d'abord par définir les équations de bilan et les lois complémentaires dans le cas d'un milieu poreux constitué d'une matrice solide (σ) et \mathcal{N}_α phases fluides (α, β, \dots) composées de \mathcal{N}_k constituants (k, l, \dots). Dans toute la suite, on considère que la température T est commune à toutes les phases.

1.2.1 Équations de bilan

Les équations de bilan de la masse sont écrites ici en se référant au mouvement de la phase solide. On définit alors la dérivée matérielle d'une fonction du milieu poreux $\varphi(\vec{x}, t)$ par $\dot{\varphi} = \partial_t \varphi + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \varphi$ où \vec{v} est la vitesse de la phase solide. Le bilan de la masse d'un constituant k dans une phase α peut alors être formulé comme suit :

$$\dot{m}_k^\alpha / J + \vec{\nabla} \cdot (\rho_\alpha (c_{k\alpha} \vec{w}^\alpha + \vec{j}_k^\alpha)) = \hat{\pi}_{k\alpha} + \pi_k^\alpha \quad (1.1)$$

où J est la jacobienne de la transformation de la phase solide, n est la porosité, S_α est le degré de saturation de la phase α vérifiant $\sum_\alpha S_\alpha = 1$, ρ_α est la masse volumique de la phase α , $c_{k\alpha}$ est la concentration de k dans α telle que $\sum_k c_{k\alpha} = 1$, $m^\alpha = J n S_\alpha \rho_\alpha$ et $m_k^\alpha = c_{k\alpha} m^\alpha$. La masse de k échangée aux frontières de la phase α avec les autres phases $\hat{\pi}_{k\alpha}$ est telle que $\sum_\alpha \hat{\pi}_{k\alpha} = 0$ et $\sum_k \hat{\pi}_{k\alpha} = \hat{\pi}_\alpha$ est la masse totale de tous les constituants échangés aux interfaces de la phase α . La masse de k créée par des réactions chimiques π_k^α est supposée connue et elle est telle que $\sum_k \pi_k^\alpha = 0$ et $\sum_\alpha \pi_k^\alpha = \pi_k$ est la masse totale de création du constituant k dans tout le milieu poreux. Quant aux vecteurs \vec{w}^α et \vec{j}_k^α , ils représentent, respectivement, les vitesses de filtration (ou de Darcy) de la phase α et de diffusion du constituant k dans la phase α avec $\sum_k \vec{j}_k^\alpha = \vec{0}$.

En sommant l'équation (1.1) pour tous les constituants dans la phase α , on peut écrire les équations de bilan de chaque phase sous la forme suivante :

$$\dot{m}^\alpha / J + \vec{\nabla} \cdot (\rho_\alpha \vec{w}^\alpha) = \hat{\pi}_\alpha \quad (1.2)$$

En faisant la somme sur toutes les phases, les équations de bilan de chaque constituant k dans tout le milieu poreux s'écrivent :

$$\left(\sum_\alpha \dot{m}_k^\alpha \right) / J + \vec{\nabla} \cdot \left(\sum_\alpha \rho_\alpha (c_{k\alpha} \vec{w}^\alpha + \vec{j}_k^\alpha) \right) = \pi_k \quad (1.3)$$

Même si cette écriture semble plus compliquée que la précédente, elle reste plus avantageuse pour la résolution numérique puisqu'elle évite de quantifier les quantités d'échange de matière aux interfaces.

Pour le problème mécanique, l'équation de bilan à considérer est celle de la quantité de mouvement. Elle s'écrit sous la forme suivante :

$$\vec{\nabla} \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \rho \vec{g} = \vec{0} \quad (1.4)$$

où $\rho = n \left(\sum_\alpha S_\alpha \rho_\alpha \right) + (1-n) \rho_\sigma$ est la densité globale du milieu poreux, $\underline{\underline{\sigma}}$ est la contrainte totale de Cauchy et \vec{g} est la densité des forces volumiques (gravité).

Arrivé à ce stade, on a défini \mathcal{N}_k équations de bilan de la masse et 3 équations pour la quantité de mouvement soit un total de $\mathcal{N}_k + 3$ équations indépendantes (on se place

dans le cas général 3D). En contre partie, on a introduit les inconnues n (1 inconnu), ρ_α (\mathcal{N}_α), \vec{u} (3), $c_{k\alpha}$ ($\mathcal{N}_\alpha(\mathcal{N}_k - 1)$), \vec{w}^α ($3\mathcal{N}_\alpha$), \vec{j}_k^α ($3\mathcal{N}_\alpha(\mathcal{N}_k - 1)$), S_α ($\mathcal{N}_\alpha - 1$) et $\underline{\underline{\sigma}}$ (6) soit un total de $4\mathcal{N}_k\mathcal{N}_\alpha + \mathcal{N}_\alpha + 9$ inconnues dont 9 inconnues pour la partie mécanique (déplacement et contraintes) et $4\mathcal{N}_k\mathcal{N}_\alpha + \mathcal{N}_\alpha$ inconnues pour la partie hydraulique. On a plus d'inconnues que d'équations et le système doit donc être fermé en définissant des équations complémentaires.

1.2.2 Lois complémentaires

Les vitesses de filtration des phases fluides sont exprimées par la loi de Darcy généralisée :

$$\vec{w}^\alpha = -\frac{k_\alpha}{\eta_\alpha} \underline{\underline{K}} \left(\vec{\nabla} p_\alpha - \rho_\alpha \vec{g} \right) \quad (1.5)$$

dans lesquelles p_α , η_α et k_α sont, respectivement, la pression, la viscosité dynamique et la perméabilité relative de la phase α . Le tenseur $\underline{\underline{K}}$ est le tenseur de perméabilité intrinsèque (indépendant des fluides qui traversent le milieu poreux) sur lequel porte le couplage avec la mécanique via une relation perméabilité-endommagement.

Les vitesses de diffusion sont données par la loi de Fick telle que :

$$\vec{j}_k^\alpha = -\underline{\underline{D}}_{k\alpha} \vec{\nabla} c_{k\alpha} \quad (1.6)$$

où $\underline{\underline{D}}_{k\alpha}$ est la diffusivité du constituant k dans la phase α dans le milieu poreux. Ce tenseur est déterminé soit expérimentalement pour le milieu poreux en question (comme dans [Rebour et al. \(1997\)](#)), soit déduit de la diffusivité $\bar{D}_{k\alpha}$ de k dans α hors milieu poreux et des caractéristiques du milieu poreux. [Grathwohl \(1998\)](#), par exemple, a utilisé la porosité dans une formule empirique de la forme $D_{k\alpha} = \bar{D}_{k\alpha} n^q$ et il a déduit que le coefficient q est généralement entre 1.8 et 2.4 pour plusieurs roches.

Les densités de chaque phase α sont données par des lois d'état qui peuvent être écrites sous la forme générique suivante :

$$\dot{\rho}_\alpha / \rho_\alpha = \chi_{p\alpha} \dot{p}_\alpha - \chi_{T\alpha} \dot{T} - \sum_{k \neq q} \chi_{k\alpha} \dot{c}_{k\alpha} \quad (1.7)$$

où q est un constituant choisi arbitrairement (ça peut être l'eau, par exemple, dans le cas d'une solution aqueuse) de telle sorte que les constituants $c_{k\alpha}$; $k \neq q$ représentent des variables indépendantes (puisque l'on sait que $\sum_k c_{k\alpha} = 1$). Dans cette équation, $\chi_{p\alpha} = \partial_p \rho_\alpha / \rho_\alpha$ est la compressibilité de la phase α à température et composition constantes, $\chi_{T\alpha} = -\partial_T \rho_\alpha / \rho_\alpha$ est le coefficient de dilatation thermique à pression et composition constantes et $\chi_{k\alpha} = \partial_{c_{k\alpha}} \rho_\alpha / \rho_\alpha$ traduit l'impact d'une variation de la concentration de k à pression, température et les concentrations autres que k et q constantes. Ces coefficients peuvent être déduites des définitions des enthalpies libres spécifiques $g_\alpha(p_\alpha, T, c_{k\alpha})$ par les relations :

$$\begin{aligned} \chi_{p\alpha} &= -\rho_\alpha \partial_{p_\alpha}^2 g_\alpha, & \chi_{T\alpha} &= \rho_\alpha \partial_{p_\alpha T}^2 g_\alpha = -\rho_\alpha \partial_{p_\alpha} s_\alpha, \\ \chi_{k\alpha} &= -\rho_\alpha \partial_{p_\alpha c_{k\alpha}}^2 g_\alpha = -\rho_\alpha \partial_{p_\alpha} (\mu_{k\alpha} - \mu_{q\alpha}) \end{aligned} \quad (1.8)$$

où s_α est l'entropie spécifique de la phase α et $\mu_{k\alpha}$ est le potentiel chimique du constituant k dans la phase α .

Par ailleurs, afin de caractériser le réseau des pores, on définit une loi d'évolution de la porosité comme suit :

$$\dot{n} = (\underline{\underline{B}} - n\underline{\underline{1}}) : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} - A_n \dot{T} + \sum_{\alpha} S_{\alpha} \dot{p}_{\alpha} / M \quad (1.9)$$

où $\underline{\underline{B}}$ est le tenseur de Biot, A_n est un coefficient de dilatation thermique et M est le module de Biot. En plus, pour définir la composition des pores, on exprime les degrés de saturation par des fonctions empiriques (appelées courbes capillaires) des pressions des différentes phases $\vec{p} = (p_{\alpha}, p_{\beta}, \dots)$ et de la température (on néglige généralement l'effet des autres variables comme les déformations et la porosité).

$$S_{\alpha} = S_{\alpha}(\vec{p}, T) \quad (1.10)$$

Pour déterminer les compositions des phases, on considère que l'équilibre chimique macroscopique entre les phases est atteint instantanément ce qui se traduit par l'égalité des potentiels chimiques. Pour un constituant k dans une phase α , il faut avoir l'équilibre chimique avec toutes les autres phases $\beta \neq \alpha$ soit :

$$\mu_{k\alpha}(p_{\alpha}, T, \vec{c}_{\alpha}) = \mu_{k\beta}(p_{\beta}, T, \vec{c}_{\beta}), \quad \forall \beta \neq \alpha \quad (1.11)$$

où \vec{c}_{α} représente le vecteur des compositions $c_{k\alpha}$. Ces équations sont donc au nombre de $\mathcal{N}_k(\mathcal{N}_{\alpha} - 1)$. Dans l'annexe A, on présente plus de détails sur la construction des fonctions thermodynamiques utilisées dans les équations (1.7) et (1.11) et surtout le rapport entre les lois d'état et les potentiels chimiques dans le cas du milieu poreux diphasique représenté dans la figure 1.1. On présentera, en particulier, un exemple de détermination des concentrations des constituants en partant d'un ensemble de lois d'état simples pour le cas du milieu poreux diphasique.

Finalement, pour définir le comportement mécanique de la phase solide, on utilise la partition des contraintes totales en contraintes effectives $\underline{\underline{\hat{\sigma}}}$ et une contrainte hydraulique issue d'une pression de pore p . Cette approche prend ses racines des travaux de Terzaghi (1923) et Biot (1941) qui ont défini la notion de contraintes effectives dans les milieux poreux saturés ce qui a été généralisé ensuite pour les milieux non saturés notamment dans les travaux de Bishop (1959) et Coussy (1991). En effet, si on adopte une écriture incrémentale, on peut définir les contraintes effectives qui régissent le comportement mécanique de la phase solide comme suit :

$$\underline{\underline{\hat{\sigma}}} = \underline{\underline{\hat{\sigma}}} + \dot{p}\underline{\underline{B}} \quad (1.12)$$

où $\underline{\underline{B}}$ est le même tenseur que dans la loi d'évolution de la porosité. En ce qui concerne la pression de pore p , elle est exprimée en fonction des différentes pressions des phases ainsi que des degrés de saturation. Le tenseur des contraintes effectives est défini par une loi de comportement mécanique indépendante des phases fluides. Dans le cas de l'élasticité, il est donné par l'expression suivante :

$$\underline{\underline{\hat{\sigma}}} = \underline{\underline{H}} : \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (1.13)$$

où $\underline{\underline{\varepsilon}}(\vec{u})$ est le tenseur des déformations (élastiques) et $\underline{\underline{H}}$ est le tenseur d'élasticité de Hooke.

Avec toutes ces définitions, tel que résumé dans le tableau 1.1, le système est maintenant complet et le nombre d'équations égalise le nombre d'inconnues. En plus, les problèmes hydraulique et mécanique sont tous les deux complets. On peut donc modifier le comportement mécanique tout seul en introduisant des variables internes sans impact sur la fermeture mathématique du problème hydromécanique complet. Il suffit de rajouter autant de lois d'évolution que de nouvelles variables internes.

TABLE 1.1 – Résumé des équations décrivant le couplage hydromécanique dans un milieu poreux avec \mathcal{N}_α phases fluides et \mathcal{N}_k constituants. \mathcal{N}_{eq} et \mathcal{N}_{in} sont, respectivement, les nombres d'équations et d'inconnues.

Équations	Nombre	Inconnues	Nombre
Équilibre mécanique (1.4)	3	$\underline{\underline{\sigma}}$	6
Partition des contraintes (1.12)	6	$\underline{\underline{\hat{\sigma}}}$	6
Loi de Hooke (1.13)	6	$\underline{\underline{u}}$	3
Total pour la mécanique : $\mathcal{N}_{eq} = \mathcal{N}_{in} = 15$			
Bilan de k (1.3)	\mathcal{N}_k	$n, S_\alpha, \rho_\alpha, c_{k\alpha}, \vec{w}^\alpha, \vec{j}_k^\alpha$	$4\mathcal{N}_k\mathcal{N}_\alpha + \mathcal{N}_\alpha$
Lois de Darcy (1.5)	$3\mathcal{N}_\alpha$	p_α	\mathcal{N}_α
Lois de Fick (1.6)	$3\mathcal{N}_\alpha(\mathcal{N}_k - 1)$	-	0
Lois d'état (1.7)	\mathcal{N}_α	-	0
Échange aux interfaces (1.11)	$\mathcal{N}_k(\mathcal{N}_\alpha - 1)$	-	0
Courbes capillaires (1.10)	$\mathcal{N}_\alpha - 1$	-	0
Porosité (1.9)	1	-	0
Total pour l'hydraulique : $\mathcal{N}_{eq} = \mathcal{N}_{in} = 4\mathcal{N}_k\mathcal{N}_\alpha + 2\mathcal{N}_\alpha$			

1.3 Anisotropies initiale et induite

La question principale posée dans ce travail est de comment prendre en compte, au même temps, l'anisotropie intrinsèque du matériau et celle induite par un endommagement. Que ce soit pour le comportement mécanique ou pour la définition de la perméabilité fonction de l'endommagement, les lois de comportement introduites doivent respecter un minimum de restrictions concernant la symétrie du matériau : elles doivent rester inchangées en variant le repère d'observation. Concentrons nous, tout d'abord, sur la partie mécanique et laissons la définition de la relation perméabilité-endommagement pour la section suivante. Le but est d'exprimer le tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$ en fonction du tenseur des déformations $\underline{\underline{\varepsilon}}$, de l'anisotropie initiale et de l'anisotropie induite. Puisque dans ce travail, on se limite à l'isotropie transverse, l'anisotropie initiale peut être totalement caractérisée par le tenseur de schistosité $\underline{\underline{e}} = \vec{e} \otimes \vec{e}$ où \vec{e} est un vecteur unitaire normal à la schistosité. En ce qui concerne, l'anisotropie induite, elle est représentée par un tenseur d'endommagement $\underline{\underline{\omega}}$. La définition d'une loi de comportement $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\underline{e}}, \underline{\underline{\omega}})$ doit respecter l'isotropie du tenseur des contraintes par rapport à ses arguments c'est-à-dire :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{Q\varepsilon Q^t}}, \underline{\underline{QeQ^t}}, \underline{\underline{Q\omega Q^t}}) = \underline{\underline{Q\sigma(\varepsilon, e, \omega)Q^t}} \quad \forall \underline{\underline{Q}} \text{ tenseur orthonormal} \quad (1.14)$$

La détermination d'une expression générale de $\underline{\underline{\sigma}}$ peut passer par l'utilisation du théorème de la représentation (voir par exemple (Truesdell et Noll, 2004, part B)) qui, si on suppose que $\underline{\underline{\sigma}}$ est linéaire par rapport à $\underline{\underline{\varepsilon}}$, nous donne la forme générale suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\underline{e}}, \underline{\underline{\omega}}) = \sum_{k=1}^{12} \alpha_k (\underline{\underline{A}}_k + \underline{\underline{A}}_k^t) + \sum_{k=1}^6 \beta_k (\underline{\underline{B}}_k + \underline{\underline{B}}_k^t) \quad (1.15)$$

où

- α_k sont des fonctions quelconques des 5 invariants $\text{tr}(\underline{\underline{\omega}})$, $\text{tr}(\underline{\underline{e}}\underline{\underline{\omega}})$, $\text{tr}(\underline{\underline{\omega}}^2)$, $\text{tr}(\underline{\underline{\omega}}^3)$ et $\text{tr}(\underline{\underline{e}}\underline{\underline{\omega}}^2)$;
- β_k sont des fonctions linéaires des 7 invariants $\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}})$, $\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{e}})$, $\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{\omega}})$, $\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{e}}\underline{\underline{\omega}})$, $\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{\omega}}^2)$, $\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{e}}\underline{\underline{\omega}}^2)$ et $\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{\omega}}^2\underline{\underline{e}})$;
- $\underline{\underline{A}}_k$ sont parmi les 12 monômes $\underline{\underline{\varepsilon}}$, $\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{e}}$, $\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{\omega}}$, $\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{e}}\underline{\underline{\omega}}$, $\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{\omega}}\underline{\underline{e}}$, $\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{\omega}}$, $\underline{\underline{\omega}}^2\underline{\underline{\varepsilon}}$, $\underline{\underline{\omega}}^2\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{e}}$, $\underline{\underline{\omega}}^2\underline{\underline{e}}\underline{\underline{\varepsilon}}$, $\underline{\underline{e}}\underline{\underline{\omega}}^2\underline{\underline{\varepsilon}}$, $\underline{\underline{\omega}}\underline{\underline{e}}\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{\omega}}^2$ et $\underline{\underline{\omega}}\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{e}}\underline{\underline{\omega}}^2$;
- $\underline{\underline{B}}_k$ sont parmi les 6 monômes $\underline{\underline{1}}$, $\underline{\underline{e}}$, $\underline{\underline{\omega}}$, $\underline{\underline{e}}\underline{\underline{\omega}}$, $\underline{\underline{\omega}}^2$ et $\underline{\underline{\omega}}^2\underline{\underline{e}}$.

Une telle expression est trop générale et mérite d'être simplifiée tout en respectant la restriction (1.14). Dans ce qui suit, on va montrer, dans un premier temps, comment on peut utiliser le théorème de la représentation pour retrouver les tenseurs d'élasticité. Par la suite, on présentera des idées de modélisation qui ont été testées mais finalement rejetées (sous-sections 1.3.2 et 1.3.3) et enfin on va expliquer l'approche de modélisation retenue dans la thèse (sous-sections 1.3.4 à 1.3.6).

1.3.1 Tenseurs d'élasticité isotrope et isotrope transverse

Lorsqu'on considère un matériau élastique non endommagé (dans notre cas $\underline{\underline{\omega}} = \underline{\underline{1}}$), le tenseur des contraintes devient une fonction isotrope des tenseurs des déformations et de la schistosité. L'équation (1.15) se réduit alors à la forme suivante (voir Boehler (1986)) :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\underline{e}}) = c_1 \text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}})\underline{\underline{1}} + c_2 \underline{\underline{\varepsilon}} + c_3 \text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{e}})\underline{\underline{e}} + c_4 (\text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{e}})\underline{\underline{1}} + \text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}})\underline{\underline{e}}) + c_5 (\underline{\underline{\varepsilon}}\underline{\underline{e}} + \underline{\underline{e}}\underline{\underline{\varepsilon}}) \quad (1.16)$$

où c_i sont des constantes réelles. Dans cette équation, on a utilisé le fait que $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\underline{e}})$ (en tant qu'endomorphisme) doit être symétrique par rapport à $\underline{\underline{\varepsilon}}$ (ce qui se traduit par la symétrie majeure du tenseur d'élasticité) pour rassembler les deux termes correspondant au coefficient c_4 . Si on identifie cette expression à la forme tensorielle $\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{H}} : \underline{\underline{\varepsilon}}$, on peut facilement déduire l'expression du tenseur d'élasticité $\underline{\underline{H}}$ comme suit :

$$\underline{\underline{H}} = c_1(\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}}) + c_2(\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{\varepsilon}}) + c_3(\underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{e}}) + c_4(\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{e}} + \underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{1}}) + c_5(\underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{e}}) \quad (1.17)$$

Afin d'expliciter les coefficients de ce tenseur, il est plus commode de raisonner en terme de tenseur de souplesse $\underline{\underline{H}}^{-1}$ qui peut s'écrire sous une forme équivalente :

$$\underline{\underline{H}}^{-1} = h_1(\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}}) + h_2(\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{\varepsilon}}) + h_3(\underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{e}}) + h_4(\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{e}} + \underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{1}}) + h_5(\underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{e}}) \quad (1.18)$$

Dans ce cas, on peut retrouver les coefficients h_i en fonction des modules de Young dans le plan de schistosité E et perpendiculaire au plan de schistosité E' , des coefficients de

Poisson dans le plan de schistosité ν et perpendiculaire au plan de schistosité ν' et du module de cisaillement perpendiculaire au plan de schistosité G tels que donnés par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} h_1 &= -\nu/E, & h_2 &= (1+\nu)/E, & h_3 &= 1/E + (1+2\nu')/E' - 1/G, \\ h_4 &= \nu/E - \nu'/E', & h_5 &= 1/(2G) - (1+\nu)/E \end{aligned} \quad (1.19)$$

La définition des modules élastiques est plus claire lorsque le tenseur de souplesse est écrit sous la forme matricielle classique. En effet, en notant $\underline{\underline{\sigma}} = (\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sqrt{2}\sigma_{12}, \sqrt{2}\sigma_{13}, \sqrt{2}\sigma_{23})^t$ et $\underline{\underline{\varepsilon}} = (\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, \sqrt{2}\varepsilon_{12}, \sqrt{2}\varepsilon_{13}, \sqrt{2}\varepsilon_{23})^t$ et en choisissant $\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}_3$, on peut écrire que $\underline{\underline{\varepsilon}} = H^{-1}\underline{\underline{\sigma}}$ où la matrice H^{-1} est donnée par l'expression suivante :

$$H^{-1} = \begin{pmatrix} 1/E & -\nu/E & -\nu'/E' & 0 & 0 & 0 \\ -\nu/E & 1/E & -\nu'/E' & 0 & 0 & 0 \\ -\nu'/E' & -\nu'/E' & 1/E' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (1+\nu)/E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/(2G) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/(2G) \end{pmatrix} \quad (1.20)$$

Dans le cas isotrope, l'expression de la matrice d'élasticité s'obtient en choisissant $E = E'$, $\nu = \nu'$ et $G = E/(2(1+\nu))$. Il vient $h_3 = h_4 = h_5 = 0$, $c_3 = c_4 = c_5 = 0$, $c_1 = \lambda$ et $c_2 = 2\mu$ où $\lambda = E\nu/((1+\nu)(1-2\nu))$ et $\mu = G = E/(2(1+\nu))$ sont les coefficients de Lamé.

1.3.2 Modèle d'endommagement étendu des matériaux isotropes

Plusieurs auteurs ont défini des lois d'endommagement anisotrope pour les matériaux isotropes (par exemple Cordebois et Sidoroff (1982); Lemaitre et al. (2000); Lemaitre et Desmorat (2005); Carol et al. (2001a); Rouabhi (2004)) et ont utilisé la notion de contraintes effectives dans le matériau intacte $\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}$ (à ne pas confondre avec celles en poromécanique qu'on note dans cette thèse $\underline{\underline{\hat{\sigma}}}$) par une équation de type :

$$\underline{\underline{\tilde{\sigma}}} = \underline{\underline{\omega}}^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{\omega}}^{\frac{1}{2}} \quad (1.21)$$

ce qui équivaut à $\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{M}}(\underline{\underline{\omega}}) : \underline{\underline{\tilde{\sigma}}}$ avec $\underline{\underline{M}}(\underline{\underline{\omega}}) = \underline{\underline{\omega}}^{-\frac{1}{2}} \underline{\underline{\otimes}} \underline{\underline{\omega}}^{-\frac{1}{2}}$. Lorsque l'équivalence de l'énergie élastique entre le matériau endommagé et le matériau sain (effectif) est choisie ($\underline{\underline{\tilde{\sigma}}} : \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}} = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}}$) et sachant que $\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{H}}(\underline{\underline{\omega}}) : \underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{\tilde{\sigma}}} = \underline{\underline{H}}(\underline{\underline{1}}) : \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}$, on peut exprimer les tenseurs des déformations et d'élasticité par les relations suivantes :

$$\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}} = \underline{\underline{M}}(\underline{\underline{\omega}}) : \underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\omega}}^{-\frac{1}{2}} \underline{\underline{\varepsilon}} \underline{\underline{\omega}}^{-\frac{1}{2}} \text{ et } \underline{\underline{H}}(\underline{\underline{\omega}}) = \underline{\underline{M}}(\underline{\underline{\omega}}) \underline{\underline{H}}(\underline{\underline{1}}) \underline{\underline{M}}(\underline{\underline{\omega}}) \quad (1.22)$$

soit :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{H}}(\underline{\underline{\omega}}) &= \lambda \underline{\underline{\omega}}^{-1} \underline{\underline{\otimes}} \underline{\underline{\omega}}^{-1} + 2\mu \underline{\underline{\omega}}^{-1} \underline{\underline{\otimes}} \underline{\underline{\omega}}^{-1} \\ \underline{\underline{H}}^{-1}(\underline{\underline{\omega}}) &= -\frac{\nu}{E} \underline{\underline{\omega}} \underline{\underline{\otimes}} \underline{\underline{\omega}} + \frac{1+\nu}{E} \underline{\underline{\omega}} \underline{\underline{\otimes}} \underline{\underline{\omega}} \end{aligned} \quad (1.23)$$

Une fois arrivé à ce stade, la première idée qui vient à l'esprit est de suivre la même démarche pour un matériau isotrope transverse *i.e.* de continuer à utiliser les équations

(1.21) et (1.22). On obtient l'expression suivante du tenseur endommagé

$$\begin{aligned}
 \tilde{H}(\underline{\omega}) &= c_1(\underline{\omega}^{-1} \otimes \underline{\omega}^{-1}) + c_2(\underline{\omega}^{-1} \underline{\otimes} \underline{\omega}^{-1}) \\
 &+ c_3(\underline{\omega}^{-1} \otimes (\underline{\omega}^{-\frac{1}{2}} \underline{e} \underline{\omega}^{-\frac{1}{2}})) + (\underline{\omega}^{-\frac{1}{2}} \underline{e} \underline{\omega}^{-\frac{1}{2}}) \otimes \underline{\omega}^{-1} \\
 &+ c_4(\underline{\omega}^{-1} \underline{\otimes} (\underline{\omega}^{-\frac{1}{2}} \underline{e} \underline{\omega}^{-\frac{1}{2}})) + (\underline{\omega}^{-\frac{1}{2}} \underline{e} \underline{\omega}^{-\frac{1}{2}}) \underline{\otimes} \underline{\omega}^{-1} \\
 &+ c_5((\underline{\omega}^{-\frac{1}{2}} \underline{e} \underline{\omega}^{-\frac{1}{2}}) \otimes (\underline{\omega}^{-\frac{1}{2}} \underline{e} \underline{\omega}^{-\frac{1}{2}}))
 \end{aligned} \tag{1.24}$$

Bien que ce calcul soit explicite, cette méthode est trop compliquée à utiliser lorsqu'il s'agit de définir une loi d'évolution de $\underline{\omega}$. En effet, on sera amené à passer par la dérivée de la matrice d'élasticité par rapport au tenseur d'endommagement ce qui complique les calculs. C'est pour cette raison que cette piste de modélisation a été abandonnée.

1.3.3 L'anisotropie en tant qu'endommagement initial

Une deuxième idée de modélisation testée est de considérer l'anisotropie naturelle ($\tilde{H}(\underline{1})$) comme un endommagement orienté sur un matériau initialement isotrope ($\tilde{H}(\underline{\omega})$). Dans ce cas, lorsqu'on considère un matériau isotrope transverse, cet endommagement doit respecter la symétrie du matériau et donc doit être de la forme $\underline{\omega} = \omega_1 \underline{e} + \omega_2 (\underline{1} - \underline{e})$. Avec ces considérations et en utilisant l'équation (1.23), on retrouve l'expression suivante du tenseur d'élasticité endommagé :

$$\begin{aligned}
 \tilde{H}^{-1}(\underline{\omega}) &= -\frac{\bar{\nu}}{\bar{E}} \omega_2^2 (\underline{1} \otimes \underline{1}) + \frac{1 + \bar{\nu}}{\bar{E}} \omega_2^2 (\underline{1} \underline{\otimes} \underline{1}) + -\frac{\bar{\nu}}{\bar{E}} (\omega_1 \omega_2 - \omega_2^2) (\underline{1} \otimes \underline{e} + \underline{e} \otimes \underline{1}) \\
 &+ \frac{1 + \bar{\nu}}{\bar{E}} (\omega_1 \omega_2 - \omega_2^2) (\underline{e} \underline{\otimes} \underline{1} + \underline{1} \underline{\otimes} \underline{e}) + \frac{1}{\bar{E}} (\omega_1 - \omega_2)^2 (\underline{e} \otimes \underline{e})
 \end{aligned} \tag{1.25}$$

où on a noté \bar{E} et $\bar{\nu}$ les paramètres élastiques du matériau isotrope. Puisque $\tilde{H}(\underline{\omega})$ s'écrit sous la même forme que celle d'un tenseur d'élasticité d'un matériau isotrope transverse (1.18), on peut déduire, par identification ($\tilde{H}(\underline{1}) = \tilde{H}(\underline{\omega})$), les modules élastiques correspondant à cet état endommagé comme suit :

$$\begin{aligned}
 E &= \bar{E} / \omega_1^2, & E' &= \bar{E} / \omega_2^2, & \nu &= \bar{\nu}, & \nu' &= \bar{\nu} (\omega_2 / \omega_1), \\
 G &= \bar{E} / (2(1 + \bar{\nu}) \omega_1 \omega_2)
 \end{aligned} \tag{1.26}$$

Malheureusement ce système d'équations ne peut pas être inversé puisque le matériau isotrope transverse est caractérisé par 5 paramètres (E, E', ν, ν', G) alors que le matériau isotrope endommagé est défini par seulement 4 paramètres ($\bar{E}, \bar{\nu}, \omega_1, \omega_2$). Le matériau isotrope endommagé ne représente, en effet, qu'un cas particulier des matériaux isotropes transverse qui vérifient la relation $E\nu^2 = E'\nu'^2$. Comme cette relation n'est généralement pas vérifiée pour les roches sédimentaires, cette approche de modélisation a été aussi abandonnée.

1.3.4 Approche d'équivalence entre isotropie et isotropie transverse

L'approche de modélisation retenue est basée sur l'idée d'une équivalence entre le matériau isotrope transverse réel et un matériau isotrope fictif. Ce type d'approche a été utilisée

par Car et al. (2001) pour définir un modèle élastoplastique en grandes déformations pour les matériaux isotropes transverses et par Rouabhi et al. (2007) pour définir une loi de comportement viscoplastique et un critère de rupture pour ce type de matériaux. Les tenseurs des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$, des déformations $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et d'élasticité $\underline{\underline{H}}$ du matériau réel sont reliés à ceux du matériau isotrope fictif $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$, $\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}$ et $\underline{\underline{\bar{H}}}$, respectivement, par des relations d'équivalence qui sont inspirées de celles d'un modèle d'endommagement (équations (1.21) et (1.22)). En effet, on définit un tenseur d'ordre quatre $\underline{\underline{L}}$ qui relie les contraintes réelles et fictives tel que :

$$\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\sigma}} \quad (1.27)$$

Ensuite, en supposant qu'il y a une équivalence énergétique entre les deux matériaux ($\underline{\underline{\bar{\sigma}}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}} = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}}$) et sachant que $\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{H}} : \underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \underline{\underline{\bar{H}}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}$, on déduit les relations suivantes :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}} \text{ et } \underline{\underline{\bar{H}}} = \underline{\underline{L}} \underline{\underline{H}} \underline{\underline{L}} \quad (1.28)$$

Lorsque les matériaux considérés sont élastiques (pas d'endommagement), on montre que le tenseur $\underline{\underline{L}}$ est isotrope transverse et on arrive à exprimer analytiquement ses coefficients en fonction des paramètres élastiques réels (E, E', ν, ν', G) et fictifs ($\bar{E}, \bar{\nu}$). Ce travail est expliqué dans le chapitre 3 et rappelé dans les chapitres 4 et 5. Lorsqu'il s'agit maintenant d'un matériau élastique endommageable, on continue à utiliser la même expression du tenseur $\underline{\underline{L}}$ telle que :

$$\underline{\underline{H}}^{-1}(\underline{\underline{\omega}}, \underline{\underline{e}}) = \underline{\underline{L}}(\underline{\underline{e}}) \underline{\underline{\bar{H}}}^{-1}(\underline{\underline{\omega}}) \underline{\underline{L}}(\underline{\underline{e}}) \quad (1.29)$$

où on a fait apparaître le tenseur de schistosité $\underline{\underline{e}}$ intentionnellement pour montrer que cette approche de modélisation peut être vue comme une séparation des variables d'anisotropie : l'anisotropie naturelle est portée par le tenseur d'équivalence $\underline{\underline{L}}$ alors que l'anisotropie induite est due au comportement du matériau isotrope équivalent $\underline{\underline{\bar{H}}}$. Quant à la définition de $\underline{\underline{\bar{H}}}(\underline{\underline{\omega}})$ et la loi dévolution de $\underline{\underline{\omega}}$ il suffit de faire appel à un modèle existant pour les matériaux isotropes dans la littérature. Dans cette thèse, le modèle défini par Rouabhi (2004); Rouabhi et al. (2005) est sélectionné : la définition du tenseur d'élasticité endommagé est la même que dans les équations (1.21,1.22,1.23) en remplaçant $\underline{\underline{\sigma}}$, $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{H}}$ par $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$, $\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}$ et $\underline{\underline{\bar{H}}}$, respectivement, et la loi d'évolution est rappelée dans les chapitres 3 et 5.

La figure 1.2 résume les différentes étapes de modélisation ainsi que les principales équations utilisées. On distingue trois matériaux différents : le matériau anisotrope endommagé (deux anisotropies $\underline{\underline{\omega}}$ et $\underline{\underline{e}}$), le matériau isotrope endommagé (une seule anisotropie $\underline{\underline{\omega}}$) et le matériau isotrope sain (aucune anisotropie). L'utilisation des deux tenseurs $\underline{\underline{L}}(\underline{\underline{e}})$ et $\underline{\underline{M}}(\underline{\underline{\omega}})$ s'accomplit selon deux étapes successives : d'abord, le traitement de l'anisotropie initiale, puis, le traitement de l'anisotropie induite.

Il est important de noter que tous les développements faits dans cette section restent valables lorsqu'on considère des déformations non élastiques $\underline{\underline{\varepsilon}}_{ne}$: il suffit de remplacer le tenseur des déformations totales $\underline{\underline{\varepsilon}}$ par le tenseur des déformations élastiques $\underline{\underline{\varepsilon}}_e = \underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}_{ne}$. C'est ainsi qu'on a défini un modèle viscoplastique pour les matériaux isotropes transverses dans le chapitre 4 et un modèle viscoplastique avec endommagement dans le chapitre 5.

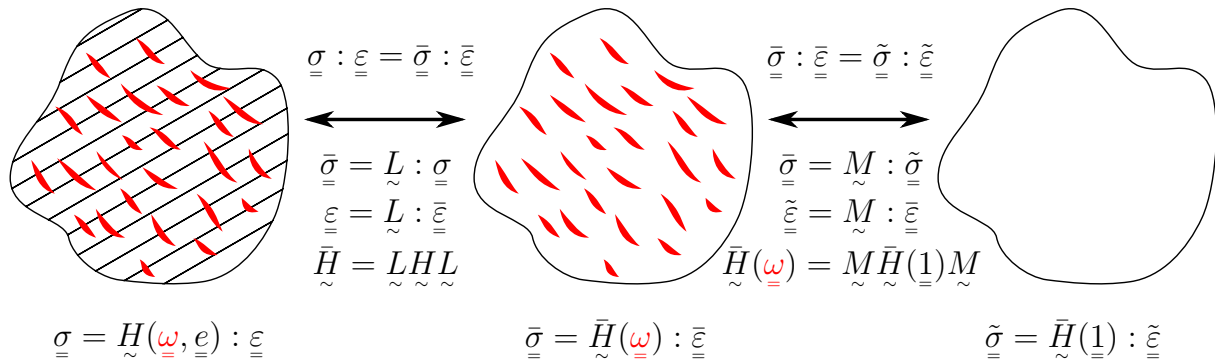


FIGURE 1.2 – Schéma explicatif du modèle de comportement tenant en compte des anisotropies initiale et induite

La figure 1.3 montre la réponse du modèle sur un essai uniaxial avec des changements de régime de sollicitation (traction et compression) et avec trois différents angles de schistosités. On peut aussi voir dans cette figure que le choix de $\underline{\omega}$ est fait de telle sorte que l'endommagement soit activé en traction (les contraintes de traction sont comptées négatives dans cette illustration) et désactivé en compression (recouvrance de la rigidité initiale au passage de la traction vers la compression).

Par ailleurs, le fait d'utiliser cette approche de modélisation nous permet d'obtenir directement des critères de rupture fonction de la schistosité (anisotropie non élastique). Il suffit de considérer une fonction de charge pour le matériau isotrope fictif $\bar{F}(\underline{\bar{\sigma}})$ et d'en déduire une nouvelle fonction pour le matériau isotrope transverse :

$$F(\underline{\sigma}) = \bar{F}(\underline{\bar{\sigma}}) \quad (1.30)$$

Dans le chapitre 3, cette idée est utilisée pour adapter le critère de Drucker-Prager aux matériaux isotropes transverses et a été appliquée pour plusieurs roches sédimentaires. La figure 1.4 montre un exemple de calage de ce critère sur des mesures faites par Rejeb (1999) sur l'argilite de Tournemire. Dans les chapitres 4 et 5, une fonction de charge du type Drucker-Prager a été modifiée pour avoir une section déviatorique non circulaire et a été utilisée comme critère de rupture dans le modèle viscoplastique ce qui nous a permis de tenir compte à la fois des anisotropies élastiques et non élastiques dans les calculs de creusement des galeries.

1.3.5 Modèle de comportement endommagement-viscoplasticité

Lorsqu'il s'agit du cas général avec des déformations non élastiques et en présence de fluides interstitielles, on remplace $\underline{\sigma}$ par $\underline{\hat{\sigma}}$ et $\underline{\varepsilon}$ par $\underline{\varepsilon}_e$ dans les développements précédents. Dans sa version finale, le modèle de comportement introduit dans cette thèse peut être résumé dans l'encadré suivant :

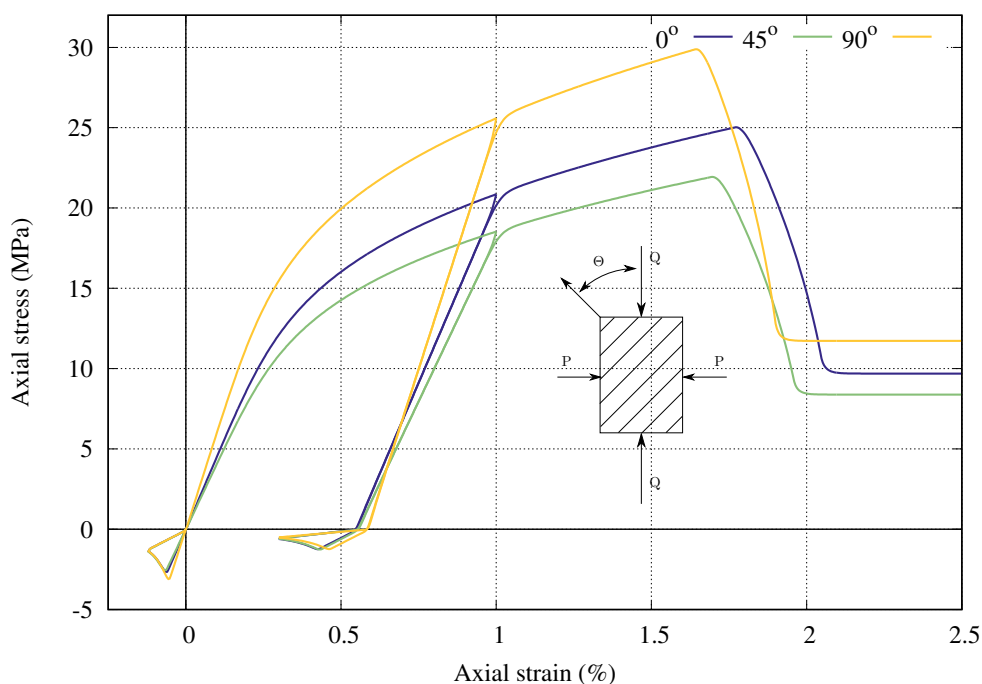


FIGURE 1.3 – Réponse du modèle sur un essai uniaxial avec des changements de régimes de sollicitation (traction et compression) et avec trois différents angles de schistosité

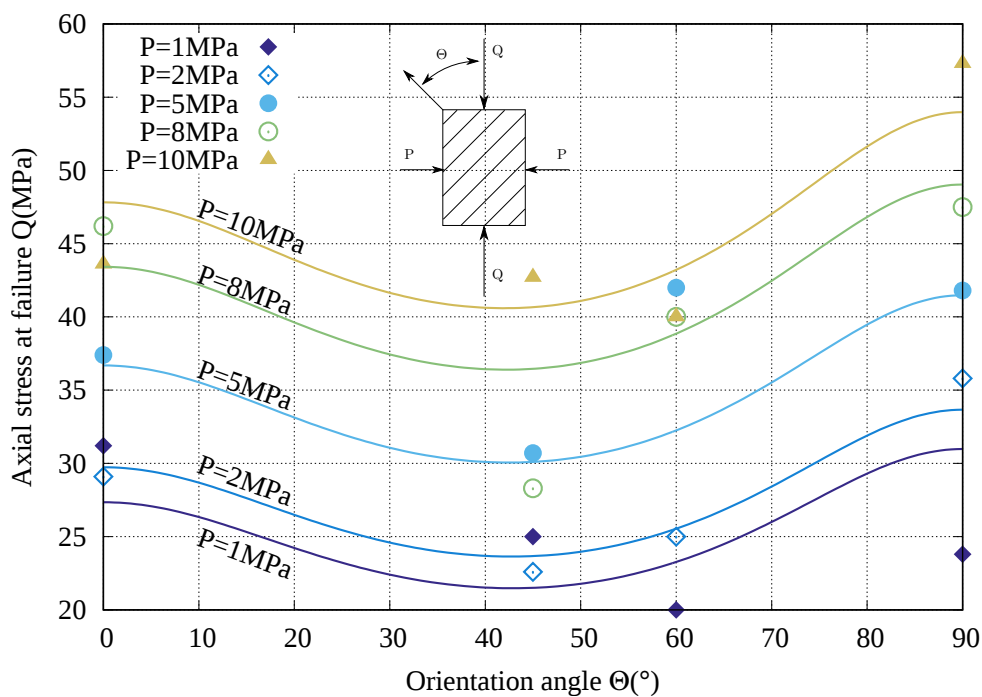


FIGURE 1.4 – Calage du critère de Drucker-Prager adapté aux matériaux isotropes transverses sur des mesures obtenues par Rejeb (1999) sur l'argilite de Tournemire

Résumé du modèle de comportement endommagement-viscoplasticité : ^a

$$\underline{\hat{\sigma}} = \underline{\tilde{H}}(\underline{\omega}) : (\underline{\varepsilon} - \underline{\varepsilon}_{vp}) \quad \overset{\underline{L}}{\iff} \quad \underline{\bar{\sigma}} = \underline{\bar{H}}(\underline{\omega}) : (\underline{\bar{\varepsilon}} - \underline{\bar{\varepsilon}}_{vp})$$

Modèle d'endommagement :

$$\begin{aligned} \underline{\bar{H}}^{-1}(\underline{\omega}) &= -\frac{\bar{\nu}}{\underline{E}} \underline{\omega} \otimes \underline{\omega} + \frac{1 + \bar{\nu}}{\underline{E}} \underline{\omega} \underline{\otimes} \underline{\omega} \\ \underline{\omega} &= \underline{1} + \underline{P}(\underline{\hat{\omega}} - \underline{1})\underline{P}, \quad \underline{P} = \sum_{k=1}^3 \mathcal{H}(\bar{\varepsilon}_k) \vec{n}_k \otimes \vec{n}_k \\ \underline{\dot{\lambda}} &= 2\underline{\hat{\omega}}^{-\frac{1}{2}} \underline{\dot{\hat{\omega}}} \underline{\hat{\omega}}^{-\frac{1}{2}} = \sum_{k=1}^3 \dot{\lambda}(a_k) \vec{n}_k \otimes \vec{n}_k, \\ \dot{\lambda}(x) &= v_d \left[1 - \exp \left(- \left\langle \frac{x}{R_d} - 1 \right\rangle^{n_d} \right) \right] \end{aligned} \quad (1.31)$$

Modèle viscoplastique :

$$\begin{aligned} \underline{\varepsilon}_{vp} &= \underline{L} : \underline{\bar{\varepsilon}}_{vp} \quad \text{avec} \quad \underline{\dot{\varepsilon}}_{vp} = A \left\langle \frac{F(\underline{\bar{\sigma}}, \xi)}{F_0} \right\rangle^{n_c} \partial_{\underline{\bar{\sigma}}} G(\underline{\bar{\sigma}}, \xi) \\ F(\underline{\bar{\sigma}}, \xi) &= \bar{q} / \varrho(\bar{\theta}) - 3\alpha \bar{p} - R(\xi), \quad G(\underline{\bar{\sigma}}, \xi) = \bar{q} - 3\beta(\xi) \bar{p} \end{aligned}$$

a. Il est important de noter que même si on ne change pas la notation des contraintes du matériau isotrope équivalent, il s'agit aussi de contraintes effectives puisque $\underline{\bar{\sigma}} = \underline{L} : \underline{\hat{\sigma}}$.

dans lequel :

- a_k et \vec{n}_k sont, respectivement, les valeurs et vecteurs propres du tenseur $\underline{a} = \frac{1}{2} \langle \underline{\bar{\sigma}} \rangle \langle \underline{\bar{\varepsilon}} \rangle$ où, pour tout tenseur \underline{x} , $\langle \underline{x} \rangle$ représente sa partie positive ;
- v_d , R_d et n_d sont les paramètres du modèle d'endommagement ;
- $\underline{\hat{\omega}}$ représente le tenseur d'endommagement dit permanent puisqu'il mémorise l'état d'endommagement lorsque la sollicitation passe de la traction vers la compression. Il convient de noter qu'il y a un conflit de notations par rapport au chapitre 3 dans lequel $\underline{\hat{\omega}}$ est noté $\underline{\omega}$ et $\underline{\omega}$ est noté $\underline{\omega}^{ac}$. Il a été préféré de changer les notations au cours de la thèse pour que le tenseur d'endommagement utilisé dans la loi de Hooke soit noté $\underline{\omega}$ et non pas $\underline{\omega}^{ac}$.
- $\bar{p} = -\text{tr}(\underline{\bar{\sigma}})/3$ est la contrainte moyenne ;
- $\bar{q} = \sqrt{\frac{3}{2} \underline{\bar{\sigma}}' : \underline{\bar{\sigma}}'}$ est le déviateur des contraintes ;
- $\cos(3\bar{\theta}) = 3\sqrt{6} \det(\underline{\bar{\sigma}}' / \|\underline{\bar{\sigma}}'\|)$ où $\bar{\theta}$ est l'angle de Lode ;
- $\varrho(\bar{\theta}) = I(-1)/I(\cos(3\bar{\theta}))$ est une fonction qui définit la section déviatorique de la fonction de charge dans laquelle $I(x) = \cos(\chi_2\pi/6 - \arccos(\chi_1 x)/3)$ et $(\chi_1, \chi_2) \in [0, 1] \times [0, 2]$ sont des paramètres du modèle (voir [Bigoni et Piccolroaz \(2004\)](#)) ;
- n_c , A et F_0 sont des paramètres du modèle ;
- ξ est une variable d'érouissage définie par $\dot{\xi} = \sqrt{\frac{2}{3}} \|\underline{\dot{\varepsilon}}'_{vp}\|$;
- α est un paramètre du modèle et les fonctions $\beta(\xi)$ et $R(\xi)$ sont définies par les

expressions suivantes :

$$\begin{aligned}
 \text{pour } \xi \leq \xi_p : & \quad \beta(\xi) = \beta_0 + (\beta_p - \beta_r)(\xi/\xi_p) \\
 & \quad R(\xi) = R_0 + (R_p - R_r)(\xi/\xi_p)^m \\
 \text{pour } \xi_p < \xi \leq \xi_r : & \quad \beta(\xi) = \beta_p + (\beta_r - \beta_p)(\xi - \xi_p)/(\xi_r - \xi_p) \\
 & \quad R(\xi) = R_p + (R_r - R_p)(\xi - \xi_p)/(\xi_r - \xi_p) \\
 \text{pour } \xi > \xi_r : & \quad \beta(\xi) = \beta_r \\
 & \quad R(\xi) = R_r
 \end{aligned}$$

- ξ_p , ξ_r , β_0 , β_p , β_r , R_0 , R_p , R_r et m sont des constantes du matériau et, enfin, les paramètres ξ_p et ξ_r sont des valeurs spécifiques de ξ qui délimitent la phase d'écroutissage positif pre-pic, la phase d'écroutissage négatif post-pic et la phase résiduelle.

Au total, le modèle est caractérisé par 19 paramètres : 3 pour l'anisotropie induite, 14 pour le modèle viscoplastique sans endommagement orienté et 2 pour la transformation isotropie-isotropie transverse (\bar{E} et $\bar{\nu}$).

La figure 1.5 illustre un exemple de simulations d'essais brésiliens réalisées pour plusieurs roches sédimentaires et plusieurs orientations. Les résultats des calculs comparés à des mesures expérimentales effectuées par [Cho et al. \(2012\)](#) sont présentés en détail dans le chapitre 3.

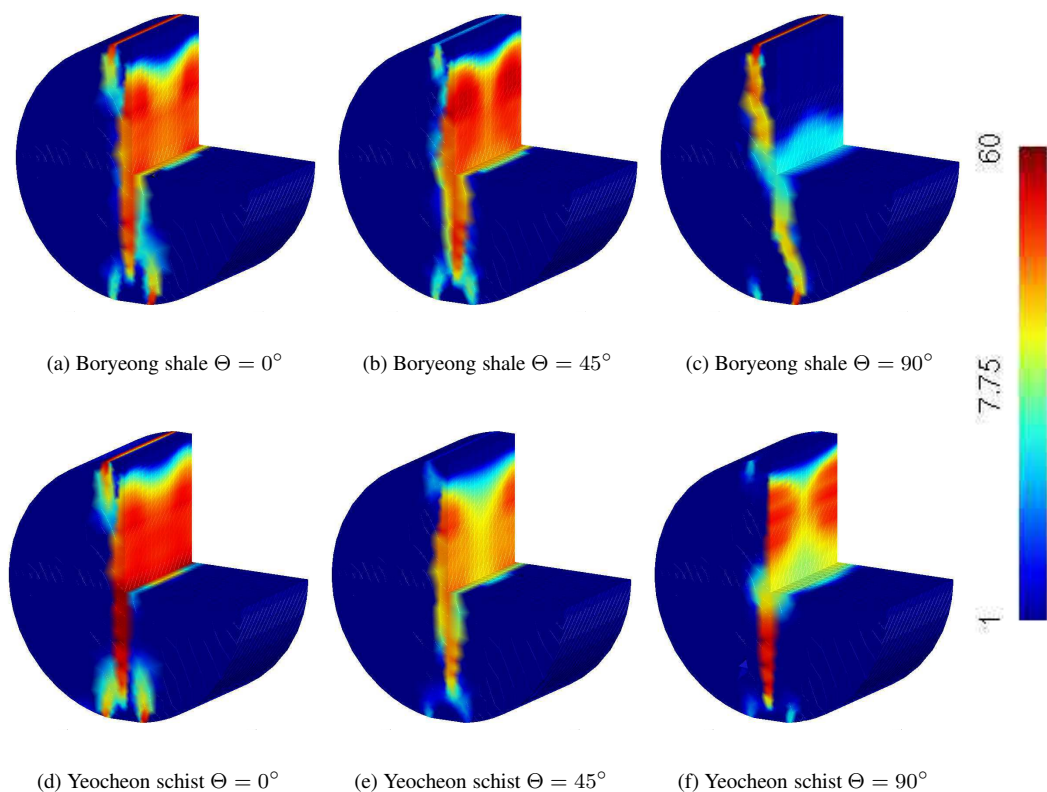


FIGURE 1.5 – Carte de l'endommagement (valeur propre principale ω_1) à la fin des simulations d'un ensemble essais brésiliens sur plusieurs roches ([Cho et al., 2012](#)) avec plusieurs orientations.

La figure 1.6 montre un exemple de calage des paramètres viscoplastiques sur des essais

de compression triaxiale réalisés par Zhang (2016). Le modèle est capable de prendre en compte non seulement les phénomènes d'écroissements positif et négatif, de contractance et de dilatance mais aussi la dépendance de la réponse par rapport au temps physique. En effet, pendant ces essais, des paliers de déplacement constants ont été imposés pour permettre de déterminer la perméabilité de l'échantillon ce qui implique qu'un phénomène de relaxation a eu lieu *i.e.* une baisse de la contrainte axiale à déformation axiale constante. Ce phénomène est clair dans la figure 1.6 (droite) que ce soit pour les mesures expérimentales ou les résultats des calculs. On retrouve dans le chapitre 4 plus de détails sur les paramètres du matériau ainsi que des comparaisons avec d'autres mesures expérimentales.

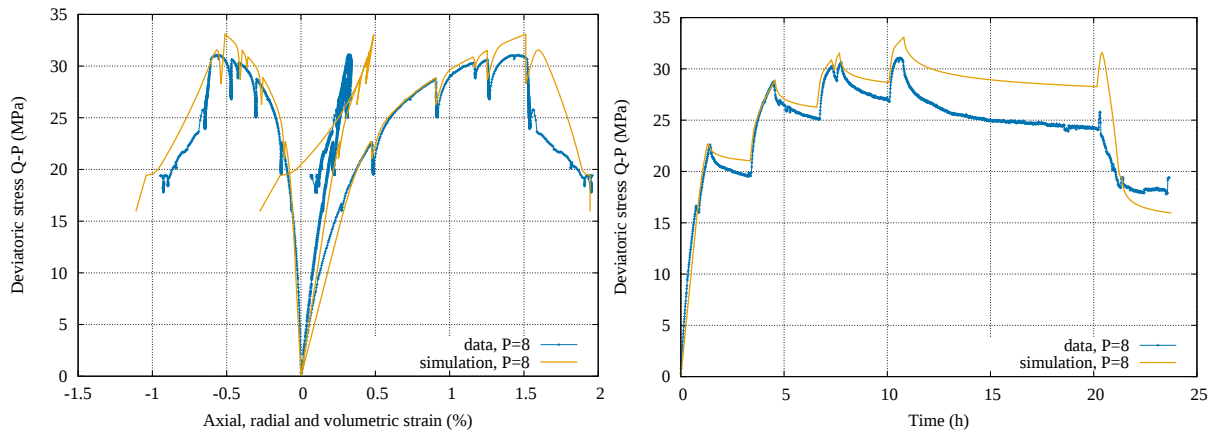


FIGURE 1.6 – Exemple de calage de la loi de comportement viscoplastique sur des données expérimentales provenant de Zhang (2016) : contraintes déviatoriques fonction des déformations axiale, radiale et volumique (à gauche) et fonction du temps (à droite).

1.3.6 Implémentation numérique

La loi de comportement présentée ci-dessus a été implémentée dans deux codes de calculs par éléments finis : Viple3D (Tijani (2000)), le logiciel du Centre de Géosciences de Mines ParisTech, et Code-Aster (www.code-aster.com), le logiciel de EDF R&D. Dans ce qui suit, l'algorithme utilisé pour l'implémentation du modèle dans ces codes sera brièvement présenté. En particulier, l'introduction de la transformations \tilde{L} , la prise en compte d'un état de référence non relâché ($\underline{\sigma}_0 \neq \underline{0}$) et les différences entre les formalismes utilisées dans les deux logiciels seront discutées.

Le modèle proposé étant de type elasto-viscoplastique, l'intégration de la loi de comportement consiste alors à définir l'évolution de l'état du système pendant une durée de temps infinitésimale Δt . Ainsi, étant donné un état à un instant t (qu'on notera par l'exposant $-$) et un incrément du chargement (des contraintes ou des déformations), on doit calculer toutes les variables d'état à l'instant $t + \Delta t$ (que l'on notera par l'exposant $+$). Dans Code-Aster, l'intégration de la loi de comportement est pilotée par les déformations c'est à dire que pour avancer de t à $t + \Delta t$, on se donne un incrément de déformations $\Delta \underline{\epsilon}$. Dans Viple3D, on pilote plutôt par les contraintes dans le sens où on se donne le tenseur des contraintes $\hat{\underline{\sigma}}^+$ à l'instant $t + \Delta t$. Dans ce qui suit, on présente l'algorithme basé sur

un incrément de déformation, l'algorithme basé sur les contraintes étant très similaire. Le schéma explicite suivant est employé :

1. Actualiser $\underline{\underline{\omega}}$ à partir de $\underline{\underline{\varepsilon}}^-$, $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^-$ et $\underline{\underline{\omega}}^-$:
 - $\underline{\underline{\varepsilon}}_e^- = \underline{\underline{\varepsilon}}^- - \underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^-$;
 - $\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_e^- = \underline{\underline{L}}^{-1} : \underline{\underline{\varepsilon}}_e^-$;
 - $\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}_e^- = (\underline{\underline{\omega}}^-)^{-\frac{1}{2}} \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_e^- (\underline{\underline{\omega}}^-)^{-\frac{1}{2}}$;
 - $\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}_e^- = \underline{\underline{H}}(\underline{\underline{1}}) : \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}_e^-$;
 - $\underline{\underline{\omega}}^+ =$ fonction connue de $(\underline{\underline{\omega}}^-, \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}_e^-, \underline{\underline{\tilde{\sigma}}}_e^-)$.
2. Actualiser $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}$ à partir de $\underline{\underline{\hat{\sigma}}}^-$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^-$:
 - $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}_e^- = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\hat{\sigma}}}_e^-$;
 - $\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_{vp}^+ =$ fonction connue de $(\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_{vp}^-, \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_e^-)$;
 - $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^+ = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_{vp}^+$.
3. Actualiser $\underline{\underline{\hat{\sigma}}}$ à partir de $\underline{\underline{\varepsilon}}^+$, $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^+$ et $\underline{\underline{\omega}}^+$:¹
 - $\underline{\underline{\varepsilon}}_e^+ = \underline{\underline{\varepsilon}}^+ - \underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^+$;
 - $\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_e^+ = \underline{\underline{L}}^{-1} : \underline{\underline{\varepsilon}}_e^+$;
 - $\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}_e^+ = (\underline{\underline{\omega}}^+)^{-\frac{1}{2}} \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_e^+ (\underline{\underline{\omega}}^+)^{-\frac{1}{2}}$;
 - $\underline{\underline{\tilde{\sigma}}}_e^+ = \underline{\underline{H}}(\underline{\underline{1}}) : \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}_e^+$;
 - $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}_e^+ = (\underline{\underline{\omega}}^+)^{-\frac{1}{2}} \underline{\underline{\tilde{\sigma}}}_e^+ (\underline{\underline{\omega}}^+)^{-\frac{1}{2}}$;
 - $\underline{\underline{\hat{\sigma}}}_e^+ = \underline{\underline{L}}^{-1} : \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_e^+$.

Par rapport à cet algorithme, le tenseur $\underline{\underline{L}}$ doit être déterminé *a priori*. Deux possibilités se présentent : (i) soit on suppose que l'anisotropie est la même pour tous les éléments d'un seul matériau tel que c'est le cas pour les couches sédimentaires planes, (ii) soit, dans le cas le plus général, l'anisotropie est une information reliée à l'élément dans le sens où l'orientation de \vec{e} varie d'un point à l'autre d'un seul matériau (pli d'une roche sédimentaire par exemple). Lorsqu'on se limite au premier cas, le tenseur $\underline{\underline{L}}$ est constant par matériau et peut donc être calculé et enregistré comme étant un ensemble de paramètres du matériau (au même titre que les modules de Young, par exemple). Dans le cas contraire, $\underline{\underline{L}}$ devient une grandeur qui varie dans l'espace (un champ) mais qu'on suppose constant dans le temps tant qu'on reste sous l'hypothèse des petites déformations. Ainsi, ce tenseur peut être enregistré au même titre que les variables internes du modèle (comme les variables d'érouissages, par exemple). Dans les deux cas, afin de limiter l'utilisation de l'espace mémoire, on préfère établir les calculs tensoriels en utilisant des équations similaires à (1.16) où les tenseurs d'ordre 4 sont représentés par uniquement 5 paramètres au lieu de 36 quand on enregistre toute une matrice 6x6. En plus, on peut remarquer que tout au long de l'algorithme, on a évité les produits entre les tenseurs d'ordre 4 et la détermination du tenseur d'élasticité endommagé ce qui permet d'optimiser les temps de calcul.

Un autre point qu'il ne faut pas négliger dans l'implémentation de la loi de comportement

1. c'est uniquement ce point qui diffère entre Code-Aster et Viplef3D où on actualise $\underline{\underline{\varepsilon}}$ à partir de $\underline{\underline{\hat{\sigma}}}^+$, $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^+$ et $\underline{\underline{\omega}}^+$

est la définition de l'état de référence des déformations surtout lorsque l'intégration de la loi de comportement est pilotée par les déformations comme dans Code-Aster. En effet, le tenseur des déformations $\underline{\underline{\varepsilon}}$ utilisé dans l'algorithme ci-dessus est calculé par rapport à un état de contraintes relâché ($\underline{\underline{\hat{\sigma}}}_0 = \underline{\underline{0}}$) alors que celui utilisé dans un code de calcul $\underline{\underline{\varepsilon}}^*$ est généralement calculé par rapport à l'état de contraintes initial dans la structure qui peut être non relâché ($\underline{\underline{\hat{\sigma}}}_0 \neq \underline{\underline{0}}$). En supposant qu'à l'instant $t = 0$ lorsque $\underline{\underline{\hat{\sigma}}} = \underline{\underline{\hat{\sigma}}}_0$, le matériau est encore intact ($\underline{\underline{\omega}} = \underline{\underline{1}}$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp} = \underline{\underline{0}}$), on détermine le tenseur de déformations initiales $\underline{\underline{\varepsilon}}_0 = \underline{\underline{\varepsilon}}(t = 0) = \underline{\underline{H}}^{-1}(\underline{\underline{1}}) : \underline{\underline{\hat{\sigma}}}_0$. Ainsi, on peut continuer à utiliser notre algorithme en écrivant $\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}^* + \underline{\underline{\varepsilon}}_0$.

La plus grande différence entre les formalismes utilisés dans Code-Aster et Viplef3D réside dans la construction de la matrice de raideur : Viplef3D utilise une rigidité constante alors que Code-Aster utilise une rigidité variable. Concrètement, dans Viplef3D, toute loi de comportement doit être réécrite sous la forme suivante :

$$\underline{\underline{\hat{\sigma}}} - \underline{\underline{\hat{\sigma}}}_0 = \underline{\underline{H}}_V : (\underline{\underline{\varepsilon}}^* - \underline{\underline{\varepsilon}}_V) \quad (1.32)$$

dans laquelle $\underline{\underline{H}}_V$ est un tenseur de rigidité constant *a priori* quelconque et $\underline{\underline{\varepsilon}}_V$ est un tenseur de déformation calculé de telle sorte que cette équation soit équivalente à la loi de comportement. D'une part, cette égalité nous permet d'écrire $\underline{\underline{\varepsilon}}^* = \underline{\underline{\varepsilon}}_V + \underline{\underline{H}}_V^{-1} : \underline{\underline{\hat{\sigma}}} - \underline{\underline{H}}_V^{-1} : \underline{\underline{\hat{\sigma}}}_0$ et, d'autre part, sachant que $\underline{\underline{\varepsilon}}^* = \underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{H}}^{-1}(\underline{\underline{1}}) : \underline{\underline{\hat{\sigma}}}_0$, la loi de comportement nous donne $\underline{\underline{\varepsilon}}^* = \underline{\underline{\varepsilon}}_{vp} + \underline{\underline{H}}^{-1}(\underline{\underline{\omega}}) : \underline{\underline{\hat{\sigma}}} - \underline{\underline{H}}^{-1}(\underline{\underline{1}}) : \underline{\underline{\hat{\sigma}}}_0$. Ainsi, il devient avantageux de choisir $\underline{\underline{H}}_V = \underline{\underline{H}}(\underline{\underline{1}})$ pour avoir des simplifications dans l'identification des deux expressions de $\underline{\underline{\varepsilon}}^*$. On obtient finalement :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_V = \underline{\underline{\varepsilon}}_{vp} + (\underline{\underline{H}}^{-1}(\underline{\underline{\omega}}) - \underline{\underline{H}}_V) : \underline{\underline{\hat{\sigma}}} \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{H}}_V = \underline{\underline{H}}(\underline{\underline{1}}) \quad (1.33)$$

Ce formalisme permet de gagner du temps dans la construction de la matrice de raideur du système puisqu'elle est déterminée une seule fois au début d'un calcul et stockée en mémoire pour tous les pas de temps suivants. Dans Code-Aster, en revanche, on libère la matrice de raideur qui peut être actualisée au cour d'un calcul et on choisit, en contre partie, une matrice de raideur plus pertinente en fonction du pas de temps pour accélérer la convergence. Néanmoins, il faut être prudent dans le choix de la rigidité puisqu'on risque d'avoir des calculs divergents dans certaines configurations. On distingue principalement trois types de matrices de rigidité qui sont couramment utilisées : la matrice élastique initiale, la matrice sécante et la matrice tangente. Le premier choix, qui est le plus simple à mettre en place, nous renvoie vers le cadre du formalise de rigidité constante : la convergence est généralement assurée mais au risque d'avoir beaucoup d'itérations. L'utilisation de la matrice tangente permet d'accélérer le processus itératif mais le risque de divergence augmente. En plus, cette méthode passe par le calcul du tenseur tangent $\underline{\underline{C}} = \partial_{\underline{\underline{\varepsilon}}} \underline{\underline{\sigma}}$ dont la détermination analytique peut être relativement compliquée. Un intermédiaire entre la matrice initiale et la matrice élastique est le choix de la matrice sécante ($\underline{\underline{H}}(\underline{\underline{\omega}})$) qui est plus simple à calculer que la matrice tangente et plus rapide que la matrice élastique. Le choix d'une option ou d'une autre dépend du modèle de comportement et peut faire intervenir une combinaison entre ces trois choix. En plus, il est toujours possible pour l'utilisateur de fixer la fréquence d'actualisation de la matrice de raideur dans un calcul pour assurer sa convergence.

Il est important de noter que l'introduction de l'anisotropie via le tenseur $\underline{\underline{L}}$ ne rajoute pas beaucoup de complexité dans le calcul du tenseur tangent $\underline{\underline{C}}$ puisqu'on peut facilement montrer que $\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{L}}^{-1} \bar{\underline{\underline{C}}} \underline{\underline{L}}^{-1}$ où $\bar{\underline{\underline{C}}} = \partial_{\underline{\underline{\bar{\sigma}}}}$ est le tenseur tangent du matériau isotrope équivalent. Il vient ainsi que si on veut étendre une loi de comportement déjà implémentée pour les matériaux isotropes vers les matériaux isotropes transverses, il suffit de multiplier la matrice tangente à gauche et à droite par $\underline{\underline{L}}^{-1}$ sans refaire les calculs analytiques.

Dans le cas de notre modèle, vue la complexité du calcul du tenseur tangent à cause de la présence de $\underline{\underline{\omega}}$, on s'est contenté d'une combinaison entre les tenseurs initial et sécant $r\underline{\underline{H}}(\underline{\underline{\omega}}) + (1-r)\underline{\underline{H}}(\underline{\underline{1}})$ où r est un paramètre fixé à 0.9. Ce choix permet d'obtenir des temps de calcul en régime de traction raisonnables et évite d'avoir une matrice quasi-singulière lorsque l'endommagement augmente. Pour la partie compression, on s'est limité à l'utilisation de la matrice de rigidité initiale ce qui rend les calculs relativement lents. On peut s'inspirer, dans un travail futur, du modèle VISC_DRUC_PRAG ([Code-Aster, 2013](#)), par exemple, pour déterminer une matrice tangente et examiner son effet sur les temps de calcul.

1.4 Relation endommagement-perméabilité

De même que pour la loi de comportement mécanique, on a essayé pour cette partie de voir si la formulation générale donnée par le théorème de la représentation peut être facilement utilisée pour décrire l'impact des sollicitations mécaniques sur la perméabilité intrinsèque du matériau isotrope transverse. Pour ce faire, on a supposé que l'anisotropie dans la perméabilité est uniquement due à la schistosité $\underline{\underline{e}}$ et au tenseur d'endommagement $\underline{\underline{\omega}}$ tandis que le tenseur des déformations non élastiques $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}$ ne contribue que par un facteur multiplicatif scalaire $k_c(\varepsilon_{vp})$ où $\varepsilon_{vp} = \text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp})$. Le théorème de la représentation nous donne ainsi l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{K}}(\varepsilon_{vp}, \underline{\underline{\omega}}, \underline{\underline{e}}) = k_c(\varepsilon_{vp}) & \left(\phi_0 \underline{\underline{1}} + \phi_1 \underline{\underline{e}} + \phi_2 \underline{\underline{\omega}} + \phi_3 (\underline{\underline{\omega}} \underline{\underline{e}} + \underline{\underline{e}} \underline{\underline{\omega}}) \right. \\ & \left. + \phi_4 \underline{\underline{\omega}}^2 + \phi_5 (\underline{\underline{\omega}}^2 \underline{\underline{e}} + \underline{\underline{e}} \underline{\underline{\omega}}^2) \right) \end{aligned} \quad (1.34)$$

dans laquelle ϕ_i ($i = 0 \dots 5$) sont des fonctions des invariants $\text{tr}(\underline{\underline{\omega}})$, $\text{tr}(\underline{\underline{\omega}}^2)$, $\text{tr}(\underline{\underline{\omega}}^3)$, $\text{tr}(\underline{\underline{e}} \underline{\underline{\omega}})$ et $\text{tr}(\underline{\underline{e}} \underline{\underline{\omega}}^2)$. Malheureusement, vu que l'identification des fonctions ϕ_i sur des données expérimentales n'est *a priori* pas évidente, on a procédé, comme pour la partie mécanique, à une séparation des contributions de $\underline{\underline{e}}$ et de $\underline{\underline{\omega}}$ telle que :

$$\underline{\underline{K}}(\varepsilon_{vp}, \underline{\underline{\omega}}, \underline{\underline{e}}) = k_c(\varepsilon_{vp}) \underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}})^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{K}}_0(\underline{\underline{e}}) \underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}})^{\frac{1}{2}} \quad (1.35)$$

où $\underline{\underline{K}}_0(\underline{\underline{e}}) = \underline{\underline{K}}(0, \underline{\underline{1}}, \underline{\underline{e}})$ est la perméabilité initiale du matériau intacte et $\underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}})$ est la contribution de l'endommagement $\underline{\underline{\omega}}$ dans la variation de la perméabilité.

Pour définir $k_c(\varepsilon_{vp})$ et $\underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}})$, on a eu recours à un raisonnement qualitatif inspiré de la littérature. La contribution des déformations viscoplastiques sur la perméabilité est due au phénomène de dilatance (augmentation de volume). Comme l'expression suivante le

résume, seule la partie positive des déformations viscoplastiques contribue à une augmentation de la perméabilité :

$$k_c(\varepsilon_{vp}) = 1 + \kappa_c \langle \varepsilon_{vp} \rangle^{\gamma_c} \quad (1.36)$$

où κ_c et γ_c sont des paramètres du modèle. En ce qui concerne la contribution de l'endommagement par traction, le raisonnement est plus complexe : tel qu'illustré dans la figure 1.7, une augmentation de l'endommagement dans une direction donnée se traduit par le développement d'une fissuration dans le plan perpendiculaire, il en découle que l'augmentation de perméabilité associée doit être appliquée dans ce plan. Ce raisonnement simple

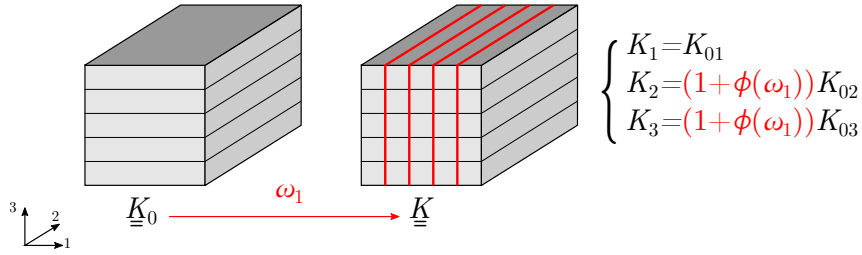


FIGURE 1.7 – Illustration de l'impact d'un endommagement par traction sur la perméabilité : un endommagement dans la direction 1 (ω_1) induit une augmentation des composantes 2 et 3 du tenseur perméabilité. K_{0i} et K_i ($i = 1, 2, 3$) sont, respectivement, les valeurs propres des perméabilités initiale ($\underline{\underline{K}}_0$) et finale ($\underline{\underline{K}}$).

peut se traduire mathématiquement par l'expression suivante du tenseur $\underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}})$:

$$\underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}}) = \underline{\underline{1}} + \phi(\omega_1)\underline{\underline{m}}_{23} + \phi(\omega_2)\underline{\underline{m}}_{13} + \phi(\omega_3)\underline{\underline{m}}_{12} \quad (1.37)$$

Les tenseurs $\underline{\underline{m}}_{ij}$ sont exprimés en fonction des vecteurs propres \vec{m}_i de $\underline{\underline{\omega}}$ sous la forme $\underline{\underline{m}}_{ij} = \vec{m}_i \otimes \vec{m}_j + \vec{m}_j \otimes \vec{m}_i$. Quant à la fonction scalaire ϕ , c'est une fonction empirique qui doit être croissante avec l'intensité de l'endommagement exprimé ici en termes des valeurs propres ω_i du tenseur $\underline{\underline{\omega}}$. Dans le cadre de ce travail une fonction puissance est utilisée. Elle peut s'écrire sous la forme :

$$\phi(x) = \kappa_t(x - 1)^{\gamma_t} \quad (1.38)$$

dans laquelle κ_t et $\gamma_t > 0$ sont des paramètres du modèle. Cette équation peut être réécrite sous la forme compacte suivante :

$$\underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}}) = \left(1 + \text{tr}(\underline{\underline{\Phi}}(\underline{\underline{\omega}}))\right) \underline{\underline{1}} - \underline{\underline{\Phi}}(\underline{\underline{\omega}}) \quad (1.39)$$

où $\underline{\underline{\Phi}}(\underline{\underline{\omega}})$ est le tenseur coaxial à $\underline{\underline{\omega}}$ dont les valeurs propres sont données par $\phi(\omega_i)$. Vu que $\underline{\underline{\Phi}}(\underline{\underline{\omega}})$ est positif, il est facile de montrer que les valeurs propres de $\underline{\underline{k}}_t$ sont supérieures ou égales à 1. Par ailleurs, le fait que $\underline{\underline{k}}_t$ soit exprimé en fonction de $\underline{\underline{\omega}}$ et non pas de $\underline{\underline{\hat{\omega}}}$ (l'endommagement permanent) implique que l'augmentation de la perméabilité en fonction de l'endommagement par traction est complètement recouvert dès qu'on passe en régime de compression.

Il est à noter que la forme de la loi produit proposée ici (eq. (1.35)) peut être expliquée par un raisonnement semblable à celui utilisé pour introduire les lois de comportement

mécaniques c'est-à-dire une équivalence énergétique entre le matériau endommagé (au sens large *i.e.* endommagement et viscoplasticité) et le matériau sain effectif. En effet, pour simplifier, prenons le cas d'un milieu poreux saturé. Dans le matériau endommagé, la loi de Darcy peut s'écrire sous la forme $\vec{w} = \underline{\underline{K}}\vec{q}$ où $\vec{q} = -(\nabla p - \rho\vec{g})/\eta$ et la quantité $\vec{w}.\vec{q}$ représente (à une constante multiplicative près) une énergie dissipée par le processus d'écoulement. De façon parallèle à l'approche d'équivalence utilisée pour les modèles d'endommagement et pour l'introduction du tenseur $\underline{\underline{L}}$, on définit une vitesse de filtration effective \vec{w} dans le matériau initialement sain et on la relie à la vitesse réelle \vec{w} par une relation tensorielle telle que $\vec{w} = \underline{\underline{W}}\vec{w}$ où $\underline{\underline{W}} = \underline{\underline{W}}(\varepsilon_{vp}, \underline{\underline{\omega}})$ est une transformation tensorielle symétrique à définir. Ensuite, on définit le vecteur \vec{q} , l'équivalent de \vec{q} , tel que $\vec{w} = \underline{\underline{K}}_0\vec{q}$ où $\underline{\underline{K}}_0$ est le tenseur de perméabilité du matériau initialement sain. En supposant que l'énergie dissipée est la même entre le matériau endommagé et le matériau sain c'est-à-dire $\vec{w}.\vec{q} = \vec{w}.\vec{q}$, on peut donc déduire que $\vec{q} = \underline{\underline{W}}\vec{q}$ et que $\underline{\underline{K}} = \underline{\underline{W}}\underline{\underline{K}}_0\underline{\underline{W}}$. L'équation (1.35) revient alors à poser $\underline{\underline{W}}(\varepsilon_{vp}, \underline{\underline{\omega}}) = k_c(\varepsilon_{vp})^{\frac{1}{2}}\underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}})^{\frac{1}{2}}$.

La figure 1.8 montre des exemples de calage de la fonction perméabilité-endommagement sur des essais de laboratoire (voir chapitre 5 pour plus de détails). La partie générée par la traction, $\underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}})$, est ajustée sur des essais brésiliens notamment ceux réalisés par [Picandet et al. \(2009\)](#) alors que la partie compression, $k_c(\varepsilon_{vp})$, est calée sur des essais de compression triaxiale effectués par [Zhang \(2016\)](#).

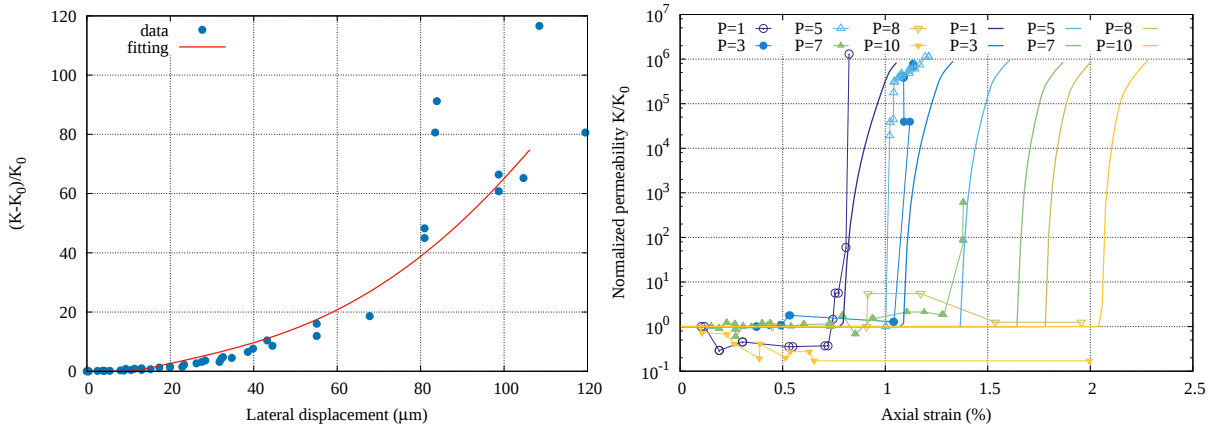


FIGURE 1.8 – Exemples de calage de la fonction perméabilité-endommagement sur des essais de laboratoire : à gauche, sur des essais brésiliens réalisés par [Picandet et al. \(2009\)](#) et, à droite, sur des essais de compression triaxiale réalisés par [Zhang \(2016\)](#).

1.5 Couplage hydromécanique dans un milieu poreux non saturé

Comparé au cas saturé, le couplage hydromécanique dans un milieu poreux non saturé peut apporter quelques complications. D'une part, le fait qu'une phase fluide peut être soit présente soit absente peut causer des ennuis d'un point de vue résolution numérique. Par exemple, dans le cas d'un milieu poreux à deux phases fluides tel que décrit dans la figure

1.1, le problème d'une injection de gaz dans un milieu initialement saturé en liquide est un problème mathématiquement complexe qui nécessite la formulation d'équations adéquates qui permettent de décrire, à la fois, le milieu saturé (en liquide) et le milieu non saturé (avec les deux phases).

D'autre part, il est important de bien définir la pression de pore p (voir équation 1.12) en fonction des pressions des phases p_λ et p_γ , et du degré de saturation S_λ . La signification de la pression de pore est en effet sujet à caution, notamment si on souhaite se comparer à des résultats expérimentaux. On discutera, tout d'abord, de la pertinence des formulations existantes dans la littérature pour expliquer les mesures expérimentales sur des essais d'injection de gaz et, ensuite, on examinera l'effet des surpressions de pore sur l'intégrité de la roche à travers des simulations à l'échelle de l'ouvrage.

1.5.1 Problème de transition saturé/non saturé

L'un des problèmes dans la caractérisation du comportement des milieux poreux non saturés est l'étude de l'apparition et de la disparition d'une phase. Dans cette thèse, la caractérisation du phénomène d'entrée du gaz dans la roche initialement saturée en eau est primordiale pour décrire la problématique de migration d'hydrogène dans l'argilite. Plusieurs auteurs ont proposé des méthodes numériques permettant de résoudre ce problème tel que [Code-Aster \(2015\)](#); [Jaffré et Sboui \(2010\)](#); [Bourgeat et al. \(2010, 2013b,a\)](#); [Angelini \(2010\)](#); [Angelini et al. \(2011\)](#); [Ern et Mozolevski \(2012\)](#); [Bastian \(2014\)](#); [Neumann et al. \(2013\)](#); [Pruess et al. \(1999\)](#). Dans le deuxième chapitre de cette thèse, la formulation théorique décrivant l'écoulement du gaz et du liquide dans un milieu poreux a été rappelée ainsi que le traitement numérique utilisé. En particulier, la méthode de résolution utilisée dans le logiciel Code-Aster ([Code-Aster, 2015](#)) et basée sur les travaux [Angelini \(2010\)](#); [Angelini et al. \(2011\)](#) a été décrite. On rappelle ici les idées principales.

On considère que l'espèce chimique h (hydrogène ou hélium) peut être présente dans la phase gazeuse (γ) ou dans la phase liquide (λ) sous forme dissoute alors que l'eau w est présent uniquement dans la phase liquide (le phénomène d'évaporation est négligé). Rappelons tout d'abord les équations de bilan de la masse de l'hydrogène et de l'eau pour mieux comprendre les problèmes liés à la transition entre état saturé et non saturé. L'équation 1.3 écrite pour w et h donne, respectivement, les deux équations suivantes :

$$\begin{aligned} \dot{m}_w^\lambda / J + \vec{\nabla} \cdot \left(\rho_\lambda ((1 - c_\lambda) \vec{w}^\lambda - \vec{j}^\lambda) \right) &= \pi_w \\ (\dot{m}_h^\lambda + \dot{m}^\gamma) / J + \vec{\nabla} \cdot \left(\rho_\lambda (c_\lambda \vec{w}^\lambda + \vec{j}^\lambda) + \rho_\gamma \vec{w}^\gamma \right) &= \pi_h \end{aligned} \quad (1.40)$$

où, pour simplifier les notations et puisque l'eau n'est présente que dans la phase liquide, (pas d'évaporation $\Rightarrow c_{h\gamma} = 1$, $c_{w\gamma} = 0$, $\vec{j}_k^\gamma = \vec{0}$, $m_h^\gamma = m^\gamma$ et $m_w^\gamma = 0$), la concentration de h dans λ est notée par $c_\lambda = c_{h\lambda}$ et la vitesse de diffusion de h dans λ est désigné par $\vec{j}^\lambda = \vec{j}_h^\lambda = -\vec{j}_w^\lambda$. Pour compléter ces équations, on utilise les lois de comportement et notamment les lois de Darcy pour les vitesses de filtration, de Fick pour la diffusion et d'Henry pour la dissolution qui peuvent être écrites sous la forme suivante :

$$\vec{w}^\alpha = -\frac{k_\alpha}{\eta_\alpha} \underline{\underline{K}} \left(\vec{\nabla} p_\alpha - \rho_\alpha \vec{g} \right); \quad \vec{j}^\lambda = -\underline{\underline{D}}_{h\lambda} \vec{\nabla} c_\lambda; \quad p_\gamma = H c_\lambda \quad (1.41)$$

dans lesquelles, H est la constante d'Henry, $\underline{\underline{D}}_{h\lambda}$ est le tenseur de diffusion de h dans λ dans le milieu poreux, $\underline{\underline{K}}$ est la perméabilité intrinsèque et η_α est la viscosité dynamique

de α . Enfin, k_γ et k_λ sont, respectivement, les perméabilités relatives des phases gazeuse et liquide et qui sont données par des fonctions empiriques du degré de saturation en liquide S_λ et qui vérifient $k_\gamma(S_\lambda = 1) = 0$ et $k_\lambda(S_\lambda = 1) = 1$.

Si on néglige les phénomènes de dissolution et de diffusion ($c_\lambda = 0$ et $\vec{j}^\lambda = \vec{0}$), on remarque que lorsque $S_\lambda = 1$ (milieu saturé), la deuxième équation de (1.40) devient dégénérée puisque $\vec{w}^\gamma = \vec{0}$ lorsque $k_\gamma(S_\lambda = 1) = 0$. Ce phénomène est à l'origine des problèmes numériques lors de la résolution du problème d'apparition ou de disparition d'une phase. Si nous devons garder les deux équations non dégénérées quelque soit l'état du milieu poreux, alors les phénomènes de dissolution et de diffusion ne doivent pas être négligés. Il convient de remarquer ici que, contrairement à la phase gazeuse, la phase liquide est toujours présente.

Compte tenu des considérations précédentes, le problème revient alors à bien choisir les variables primaires qui permettent de décrire l'évolution du milieu poreux dans tous ses états possibles. Pour la phase liquide qui est toujours présente, on peut simplement choisir la pression p_λ comme première variable primaire. Pour l'hydrogène, grâce à la dissolution et à la diffusion, on peut faire le choix de la concentration c_λ qui est toujours définie que ce soit en milieu saturé ou non saturé. Cependant, pour avoir des variables primaires homogènes, il convient de choisir plutôt la pseudo pression de gaz $\tilde{p}_\gamma = Hc_\lambda$: elle est égale à la pression de gaz lorsque la phase gazeuse est présente ($\tilde{p}_\gamma = p_\gamma$ si $S_\lambda < 1$) et est juste une définition lorsque le milieu est saturé ($S_\lambda = 1$). En plus, afin de garder les mêmes équations que pour le cas saturé, on définit une pseudo pression capillaire $\tilde{p}_c = \tilde{p}_\gamma - p_\lambda$ de telle sorte que le degré de saturation devient une fonction de cette quantité au lieu de la vraie pression capillaire ($p_c = p_\gamma - p_\lambda$). On a donc $S_\lambda(\tilde{p}_c) = S_\lambda(p_c)$ lorsque $\tilde{p}_c \geq 0$ (puisque $\tilde{p}_c = p_c$) et $S_\lambda(\tilde{p}_c) = 1$ si $\tilde{p}_c < 0$. En effet, la condition de formation d'une phase gazeuse est $S_\lambda < 1$ ce qui est équivalent à $p_c > 0$ et par conséquent à $\tilde{p}_\gamma = p_\gamma = Hc_\lambda > p_\lambda$. Le domaine saturé est caractérisé, quant à lui par la condition $\tilde{p}_\gamma = Hc_\lambda \leq p_\lambda$ qui est équivalente à $\tilde{p}_c \leq 0$.

La figure 1.9 représente un exemple de simulation de la phase de traversée de l'hélium dans un échantillon d'argilite initialement saturé en eau (voir chapitre 2). Plus précisément, elle montre la position du front de gaz ($\tilde{p}_c = 0$) à plusieurs instants. Ce calcul permet de caler les paramètres hydrauliques sur le phénomène de breakthrough c'est-à-dire l'arrivée du gaz à la face de récupération (face inférieure dans le schéma de la figure 1.9). Dans cette illustration, le gaz prend environ 170 jours pour traverser tout l'échantillon.

1.5.2 Pression de pore dans un milieu non saturé : modélisation d'un essai d'injection de gaz

Dans un milieu poreux qui contient plusieurs phases fluides, la définition de la pression de pore p (eq. (1.12)) n'est pas évidente et le choix d'une formulation ou d'une autre peut avoir beaucoup d'influence sur la modélisation du comportement hydromécanique du matériau. Dans le deuxième chapitre de cette thèse, cet aspect a été étudié dans le cas d'une injection de gaz (hélium) dans des éprouvettes d'argillite (COx) initialement saturées en eau sous confinement constant réalisés au BGS (Harrington et al. (2013a); Cuss et al. (2014)). Alors que les mesures des quantités hydrauliques sont correctement reproduites par les calculs, plusieurs difficultés apparaissent lorsqu'on essaie d'expliquer les mesures de gonflement des échantillons sous l'effet des pressions du gaz injecté. Quatre

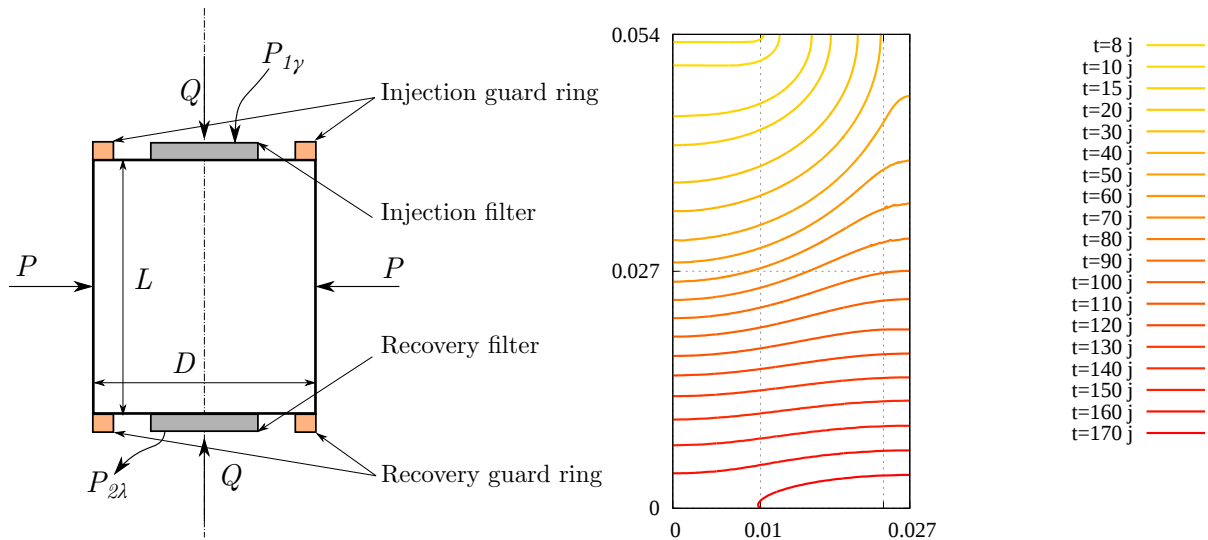


FIGURE 1.9 – Schéma de l'essai d'injection de l'hélium dans une argilite initialement saturée en eau réalisé au BGS (Harrington et al., 2013a) (à gauche) et avancé du front de gaz dans l'échantillon (à droite).

formulations différentes des pressions de pore (Bishop, 1959; Coussy, 1991; Alonso et al., 1990; Pereira et al., 2010) ont été testées montrant que les résultats obtenus pour la variation de volume des échantillons sont très sensibles au choix de la formulation.

En effet, vu la grande proportion d'argile dans le COx (entre 50 et 55%), l'eau se trouve en forte interaction avec les minéraux argileux. Il en résulte que les formulations couramment utilisées comme celles de Bishop et de Coussy donnent des résultats très différents des mesures expérimentales à cause du fait que ces modèles supposent que la phase solide est inerte par rapport aux phases fluides. C'est dans cet esprit qu'on a fait appel à des formulations qui ont été introduites à la base pour les argiles. Pour s'approcher des mesures de gonflement des échantillons de COx, on s'est inspiré du modèle de comportement hydromécanique d'Alonso et al. (1990) qui considère que la pression de pore est la pression du gaz et que le comportement mécanique dépend de la pression capillaire et donc indirectement de la saturation. Dans un premier temps, la pression de pore a été identifiée à la pression de gaz ($p = p_\gamma$) ou à une pression proche de la pression de gaz (Pereira et al., 2010) ce qui a nettement amélioré les résultats. Dans un deuxième temps, puisque même avec ces considérations, le comportement supposé purement élastique de la matrice solide ne suffisait pas pour expliquer les mesures de gonflement, on a introduit un modèle d'endommagement des paramètres élastiques dans lequel l'endommagement est pris en compte via le degré de saturation.

La figure 1.10 représente les résultats mécaniques des simulations de deux essais d'injection d'hélium dans des argilites initialement saturées en eau (Harrington et al. (2013a) et Cuss et al. (2014)) comparés aux mesures expérimentales (voir chapitre 2 pour plus de détails). Pour le premier essai, le matériau est considéré isotrope et les calculs sont en 2D axisymétrique tandis que le deuxième essai est traité en 3D avec un matériau isotrope transverse (le vecteur de schistosité est perpendiculaire à l'axe de l'éprouvette). Le phénomène d'expansion de l'argilite dû au passage de gaz pour les deux essais est bien reproduit par le modèle.

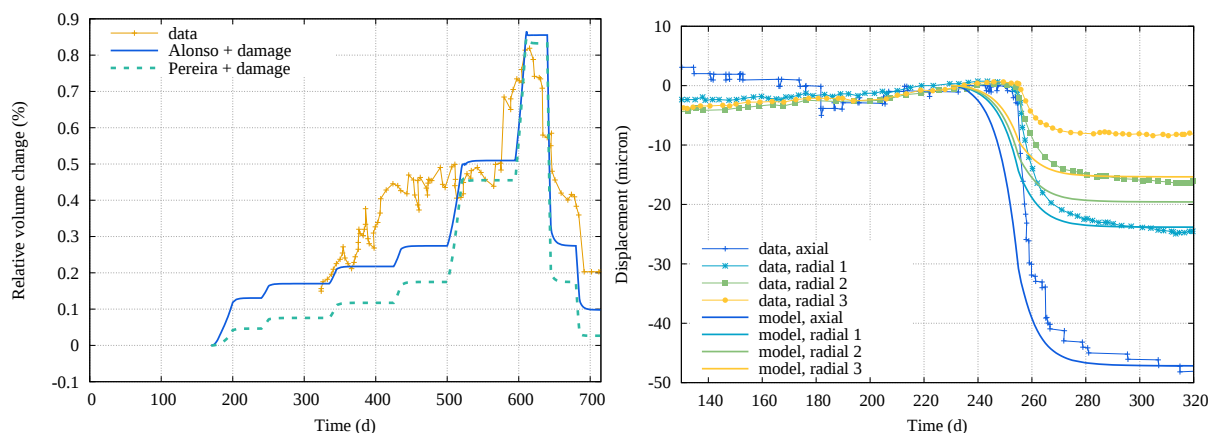


FIGURE 1.10 – Réponse mécanique de deux essais d’injection de gaz dans des argilites initialement saturés en eau : à gauche, l’essai de [Harrington et al. \(2013a\)](#) et, à droite, celui de [Cuss et al. \(2014\)](#).

Il est important de préciser que le travail réalisé pour ces essais d’injection de gaz n’utilisent pas le modèle hydromécanique développé dans les sections 1.3 et 1.4. Le chapitre qui traite ce problème (deuxième chapitre) peut donc être examiné indépendamment des trois autres chapitres.

1.5.3 Endommagement mécanique engendré par des surpressions de gaz dans une structure

L’effet de la production et de la migration de l’hydrogène sur l’intégrité de l’argilite est étudié dans le chapitre 5. Une injection de ce constituant sur la paroi d’une galerie est simulée en 1D axisymétrique en imposant plusieurs flux (φ). Les paramètres hydrauliques étant choisis pessimistes et non réalistes pour permettre d’avoir “rapidement” des surpressions de pore pouvant provoquer l’endommagement de la roche. Par opposition au modèle précédent, ces calculs ont été réalisés en employant une seule formulation de pression de pore (celle de Coussy) et le modèle d’endommagement anisotrope développé dans les sections 1.3 et 1.4.

Comme le montre la figure 1.11, les surpressions de pore impliquent un endommagement en traction dans la direction radiale (ω_{rr}) ce qui induit via la relation (1.37) une augmentation de la perméabilité dans les directions tangentielle ($K_{\theta\theta}$) et axiale (K_{zz}) qui ne contribue pas au flux radial simulé. Même si les calculs réalisés dans cette partie ont un caractère plutôt qualitatif que quantitatif, on peut néanmoins tirer deux principales conclusions. Premièrement, comme prévu, le temps d’initiation de l’endommagement est inversement proportionnel au flux imposé ce qui est clair dans la figure 1.11. En outre, une valeur seuil du flux en deçà de laquelle la roche n’est pas endommagée peut être déterminée (dans le cas de ces calculs, cette valeur est autour de 4 mg/j/m^2) et utilisée comme une limite pour le dimensionnement du projet de stockage. Deuxièmement, tel qu’illustré dans la figure 1.12, il a été remarqué que l’étendue de la zone endommagée due à l’injection du gaz tend rapidement vers une valeur stabilisée proportionnelle au flux imposé. Cette figure montre aussi l’existence d’une valeur seuil du flux pour laquelle la roche commence à s’endommager. Cette observation peut être expliquée par le temps de propagation du gaz dans la roche qui diffère d’un flux à l’autre. Lorsque le flux imposé est faible, l’hydrogène

a suffisamment de temps pour se propager dans la roche ce qui limite l'augmentation de la pression de pore et par conséquent l'étendue de la zone endommagée. Inversement, lorsque le flux est très important, l'hydrogène s'accumule, à cause de la faible perméabilité, et provoque d'importantes surpressions engendrant plus d'endommagement sur la roche.

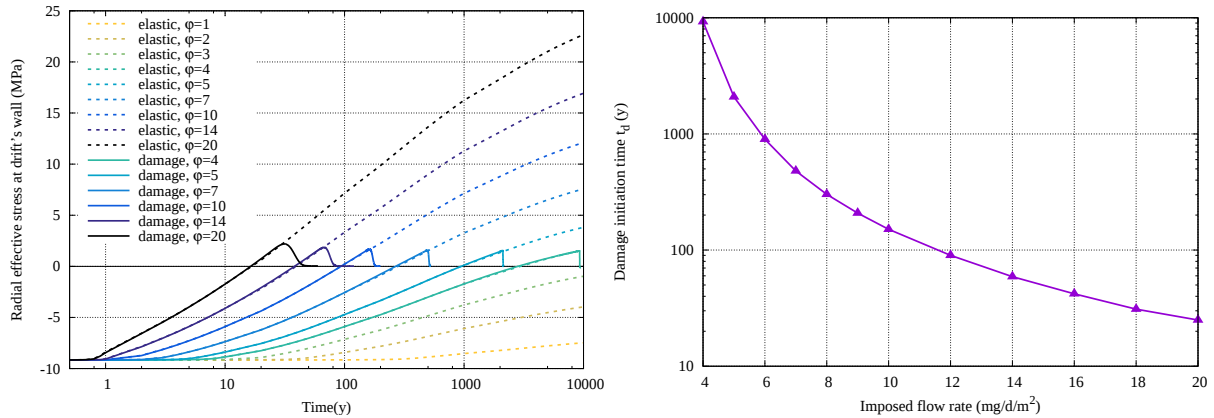


FIGURE 1.11 – Calculs hydromécaniques d'une injection d'hydrogène sur la paroi d'une galerie avec plusieurs flux imposés. À gauche, contrainte radiale en fonction du temps et, à droite, temps d'initiation de l'endommagement en fonction du flux d'hydrogène imposé.

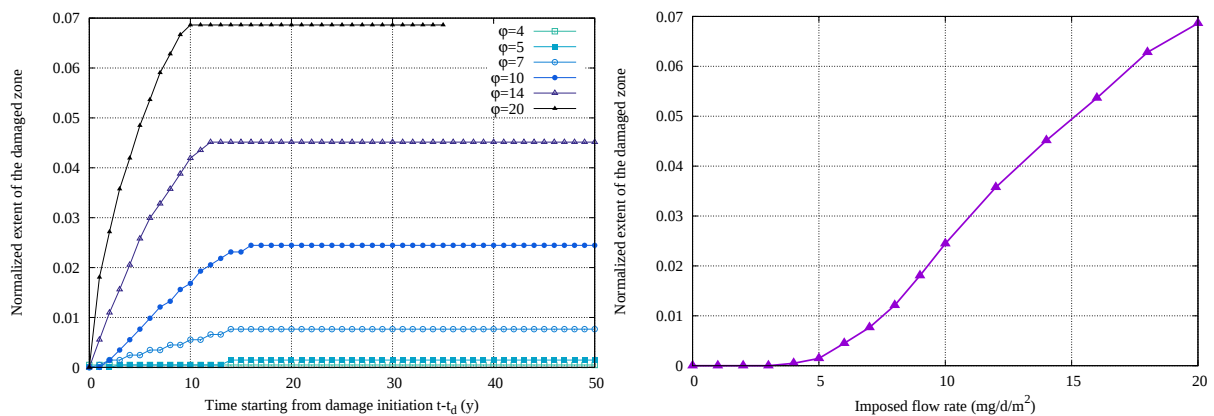


FIGURE 1.12 – Étendue de la zone endommagée en fonction du temps (à partir du temps d'initiation de l'endommagement) pour plusieurs flux (à gauche) et en fonction du flux d'hydrogène imposé (à droite).

1.6 Simulation du creusement des galeries

Une application directe du modèle développé dans la thèse concerne la modélisation du creusement des galeries souterraines du site de Bure. L'objectif principal de ces simulations est d'expliquer les dissymétries observées autour de ces galeries. Les chapitres 4 et 5 de cette thèse sont dédiés à ce sujet. Dans le chapitre 4, les simulations sont réalisées en mécanique seulement alors que, dans le chapitre 5, un couplage hydromécanique avec changement de perméabilité est utilisé pour expliquer les mesures hydromécaniques *in-situ*. Dans les deux cas, les calculs sont réalisés dans une configuration 2D en imposant des fonctions de déconfinement mécanique et hydraulique sur la paroi des galeries simulées.

Vu la complexité du problème, l'obtention des paramètres hydromécaniques permettant d'expliquer les observations *in-situ* a été scindée en plusieurs étapes partant des calculs mécaniques avec un matériau isotrope jusqu'au cas complet avec anisotropies initiale et induite et couplage hydromécanique (en saturé).

1.6.1 Simulations purement mécaniques

Avant de traiter les aspects de couplage, il a fallu, dans un premier temps comprendre l'importance des différentes anisotropies (des contraintes et des paramètres élastiques et non élastiques) mises en jeu dans le problème de creusement des galeries. Ce travail fait l'objet du chapitre 4 et peut être résumé dans les trois points suivants :

- Simulations en utilisant un matériau isotrope :** Dans un premier temps, on ne garde que l'anisotropie des contraintes initiales qui est considérée comme une donnée du problème. Un premier calage utilisant un matériau isotrope (voir figure 1.13) permet de bien rendre compte des convergences verticale et horizontale dans la direction de la contrainte mineure ($//\sigma_h$) alors que, dans la direction perpendiculaire ($//\sigma_H$), les deux mesures de convergence (qui sont d'un bon ordre de grandeur) coïncident puisque tout est isotrope dans la section de cette galerie. Ces calculs montrent l'importance de la prise en compte de l'anisotropie des contraintes. Cependant, cela ne suffit pas pour retrouver la différence des convergences dans la direction de la contrainte majeure. Il en résulte que l'anisotropie du matériau est nécessaire pour mieux expliquer les mesures *in-situ*. Même si ces calculs sont insuffisants pour expliquer toutes les mesures, ils nous permettent de mieux cerner le problème : comme le montre la figure 1.14, la différence des mesures de convergence est directement liée au temps d'activation des déformations viscoplastiques : tout d'abord, au toit de la galerie $//\sigma_h$, puis, à la paroi de la galerie $//\sigma_H$ (il n'y a pas de différence entre le toit et le mur de la galerie dans cette configuration) et, enfin, au mur de la galerie $//\sigma_h$.

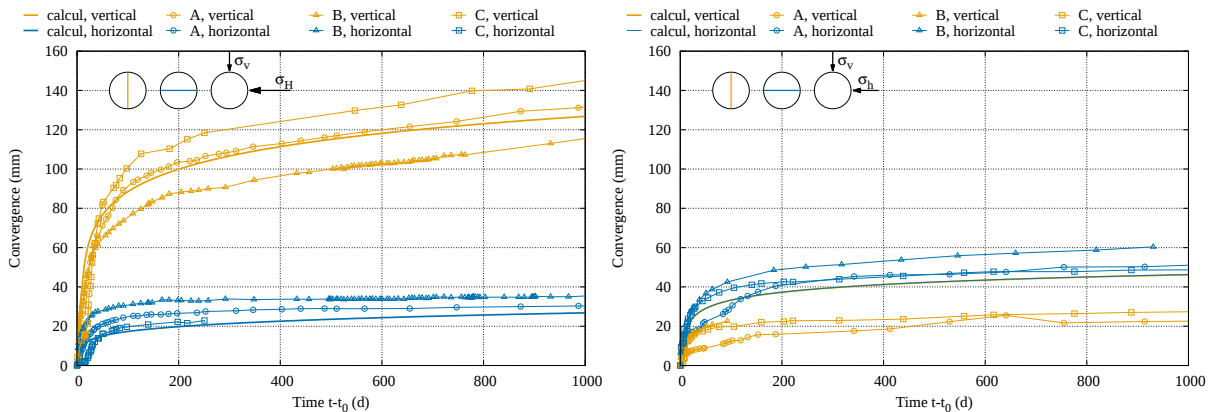


FIGURE 1.13 – Comparaison entre les données expérimentales des convergences et les résultats des calculs mécaniques en utilisant un matériau isotrope ($//\sigma_h$ à gauche et $//\sigma_H$ à droite).

- Simulations avec des paramètres élastiques et non élastiques anisotropes :** En se basant sur les simulations précédentes qui ont souligné l'importance de l'anisotropie du matériau et qui nous ont fourni une première approximation

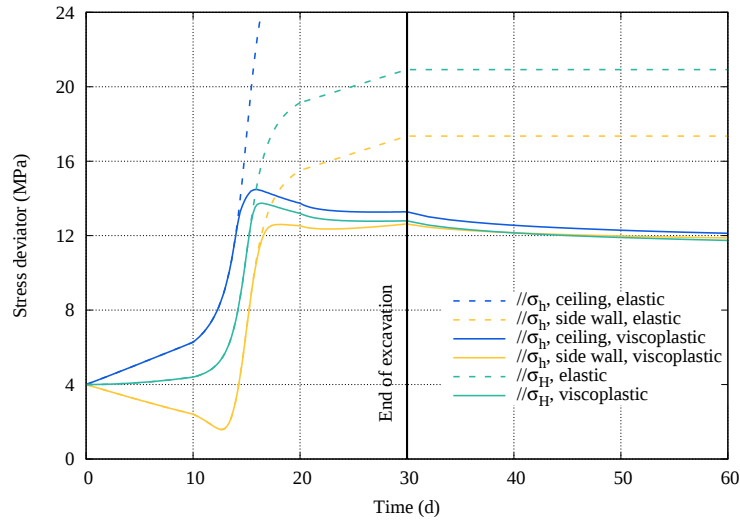


FIGURE 1.14 – Déviateur des contraintes au toit et sur la paroi latérale des galeries $//\sigma_h$ et $//\sigma_H$.

des paramètres mécaniques, le calage des mesures de convergence sur les deux directions des galeries avec un matériau anisotrope devient relativement plus simple. La figure 1.15 présente une confrontation des résultats des calculs aux données expérimentales des convergences et montre que le modèle de comportement introduit est capable de rendre compte des dissymétries des mesures de convergence dans les deux directions. Ces résultats ont été obtenu avec un facteur d'anisotropie des modules de Young de $4/3$ ce qui est en accord avec les mesures faites au laboratoire.

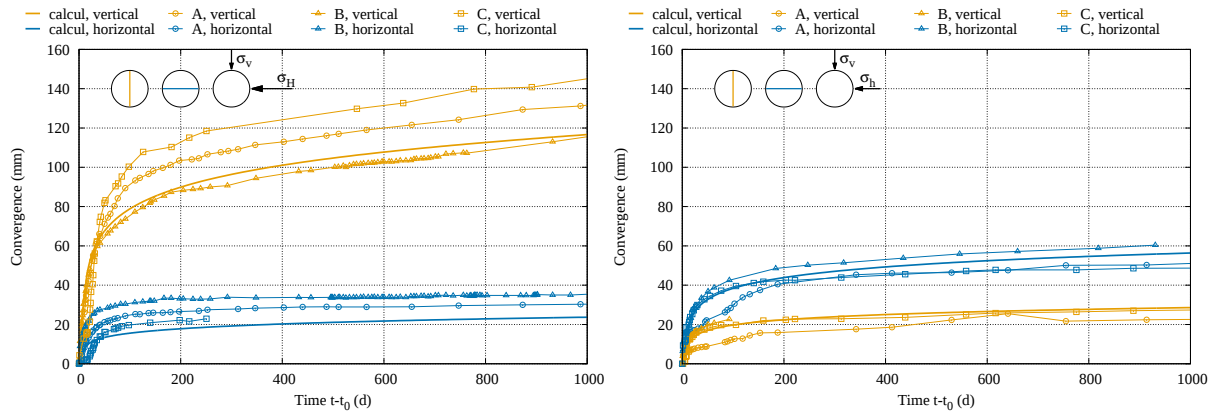


FIGURE 1.15 – Comparaison entre les données expérimentales des convergences et les résultats des calculs mécaniques en utilisant un matériau anisotrope ($//\sigma_h$ à gauche et $//\sigma_H$ à droite).

- Simulations avec seulement des paramètres élastiques anisotropes :** Afin de prouver que l'anisotropie des paramètres non élastiques est non négligeable dans les calculs précédemment faits, de nouvelles simulations ont été réalisées en supprimant cette anisotropie et en ne gardant que celles des paramètres élastiques. Par rapport au formalisme 1.31, au lieu de définir $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp} = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}$ et $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{vp} = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{vp}(\underline{\underline{\sigma}})$, on écrit directement $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{vp} = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{vp}(\underline{\underline{\sigma}})$ ce qui signifie que le critère de viscoplasticité

ne dépend plus de la schistosité. Il en résulte que les résultats obtenus par ce modèle s'écartent par rapport aux observations et que, pour compenser l'absence de l'anisotropie des paramètres non élastiques, le facteur d'anisotropie des modules de Young doit être augmenté. Même avec un facteur de 2, qui est excessif pour l'argilite, le calage obtenu n'est pas aussi bon qu'avec le modèle complet (figure 1.16).

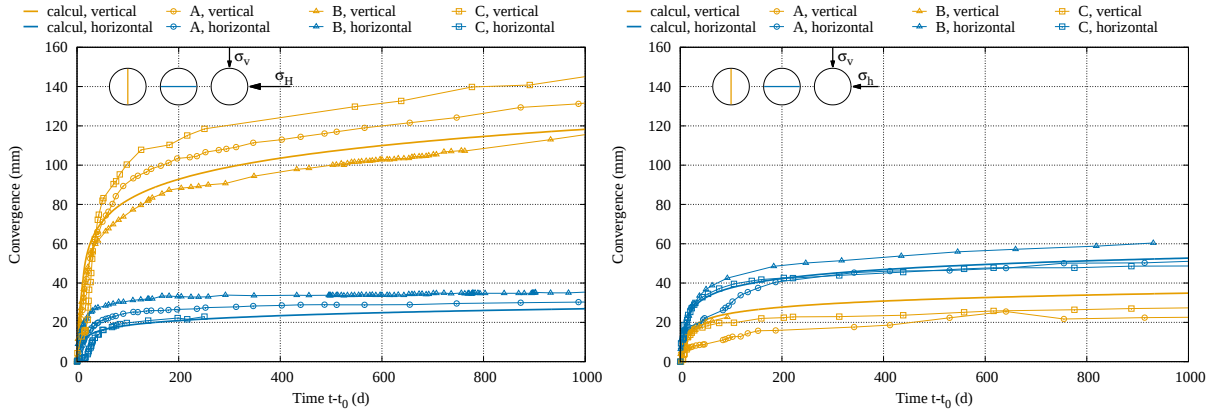


FIGURE 1.16 – Comparaison entre les données expérimentales des convergences et les résultats des calculs mécaniques en utilisant une anisotropie des paramètres élastiques seulement (σ_h à gauche et σ_H à droite).

1.6.2 Simulations couplées hydromécaniques

L'importance de chaque anisotropie étant mise en évidence pour le creusement des galeries, on peut compléter le problème par les aspects hydrauliques en faisant des calculs couplés hydromécaniques sachant que le retour d'expérience des calculs précédents nous facilite la tâche du recalage des paramètres mécaniques. Ce travail est détaillé dans le chapitre 5 de ce manuscrit, on rappelle ici les principaux résultats. La figure 1.17 représente les résultats en termes de convergence et montre que le modèle reproduit bien les mesures expérimentales. Les paramètres de la perméabilité ont été calés sur les mesures expérimentales de [Armand et al. \(2014\)](#). La figure 1.18 illustre son évolution dans le temps et dans l'espace et montre la capacité du modèle à reproduire globalement les formes des zones endommagées (EDZ) (par rapport à la figure 3) : cette zone est allongée verticalement dans la direction de la contrainte mineure et horizontalement dans l'autre direction. En ce qui concerne la réponse hydraulique, la variation de la pression de pore autour des galeries est dans le bon sens par rapport aux mesures mais la marge d'amélioration est encore assez importante.

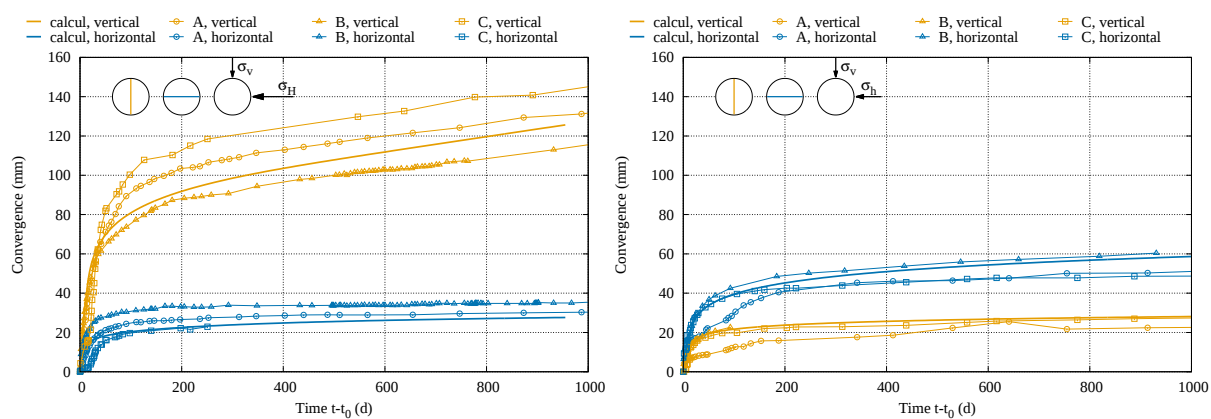


FIGURE 1.17 – Comparaison entre les données expérimentales des convergences et les résultats des calculs hydromécaniques avec un matériau anisotrope ($//\sigma_h$ à gauche et $//\sigma_H$ à droite).

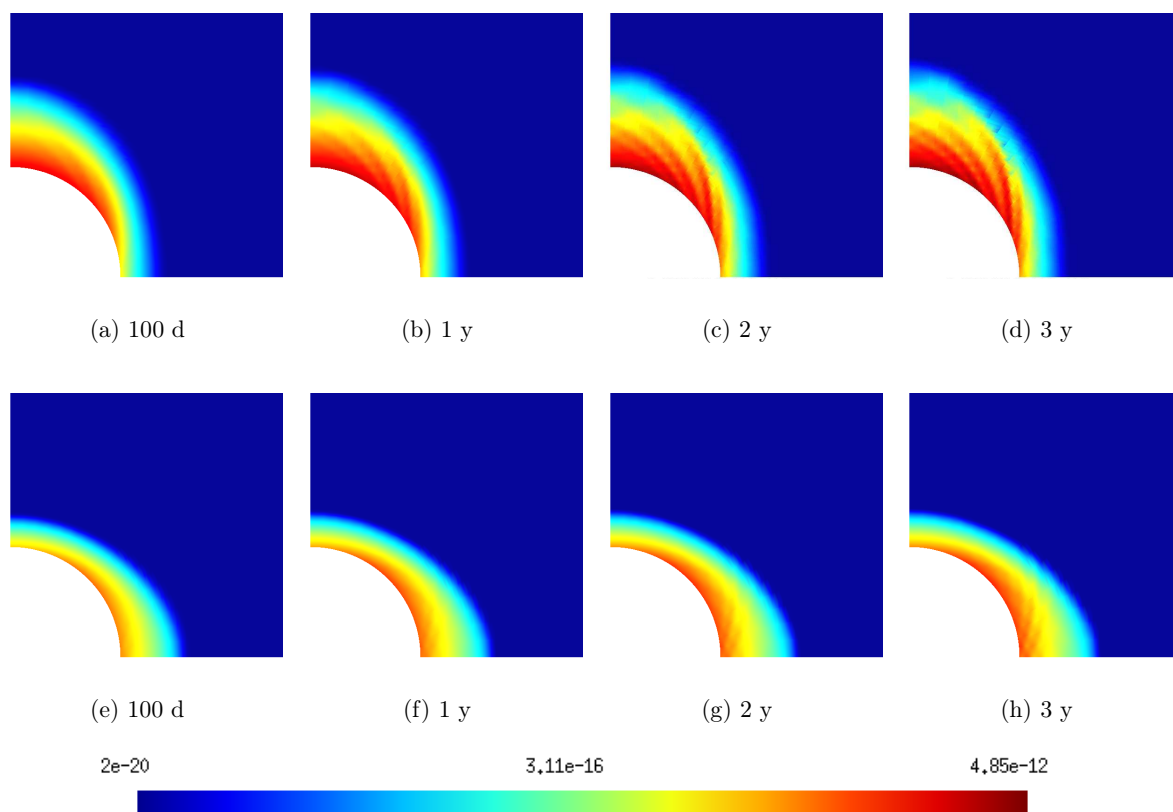


FIGURE 1.18 – Cartes de la perméabilité autour des galeries à plusieurs instants : $//\sigma_h$ de (a) à (d) et $//\sigma_H$ de (e) à (f).

Chapitre 2

Étude Numérique de l'expansion de l'argilite Callovo-Oxfordien due à une injection de gaz

Dans ce chapitre, on s'intéresse à la problématique de production et de migration d'hydrogène dues à la corrosion des éléments métalliques dans les modules de stockage des déchets radioactifs. Plus précisément, on se concentre sur l'interprétation d'essais d'injection de gaz dans l'argilite COx initialement saturée en eau et sous confinement mécanique constant réalisés par [Harrington et al. \(2013a\)](#) et [Cuss et al. \(2014\)](#). Ces essais consistent à augmenter par palier la pression de gaz à l'entrée de l'échantillon et à mesurer les flux entrant et sortant ainsi que la variation de volume de l'éprouvette. Ils montrent que le temps de traversée du gaz (gas breakthrough) est très important et que le passage de gaz dans un échantillon d'argilite est accompagné par un gonflement non négligeable de la roche. La division de la durée de ces essais en deux périodes, avant et après la traversée du gaz, nous a permis de montrer une augmentation notable de la perméabilité due au passage du gaz. Par ailleurs, les simulations numériques ont prouvé que l'élasticité n'est pas suffisante pour expliquer les mesures de gonflement de l'échantillon d'argilite même en changeant la formulation de la prise en compte des pressions de pore. Ils suggèrent que l'avancement du front de gaz dans la roche est accompagné par un endommagement qui cause une altération des paramètres hydrauliques de la roche et notamment sa perméabilité. L'accord entre les résultats des simulations et les données expérimentales approuve ces conclusions.

Numerical study of Callovo-Oxfordian argillite expansion due to gas injection

Abstract

An important aspect in an underground radioactive waste disposal project is the characterization of hydrogen production due to steel containers corrosion and its migration in the initially water-saturated host rock. For the French repository project (CIGEO), gas injection tests into initially saturated samples of the Callovo-Oxfordian (COx) claystone were conducted to mimic these phenomena. They showed an important expansion of the tested samples. In this paper, a series of hydromechanical simulations were performed, within the framework of two-phase flow in deformable porous media, to explain both hydraulic and mechanical responses of the material in those experiments. The analysis of experimental and numerical results suggested the simultaneous advance of gas and damage fronts through the sample. The increasing gas pressure led to the decay of the material rigidity and consequently to the alteration of the hydraulic properties, particularly the permeability. Simultaneously, the mechanical damage caused a significant expansion of the tested COx samples. The good agreement between the experimental and numerical results supported these explanations and should lead, in future works, to a more complete hydromechanical model aiming to simulate the problem of hydrogen production and migration.

Keywords : Hydromechanical behavior, Gas transfer, Breakthrough, Expansion, Damage

2.1 Introduction

The characterization of the long-term hydromechanical behavior of the host rock is an important step in the design of an underground radioactive waste repository. In fact, the corrosion of the metallic parts of the waste containers may lead to important quantities of hydrogen gas, that could migrate through the initially water-saturated rock and induce an important increase of the pore pressure. This phenomenon, which represents a fully coupled hydromechanical problem that combines the two-phase flow (gas and water) with the mechanical behavior of the host rock, must be studied by higher accuracy approaches and carefully addressed at the laboratory scale before tackling the real-scale underground disposal problem.

The present paper deals with the case of the French project CIGEO, in which the Callovo-Oxfordian (COx) claystone was considered as a good candidate to host the repository due to its interesting hydromechanical properties (ANDRA, 2012). For this material, in spite of the recent experimental and numerical studies, numerous questions related to the gas injection process remain open.

For the experimental studies, gas injection experiments in samples of clays and clayey rocks were performed by many authors such as Harrington et Horseman (1999), Horseman et al. (1999), Angeli et al. (2009), Harrington et al. (2013a), Harrington et al. (2013b), and Cuss

et al. (2014). Those experiments showed an important expansion of the samples due to gas injection. This phenomenon was mainly explained by the development of gas dilatant pathways. However, only qualitative interpretations of the expansion observations were presented. The experiments of Harrington et al. (2013b) and Cuss et al. (2014) were of a particular interest to the present work, because they were conducted on CO_x argillite samples, and provided both hydraulic (flow rates and pressures) and mechanical (volume change) measurements. Both of those tests were performed under isotropic mechanical loading and using helium as a safe substitute for hydrogen. Harrington et al. (2013b) measured the volume change using the hydraulic confining system, whereas Cuss et al. (2014) measured accurate values of the axial and radial displacements.

To give quantitative explanations for these experiments, numerical simulations are of great value since a variety of complex physical mechanisms are involved. However, only few numerical studies have been attempted to model such experiments. Harrington et al. (2013b) and Gerard et al. (2014) carried out numerical analysis of the experiment of Harrington et al. (2013b). No modeling attempts were found in the literature for the experiment of Cuss et al. (2014).

Harrington et al. (2013b) performed hydraulic simulations of their experiment using two-phase flow equations to identify the hydraulic properties of the material. They emphasized the difficulties to find a single set of parameters that is able to reproduce all of the hydraulic measurements. In particular, the parameters fitted to the gas breakthrough time were significantly different from those fitted to flow rates. Furthermore, no mechanical simulations have been undertaken by the authors to explain the observed sample expansion.

To highlight the unstable gas flow through preferential pathways, Gerard et al. (2014) performed hydromechanical simulations after embedding a fracture into the sample linking the injection and recovery faces. In that work, the fracture was represented by a set of elements whose mechanical behavior is the same as the intact material (linear elastic), whereas the hydraulic properties (permeability and capillary curve) are taken as functions of the strain state. Because the fluid pressures were always lower than the confining pressure and with the classic concept of effective stress, no failure criterion were reached during this test. Thus, the authors suggested that the fracture existed before the beginning of the test and was not induced by the hydromechanical loads. Although this method provided rather good results in terms of the measured flow rates, the employed approach can be discussed on many counts. First, the geometry of the embedded fracture was chosen arbitrarily (two different geometries were presented and provided a good fit to measurements), and, as the authors mentioned, the axisymmetric modeling, considered in this study, may be not very realistic. Second, the obtained fracture parameters described only the crack-opening-induced flows and, consequently, were not representative of the tested argillite. Finally, this work gave no explanation about the measured sample expansion during the test.

The objective of this work is to investigate further the two gas injection experiments (Harrington et al., 2013b; Cuss et al., 2014). The numerical simulations conducted here aims to provide explanations for all of the hydromechanical measurements, especially the expansion phenomenon.

A particular problem, that should be carefully addressed in the numerical simulations

of the gas injection experiments, is the transition from a saturated to an unsaturated porous media. In fact, when this coupled hydromechanical problem is modeled within the framework of a multiphase flow in a continuous porous medium (see, for example, Coussy (1991); Hassanizadeh et Gray (1979); Schrefler et Pesavento (2004)), the saturated/unsaturated transition may lead to numerical difficulties, as the number of the fluid phases can change from one point to another in the simulated structure. Various modeling approaches used to solve this problem could be found in the literature (Code-Aster, 2015; Jaffré et Sboui, 2010; Bourgeat et al., 2010, 2013b,a; Angelini, 2010; Angelini et al., 2011; Ern et Mozolevski, 2012; Bastian, 2014; Neumann et al., 2013; Pruess et al., 1999). However, only the method introduced by Angelini (2010) and Angelini et al. (2011) was employed in the present work, because of its simplicity to be numerically implemented.

As the main objective of this paper was to reproduce the volume change in the gas injection experiments, the coupling between the mechanical and the hydraulic behaviors should be particularly studied. This coupling is generally accounted for using the stress partitioning between the solid matrix and the fluid phases, as first introduced by Terzaghi (1923). However, several formulations of the equivalent pore pressure can be found in the literature depending on the nature of the solid and fluid phases. Schrefler et Gawin (1996), for example, compared the incremental formulation introduced by Coussy (1991) with the total formulation introduced by Bishop (1959). Alonso et al. (1990) suggested that the pore pressure is identical to gas pressure and included the capillary pressure in the description of the yield functions. Pereira et al. (2010) proposed an other formulation as an intermediate between Bishop and Alonso formulations. All of those pore pressure formulations were investigated in this work to determine which one is the most appropriate to describe the gas injection experiments.

This paper is organized as follows. In the first section, the theoretical framework of two-phase flow in a deformable porous medium are recalled. Particularly, the modeling approach employed to account for the transition between saturated and unsaturated media is highlighted. The different pore pressure formulations described above are used to define the effective stress of the solid matrix. Concerning the mechanical behavior, both elasticity and a damage model are considered. In the second section, the first gas injection experiment (Harrington et al., 2013b) is used to calibrate the model by means of a series of hydromechanical simulations. The test is divided into two stages, before and after the gas breakthrough. Each stage is simulated separately to avoid the difficulties related to the breakthrough phenomenon. A comparative study on the effective stress formulations is conducted, with the aim of finding the more appropriate formulation for the tested material. The linear elasticity being insufficient to explain the observed expansion, the damage model is employed to account for the activation of existing microcracks or the development of new features due to gas flow. Finally, in the third section, the developed approach is applied to the second test (Cuss et al., 2014) to validate the presented hypotheses.

Notations Throughout this paper, first-order tensors (vectors) are denoted by an arrow over a letter (\vec{a}), second-order tensors are denoted by two lines under a letter ($\underline{\underline{a}}$), and fourth-order tensors are denoted by a tilde beneath a letter (\tilde{A}). For a tensor $\underline{\underline{a}}$, $\underline{\underline{a}}^t$ is its transpose, and $\text{tr}(\underline{\underline{a}})$ is its trace. The colon symbol denotes the product with double

contraction, e.g., $\underline{a} : \underline{b} = a_{ij}b_{ji}$, where the index denotes the Cartesian components, and repeated subscripts imply summation unless otherwise noted.

2.2 Theoretical framework : hydro-mechanical equations of two-phase flow in a deformable porous medium

In this section, mass and momentum balance equations as well as the commonly used behavior laws were recalled for a two-phase flow in a deformable porous medium. As explained in the introduction, the hydraulic equations were defined according to the classical two-phase flow theory (Coussy, 1991; Hassanizadeh et Gray, 1979; Schrefler et Pesavento, 2004); the equivalent pore pressure was defined using four different formulations (Coussy, 1991; Bishop, 1959; Alonso et al., 1990; Pereira et al., 2010); and the mechanical behavior was assumed to be either linear elastic or according to a new damage model, which was defined in this work. Although the problem considered in this paper was isothermal, the presented theoretical formalism took into account the temperature.

2.2.1 Hydraulic behavior

Consider a porous medium composed of an insoluble solid phase σ , a liquid phase λ , and gaseous phase γ . The gaseous phase is comprised of a single component h , and the liquid phase contains two components : water w and dissolved gas h . The component h stands for hydrogen in the case of steel corrosion in a radioactive repository, and helium in the case of the gas injection laboratory experiments. In this paper, all the equations were established in the current configuration of the solid matrix (σ phase). For a function $\varphi(\vec{x}, t)$ attached to the porous medium, its material derivative is given by $\dot{\varphi} = \partial_t \varphi + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \varphi$, where \vec{v} is the solid matrix velocity. In what follows, n denotes the Eulerian global porosity, and T denotes the absolute temperature for all the phases (thermal equilibrium). For each phase $\alpha \in \{\lambda, \gamma\}$, p_α stands for its pressure, n_α its Eulerian partial porosity, $S_\alpha = n_\alpha/n$ its saturation degree, and ρ_α its mass density. For each component $k \in \{w, h\}$ in the α -phase, $c_{k\alpha}$ denotes its mass concentration and $\rho_{k\alpha} = c_{k\alpha}\rho_\alpha$ its mass density. For a given quantity X attached to a fluid phase $\alpha \in \{\lambda, \gamma\}$, its apparent value (per unit volume of the entire porous medium) is denoted X^α with $X^\alpha = n_\alpha X_\alpha$, where X_α is per unit volume occupied by the α -phase.

2.2.1.a Continuity equations

When referring to the solid matrix movement, the mass balance equation of the components w and h could be written in the following form :

$$\begin{aligned} \dot{m}_w^\lambda / J + \vec{\nabla} \cdot \left(\rho_\lambda ((1 - c_\lambda) \vec{w}^\lambda - \vec{j}^\lambda) \right) &= \pi_w \\ (\dot{m}_h^\lambda + \dot{m}^\gamma) / J + \vec{\nabla} \cdot \left(\rho_\lambda (c_\lambda \vec{w}^\lambda + \vec{j}^\lambda) + \rho_\gamma \vec{w}^\gamma \right) &= \pi_h \end{aligned} \quad (2.1)$$

with $m^\alpha = J n S_\alpha \rho_\alpha$ and $m_k^\alpha = c_{k\alpha} m^\alpha$ for $k \in \{w, h\}$ and $\alpha \in \{\lambda, \gamma\}$

where J is the Jacobian of the solid transformation, \vec{w}^α is the filtration velocity of the α -phase, \vec{j}_k^α is the diffusive velocity of the k -component in the α -phase, and π_k is a total

mass creation term of the k -component in the two fluid phases. For simplicity, because water was assumed to be present only in the liquid phase (no evaporation $\Rightarrow c_{h\gamma} = 1$, $c_{w\gamma} = 0$, $\vec{j}_k^\gamma = \vec{0}$, $m_h^\gamma = m^\gamma$ and $m_w^\gamma = 0$), the mass concentration of h in λ is denoted $c_\lambda = c_{h\lambda}$ and the diffusive velocity of h in λ is designated by $\vec{j}^\lambda = \vec{j}_h^\lambda = -\vec{j}_w^\lambda$.

2.2.1.b Porosity evolution equation

To determine each partial porosity $n_\lambda = S_\lambda n$ and $n_\gamma = (1 - S_\lambda)n$, an evolution equation of the global porosity, completed by an experimentally determined degree of saturation, is generally used :

$$\dot{n} = (\underline{\underline{B}} - n\underline{\underline{1}}) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} + (S_\lambda \dot{p}_\lambda + (1 - S_\lambda) \dot{p}_\gamma) / M - A_n \dot{T} \quad \text{with} \quad S_\lambda = S_\lambda(p_c) \quad (2.2)$$

where $p_c = p_\gamma - p_\lambda$ is the capillary pressure, and $\underline{\underline{B}}$, M , and A_n are the Biot tensor, the Biot modulus, and the dilation coefficient, respectively. The Biot tensor and the Biot modulus may be estimated using the expressions $\underline{\underline{B}} = \underline{\underline{1}} - \underline{\underline{H}} \underline{\underline{H}}_\sigma^{-1} \underline{\underline{1}}$ and $1/M = (\underline{\underline{B}} - n\underline{\underline{1}}) : \underline{\underline{H}}_\sigma^{-1} \underline{\underline{1}}$, where $\underline{\underline{H}}$ and $\underline{\underline{H}}_\sigma$ are the drained and solid Hooke's elasticity tensors, respectively. These equations reduce in the isotropic case to $b = 1 - K/K_\sigma$ and $M = K_\sigma/(b - n)$, where K and K_σ are the drained and solid bulk moduli, respectively, and $\underline{\underline{B}} = b\underline{\underline{1}}$.

For the saturation degree S_λ , the Van Genuchten expression (Van Genuchten, 1980) may be employed as follows :

$$\tilde{S}_\lambda = \frac{S_\lambda - S_{\lambda r}}{S_{\lambda s} - S_{\lambda r}} = \left(1 + \left(\frac{p_c}{P_r} \right)^{\frac{1}{1-\ell}} \right)^{-\ell} \quad (2.3)$$

where \tilde{S}_λ is an effective degree of saturation, and the model parameters $S_{\lambda r}$ and $S_{\lambda s}$ represent a residual and maximum saturation values, respectively, ($S_\lambda \in [S_{\lambda r}, S_{\lambda s}]$), and ℓ is a model parameter.

2.2.1.c Behavior laws

The hydraulic problem (the system of equations 2.1) needs to be completed with constitutive and state laws.

The filtration velocity vectors are given by the generalized Darcy's law

$$\vec{w}^\alpha = -\frac{k_\alpha}{\eta_\alpha} \underline{\underline{K}} \left(\vec{\nabla} p_\alpha - \rho_\alpha \vec{g} \right) ; \quad \alpha = \lambda, \gamma \quad (2.4)$$

where $\underline{\underline{K}}$ is the intrinsic permeability tensor, η_α is its dynamic viscosity, \vec{g} is the gravity acceleration vector, and k_α is the relative permeability of the α -phase, which can be expressed using the Mualem-Van Genuchten model (Mualem, 1978)

$$k_\lambda = \sqrt{\tilde{S}_\lambda} \left(1 - (1 - \tilde{S}_\lambda^{(1/\ell)})^\ell \right)^2 ; \quad k_\gamma = \sqrt{1 - \tilde{S}_\lambda} \left(1 - \tilde{S}_\lambda^{(1/\ell)} \right)^{2\ell} \quad (2.5)$$

where ℓ is the same parameter as in expression 2.3.

2.2. *Theoretical framework : hydro-mechanical equations of two-phase flow in a deformable porous medium*

As for the diffusive velocity vector, it is related to the concentration gradient according to Fick's law as follows :

$$\vec{j}^\lambda = -\underline{D}_{h\lambda} \vec{\nabla} c_\lambda \quad (2.6)$$

where $\underline{D}_{h\lambda}$ is the diffusivity tensor of the h -component into the λ -phase. This coefficient can be determined either experimentally for the given component, phase, and porous medium (see, for example, [Rebour et al. \(1997\)](#)) or empirically from the diffusivity out of porous media $\bar{D}_{k\alpha}$ and the characteristics of the porous network (porosity, tortuosity and constrictivity). A typically used expression is $D_{k\alpha} = \bar{D}_{k\alpha} n^q$, where q is an empirical parameter generally comprised between 1.8 and 2.4 ([Grathwohl, 1998](#)).

Regarding the state laws, the gaseous phase was assumed to behave as a perfect gas, and the liquid phase was assumed moderately compressible :

$$\rho_\gamma = \frac{M_h}{RT} p_\gamma \quad ; \quad \frac{\dot{\rho}_\lambda}{\rho_\lambda} = \chi_{T\lambda} \dot{p}_\lambda - \chi_{p\lambda} \dot{T} \quad (2.7)$$

where M_h is the molar mass of the specie h , R is the gas constant, and $\chi_{T\lambda}$ and $\chi_{p\lambda}$ are the isothermal compressibility and the isobaric thermal expansion coefficient of water, respectively. The chemical potential equality for the h -component between the λ and γ phases leads to the Henry's law

$$p_\gamma = \frac{K_H}{M_h} \rho_{h\lambda} = H c_\lambda \quad (2.8)$$

where K_H is Henry's constant and $H = K_H \rho_\lambda / M_h$.

2.2.1.d The saturated/unsaturated state transition problem

A major problem in the previous formulation is the transition from fully saturated to unsaturated media (or vice versa) because the set of differential equations and primary variables may change from an instant to another. Only the problem of gas appearance in a porous medium, where the liquid phase is always present, was considered in the present work. As stated in the introduction, the modeling approach proposed by [Angelini et al. \(2011\)](#) was used. It consists of using the dissolution and diffusion phenomena to derive a set of differential equations applicable for both saturated and unsaturated states.

The choice of primary variables is very crucial in this problem. The pressure p_λ could be chosen as the first primary variable because the liquid phase was assumed to be always present. Regarding the second unknown, due to dissolution and diffusion phenomena, the mass concentration c_λ is a permanent unknown in the problem, whether the medium is saturated or unsaturated, and thus can be chosen as the second primary variable. However, to get homogeneous primary variables, a pseudo gas pressure may be defined as $\tilde{p}_\gamma = H c_\lambda$ and used as the second primary variable. It represents the real gas pressure only when the gas phase is present ($\tilde{p}_\gamma = p_\gamma$ if $S_\lambda < 1$), and just a definition in the saturated case. Moreover, to use the same equations for the saturated case, a new pseudo capillary pressure was introduced $\tilde{p}_c = \tilde{p}_\gamma - p_\lambda$, and the saturation degree was expressed as a function of this quantity such that $S_\lambda(\tilde{p}_c) = S_\lambda(p_c)$ when $\tilde{p}_c \geq 0$ (because $\tilde{p}_c = p_c$), and $S_\lambda(\tilde{p}_c) = 1$ when $\tilde{p}_c < 0$. In fact, the condition of the formation of a gaseous phase is $S_\lambda < 1$, which is equivalent to $p_c > 0$, and thus to $\tilde{p}_\gamma = p_\gamma = H c_\lambda > p_\lambda$. As for the

saturated domain, it is characterized by the condition $\tilde{p}_\gamma = Hc_\lambda \leq p_\lambda$, which is equivalent to $\tilde{p}_c \leq 0$.

With these considerations, the γ -Darcy and Fick laws had to be reformulated and injected into the conservation equations. Knowing that the gas relative permeability is null for the saturated case $k_\gamma(S_\lambda = 1) = 0$, the same equation for γ -Darcy law (2.4) could be employed after replacing p_γ by \tilde{p}_γ and ρ_γ by $\tilde{\rho}_\gamma = \rho_\gamma(\tilde{p}_\gamma)$; if $S_\lambda = 1$, then $k_\gamma = 0 \Rightarrow \vec{w}^\gamma = \vec{0}$. The Fick's law (2.6) was kept the same, where c_λ could be replaced by \tilde{p}_γ/H , and the variation of H can be assumed too small against the variation of \tilde{p}_γ . Therefore, when the gravity forces are neglected, the mass conservation equations (2.1) lead to the following system of coupled partial differential equations :

$$\begin{aligned} \dot{m}_w^\lambda/J - \vec{\nabla} \cdot \left(\underline{\underline{\mathcal{B}}}_{w\lambda} \vec{\nabla} p_\lambda + \underline{\underline{\mathcal{B}}}_{w\gamma} \vec{\nabla} \tilde{p}_\gamma \right) &= \pi_w \\ (\dot{m}_h^\lambda + \dot{m}^\gamma)/J - \vec{\nabla} \cdot \left(\underline{\underline{\mathcal{B}}}_{h\lambda} \vec{\nabla} p_\lambda + \underline{\underline{\mathcal{B}}}_{h\gamma} \vec{\nabla} \tilde{p}_\gamma \right) &= \pi_h \end{aligned} \quad (2.9)$$

with

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\mathcal{B}}}_{w\lambda} &= ((1 - c_\lambda)\rho_\lambda k_\lambda / \eta_\lambda) \underline{\underline{K}}; & \underline{\underline{\mathcal{B}}}_{w\gamma} &= -(\rho_\lambda / H) \underline{\underline{D}}_{h\lambda}; \\ \underline{\underline{\mathcal{B}}}_{h\lambda} &= (c_\lambda \rho_\lambda k_\lambda / \eta_\lambda) \underline{\underline{K}}; & \underline{\underline{\mathcal{B}}}_{h\gamma} &= (\rho_\lambda / H) \underline{\underline{D}}_{h\lambda} + (\rho_\gamma k_\gamma / \eta_\gamma) \underline{\underline{K}} \end{aligned}$$

Due to diffusion and dissolution phenomena, the second equation is never degenerate : when $S_\lambda = 1$ and $c_\lambda = 0$, it follows that $\underline{\underline{\mathcal{B}}}_{h\lambda} = \underline{\underline{0}}$, but $\underline{\underline{\mathcal{B}}}_{h\gamma} = (\rho_\lambda / H) \underline{\underline{D}}_{h\lambda}$ is definite positive.

2.2.2 Mechanical behavior

Let $\underline{\underline{\sigma}}$ be the Cauchy total stress tensor acting on both fluid and solid phases. When quasi-static state is assumed (acceleration forces are neglected), the equation of motion reads

$$\vec{\nabla} \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \rho \vec{g} = \vec{0} \quad (2.10)$$

where $\rho = n(S_\lambda \rho_\lambda + (1 - S_\lambda) \rho_\gamma) + (1 - n) \rho_\sigma$ is the global density of the porous media. This equation is completed with a behavior law of the solid matrix by defining the effective stress tensor such that

$$\Delta \underline{\underline{\hat{\sigma}}} = \Delta \underline{\underline{\sigma}} + \Delta p \underline{\underline{B}} = \underline{\underline{H}} : \Delta \underline{\underline{\varepsilon}} \quad (2.11)$$

where the mechanical behavior of the skeleton is supposed linear elastic, $\underline{\underline{\varepsilon}}$ is the linearized strain tensor, $\underline{\underline{H}}$ is the Hooke's elasticity tensor, the Δ operator designates the difference between the actual and initial values, and p is an equivalent pore pressure, which is function of the phase pressures p_λ and p_γ , the saturation degree S_λ , and eventually other variables. Depending on the nature of the porous medium (solid and fluid phases), various formulations of this quantity can be found in the literature. In this paper, four expressions were used and compared :

1. a finite definition as announced by [Bishop \(1959\)](#)

$$p_B = S_\lambda p_\lambda + S_\gamma p_\gamma = p_\gamma - S_\lambda p_c \quad (2.12)$$

2. a finite definition as introduced by [Alonso et al. \(1990\)](#), which consider that the water is totally linked to the soil,

$$p_A = p_\gamma \quad (2.13)$$

3. a finite definition as suggested by [Pereira et al. \(2010\)](#), which can be seen as an intermediate expression between Bishop and Alonso definitions,

$$p_P = p_\gamma - \chi(S_\lambda)p_c \quad \text{with} \quad \chi(S_\lambda) = \left\langle \frac{S_\lambda - S_{\lambda l}}{1 - S_{\lambda l}} \right\rangle \quad (2.14)$$

where $S_{\lambda l}$ represents a part of water that is linked to the solid matrix : for $S_{\lambda l} = 0$, $p_P = p_B$ meaning that gas and water phase share equitably the porous space, and for $S_{\lambda l} \rightarrow 1$, $p_P \rightarrow p_A$ which corresponds to the case where all the water is attached to the solid matrix.

4. an incremental definition as introduced by [Coussy \(1991\)](#)

$$\dot{p}_C = S_\lambda \dot{p}_\lambda + S_\gamma \dot{p}_\gamma = \dot{p}_\gamma - S_\lambda \dot{p}_c \quad (2.15)$$

Regarding the definition of the Hooke's tensor $\underline{\underline{H}}$, two possibilities were investigated in the present work ; linear elasticity and damage. The damage model was inspired by the hydromechanical model of [Alonso et al. \(1990\)](#), which suggested that the mechanical behavior of clayey materials should involve not only the effective stress but also the capillary pressure. However, unlike that model, in which p_c was used to define a yield criterion within an elastoplastic framework, in the present approach, the saturation degree S_λ was employed in the following empirical relationship :

$$\underline{\underline{H}} = (1 - D_c)\underline{\underline{H}}_0 \quad ; \quad D_c(S_\lambda) = a_1 \left(1 - \exp(-a_2(1 - S_\lambda)) \right) \quad (2.16)$$

where $\underline{\underline{H}}_0$ is the Hooke's elasticity tensor of the saturated rock, $a_1 \in [0, 1]$ and $a_2 \geq 0$ are model parameters, and $D_c \in [0, 1]$ is the damage variable. The linear elastic model can be deduced by setting $a_1 = 0$. This model assumes that the amount of gas inside the porous medium, represented by $(1 - S_\lambda)$, has a direct effect on its rigidity. In fact, as in classical damage models (see [Lemaitre et Desmorat \(2005\)](#), for example), where the damage variable traduces the distribution of microcracks and voids inside the material, the presence of gas was considered also as a weakness that may induce damage.

2.2.3 Summary of the hydromechanical equations

The primary variables of the hydromechanical problem are the liquid pressure p_λ , the pseudo gas pressure \tilde{p}_γ , and the solid displacement vector \vec{u} . The set of partial differential equations to be solved is the following :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{w\lambda} \dot{p}_\lambda + \mathcal{A}_{w\gamma} \dot{\tilde{p}}_\gamma - \mathcal{A}_{wT} \dot{T} + \underline{\underline{A}}_{w\varepsilon} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} - \vec{\nabla} \cdot \left(\underline{\underline{B}}_{w\lambda} \vec{\nabla} p_\lambda + \underline{\underline{B}}_{w\gamma} \vec{\nabla} \tilde{p}_\gamma - \underline{\underline{B}}_{wg} \vec{g} \right) &= \pi_w \\ \mathcal{A}_{h\lambda} \dot{p}_\lambda + \mathcal{A}_{h\gamma} \dot{\tilde{p}}_\gamma - \mathcal{A}_{hT} \dot{T} + \underline{\underline{A}}_{h\varepsilon} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} - \vec{\nabla} \cdot \left(\underline{\underline{B}}_{h\lambda} \vec{\nabla} p_\lambda + \underline{\underline{B}}_{h\gamma} \vec{\nabla} \tilde{p}_\gamma - \underline{\underline{B}}_{hg} \vec{g} \right) &= \pi_h \\ \vec{\nabla} \cdot \left(\underline{\underline{H}} : \underline{\underline{\varepsilon}}(\vec{u}) - p(p_\lambda, \tilde{p}_\gamma) \underline{\underline{B}} \right) + \rho \vec{g} &= \vec{0} \end{aligned} \quad (2.17)$$

with

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}_{w\lambda} &= \rho_{w\lambda}(S_\lambda^2/M + nS_\lambda - n\partial_{\tilde{p}_c}S_\lambda) ; & \mathcal{A}_{w\gamma} &= \rho_{w\lambda}(S_\lambda(1 - S_\lambda)/M + n\partial_{\tilde{p}_c}S_\lambda) ; \\
 \mathcal{A}_{wT} &= \rho_{w\lambda}S_\lambda(A_n + n\chi_{p\lambda}) ; & \underline{\mathcal{A}}_{w\varepsilon} &= S_\lambda\underline{B} ; \\
 \underline{\mathcal{B}}_{w\lambda} &= ((1 - c_\lambda)\rho_\lambda k_\lambda/\eta_\lambda)\underline{K} ; & \underline{\mathcal{B}}_{w\gamma} &= -(\rho_\lambda/H)\underline{D}_{h\lambda} ; \\
 \underline{\mathcal{B}}_{wg} &= \rho_\lambda\underline{\mathcal{B}}_{w\lambda} ; & \mathcal{A}_{h\lambda} &= \rho_h S_\lambda/M - n(\rho_{h\lambda} - \rho_\gamma)\partial_{\tilde{p}_c}S_\lambda ; \\
 \mathcal{A}_{h\gamma} &= \rho_h((1 - S_\lambda)/M + n\mathcal{H}(\tilde{p}_c)/p_\gamma) + n(\rho_{h\lambda} - \rho_\gamma)\partial_{\tilde{p}_c}S_\lambda ; & \underline{\mathcal{A}}_{h\varepsilon} &= \rho_h\underline{B} ; \\
 \mathcal{A}_{hT} &= \rho_h A_n + n(\rho_{h\lambda}S_\lambda\partial_T K_H/K_H + \rho_\gamma(1 - S_\lambda)/T) ; & \underline{\mathcal{B}}_{h\lambda} &= (c_\lambda\rho_\lambda k_\lambda/\eta_\lambda)\underline{K} ; \\
 \underline{\mathcal{B}}_{h\gamma} &= (\rho_\lambda/H)\underline{D}_{h\lambda} + (\rho_\gamma k_\gamma/\eta_\gamma)\underline{K} ; & \underline{\mathcal{B}}_{hg} &= \rho_\lambda\underline{\mathcal{B}}_{h\lambda} + (\rho_\gamma^2 k_\gamma/\eta_\gamma)\underline{K} ; \\
 \rho_h &= S_\lambda\rho_{h\lambda} + (1 - S_\lambda)\rho_\gamma.
 \end{aligned}$$

where \mathcal{H} is the Heaviside function. The values of n , S_λ , k_λ , k_γ , $\rho_{h\lambda}$, ρ_γ , and c_λ have to be computed using the equations (2.2), (2.3), (2.5), (2.7), and (2.8). The quantities π_w and π_h may be considered as source terms from other physical phenomena (chemical reactions, for example); they are set to zero otherwise.

In the present paper, the partial derivative equation system (2.17) was used in two numerical softwares, Code-Aster (www.code-aster.org) and Comsol Multiphysics (www.comsol.com).

2.3 Model calibration on a gas injection test in an initially water-saturated rock under isotropic mechanical loading

The first laboratory experiment (Harrington et al., 2013b) was used in this section to calibrate the hydromechanical model, whereas the second experiment (Cuss et al., 2014) was employed in the next section as a validation of the modeling approach. To avoid the difficulties related to the gas breakthrough phenomenon, the experience was divided in two stages, before and after the breakthrough; each stage being simulated separately. The hydraulic properties were fitted to the flow rates and pressures; and the mechanical properties were fitted to the volume change measurements.

2.3.1 Test conditions and material parameters

The laboratory experiment of Harrington et al. (2013b) is a gas injection test in an initially saturated sample under isotropic mechanical conditions (see Figure 2.1) : a gas (helium, chosen as a safe substitute for hydrogen) was introduced at a controlled pressure $P_{1\gamma}$ at the injection face, and a water counter-pressure $P_{2\lambda}$ was applied at the recovery face. For the mechanical conditions, a constant confining pressure $P = Q$ was applied all along the test. The experimental stages of saturation and increasing of the confining pressure prior the gas injection stage were not considered in the present study. During the test, both incoming and outgoing gas fluxes as well as lateral pressures at the injection and recovery guard rings were measured. A cylindrical Callovo-Oxfordian argillite (COx) sample from the Bure site with length $L = 53.9$ mm and diameter $D = 54.4$ mm was used. The applied confining pressure was $P = Q = 12.5$ MPa, and the water counter-pressure was $P_{2\lambda} = P_0 = 4.5$ MPa. The gas injection pressure rose from 6.5 MPa up to

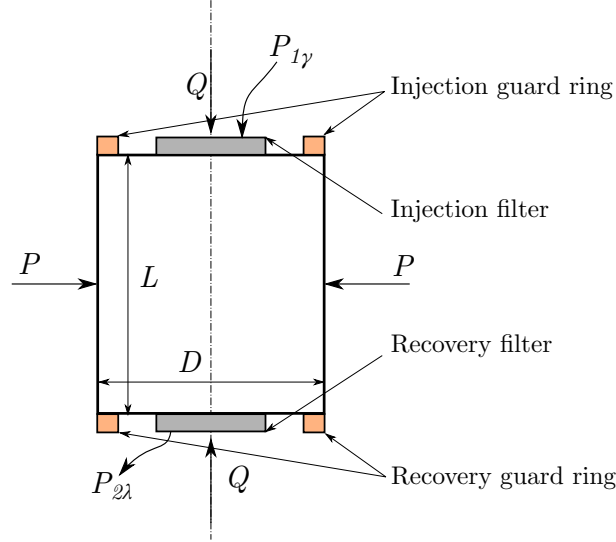


FIGURE 2.1 – Schematic representation of the gas injection test.

12 MPa and then decreased down to 7.5 MPa in several steps. Since the bedding plane was oriented horizontally in the tested sample, the symmetry with respect to the sample axis was respected, and thus the experiment was simulated only in a 2D axisymmetric configuration.

The material hydraulic parameters in Table 2.1 were identified based on the experimental measurements of the flow rates. These parameters are different from those used by Harrington et al. (2013b) for their hydraulic simulations : the capillary curve parameters used in this work were based on the experimental measurements for the COx argillite as reported in ANDRA (2012) (see Figure 2.2); and the intrinsic permeability was rectified by a factor of 7. For the mechanical parameters, the Young modulus was obtained from the confining stage results before gas injection Harrington et al. (2013b).

2.3.2 Initial and boundary conditions

The initial and boundary conditions were chosen as follows :

- initial water pressure was fixed at P_0 ;
- at the injection face, gas pressure history and a no water flow condition were imposed ;
- at the recovery face, water pressure was set to $P_{2\lambda} = P_0$.

At the recovery face, the choice of the gas boundary condition was not obvious because gas was not present at the beginning. To overcome this difficulty, the numerical investigations were conducted after splitting the experimental results into two stages, before and after the gas breakthrough (which occurred after 170 days), and the corresponding boundary condition at that face was chosen accordingly :

1. After the gas breakthrough : the recovery gas pressure as well as its initial value into the whole sample were set to $P_{2\gamma} = P_{2\lambda} = P_0$, meaning that the gas already exists in the porous medium but with infinitely small quantity ($p_c \rightarrow 0 \Rightarrow S_\gamma \rightarrow 0$). Moreover, this means that, once the gas reaches the sample's end, there is no more capillarity which is reasonable.

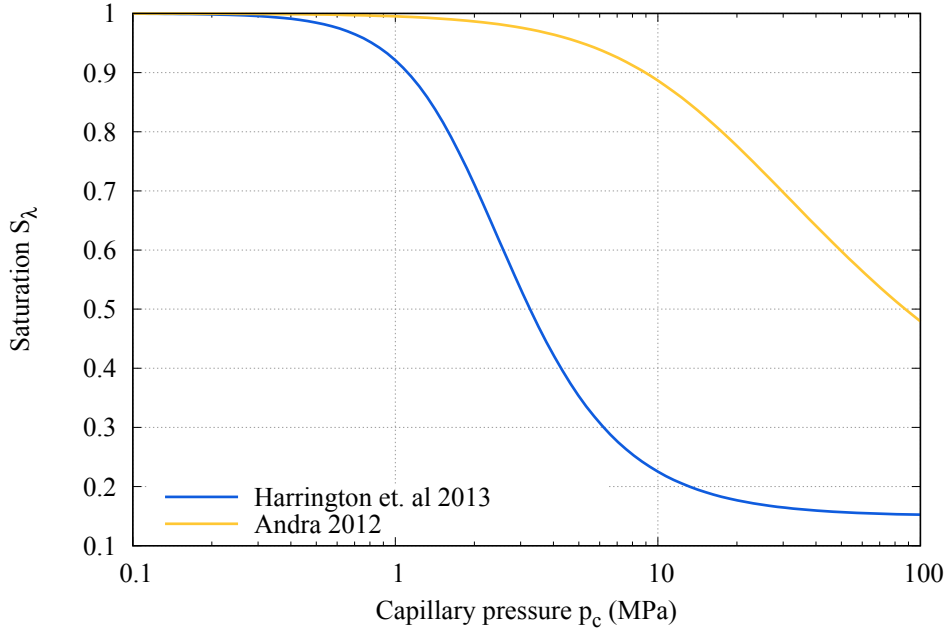


FIGURE 2.2 – Capillary curve using parameters of Harrington et al. and usual parameters for COx argillite. Harrington et al.’s parameters overestimate the desaturation of the material.

TABLE 2.1 – Hydromechanical parameters used to simulate the first gas injection test.

$E(\text{MPa})$	ν	b	$K_{rr}(\text{m}^2)$	$K_{zz}(\text{m}^2)$	ℓ	$P_r(\text{MPa})$	$S_{\lambda r}$	$S_{\lambda s}$
2000	0.3	0.6	$3.5 \cdot 10^{-19}$	$1.4 \cdot 10^{-20}$	0.328	15	0.15	1

π_w	π_h	$D_{h\lambda}(\text{m}^2/\text{s})$	$K_H(\text{L.atm}/\text{mol})$	$S_{\lambda l}$	a_1	a_2
0	0	10^{-12}	2702.7	0.95	0.9	30

2. Before the gas breakthrough : a no flow condition was imposed since the computations were intended to stop when gas reaches this face. Initially, the pseudo gas pressure was set at $\tilde{p}_\gamma = 0$, which means $c_\lambda = 0$.

2.3.3 Hydromechanical simulations starting from the breakthrough time

As explained above, four different pore pressure expressions were tested ; p_B (eq. 2.12), p_C (eq. 2.15), p_A (eq. 2.13), and p_p (eq. 2.14) ($S_{\lambda l}$ is given in Table 2.1), and the mechanical behavior of the solid matrix was first assumed to be linear elastic ($a_1 = 0$ in equation 2.16).

Figure 2.3 presents a comparison between experimental data and simulation results for the incoming and outgoing gas flow rates (flow rates are given at standard temperature and pressure, their expressions are given using equations detailed in Appendix 2.A). In this figure, the simulation results were represented for only one pore pressure formulation

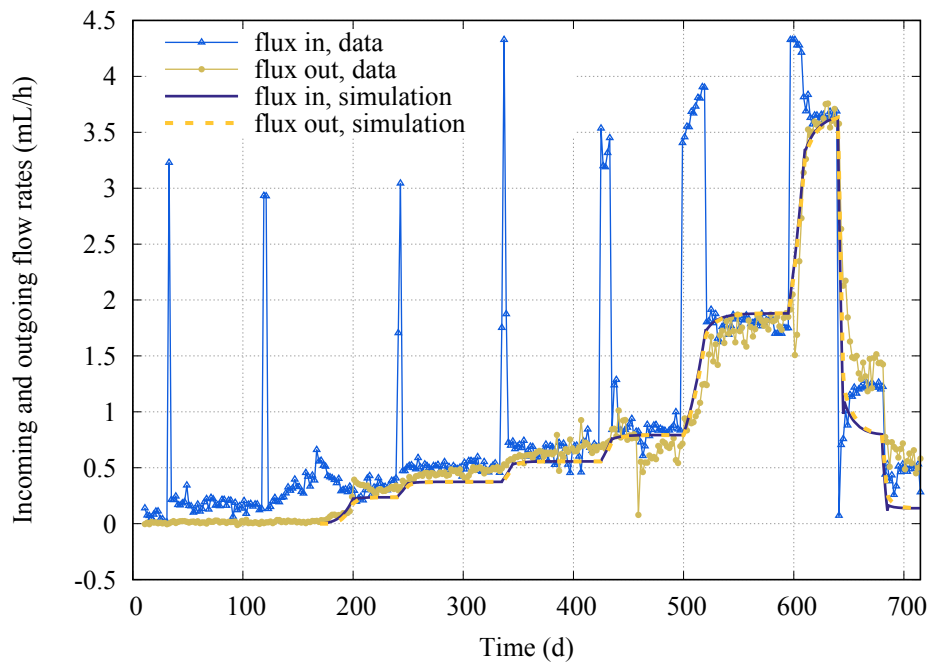


FIGURE 2.3 – Incoming and outgoing gas flow rates (simulation results only after breakthrough time).

because no significant difference was observed between the four formulations. In fact, the mechanical strain in the sample was too small, especially for Coussy and Bishop effective stress formulations ; and consequently its impact on the hydraulic behavior was negligible. A purely hydraulic computation was also conducted and led to highly similar flow rates (not represented here). A good agreement between the numerical and experimental results could be remarked from this figure ; once the gas is present in all the sample (after breakthrough), the inflow and outflow fit well the experimental data even though the simulations started at the breakthrough time.

Figures 2.4 and 2.5 show the pressure at the injection and recovery guard rings, respectively. For the injection guard ring, the gas pressure reproduced very well the experimental points, and, for the recovery guard ring, it was rather the liquid pressure that was closer to the data. However, this fitting was only possible with a permeability anisotropy $K_{rr}/K_{zz} = 25$ which is very high for the tested material. As mentioned by Harrington et al. (2013b), who used the same anisotropy for their simulations, this may indicate some leakage over the upper and lower surfaces of the sample and consequently makes the results of the guard ring pressures doubtful. However, as the authors reported, the axial permeability value, which essentially controls the flow rates, was rather insensitive whether leakage was considered or not.

Figure 2.6 shows a comparison between the volume change of the sample obtained by simulations and the corresponding experimental data. Bishop and Coussy formulations were found to largely underestimate the volume expansion : since p_λ was almost constant and $S_\gamma \simeq 0$ then $p_B = S_\lambda p_\lambda + S_\gamma p_\gamma$ was almost constant and $\dot{p}_C = S_\lambda \dot{p}_\lambda + S_\gamma \dot{p}_\gamma \simeq 0$ and by consequence $\Delta \underline{\hat{\sigma}}$ was close to $\underline{0}$. This result was expectable since both Coussy and Bishop formulations of the effective stress are more convenient for materials where the porous space is equitably shared between the two phases. However, for the case of a

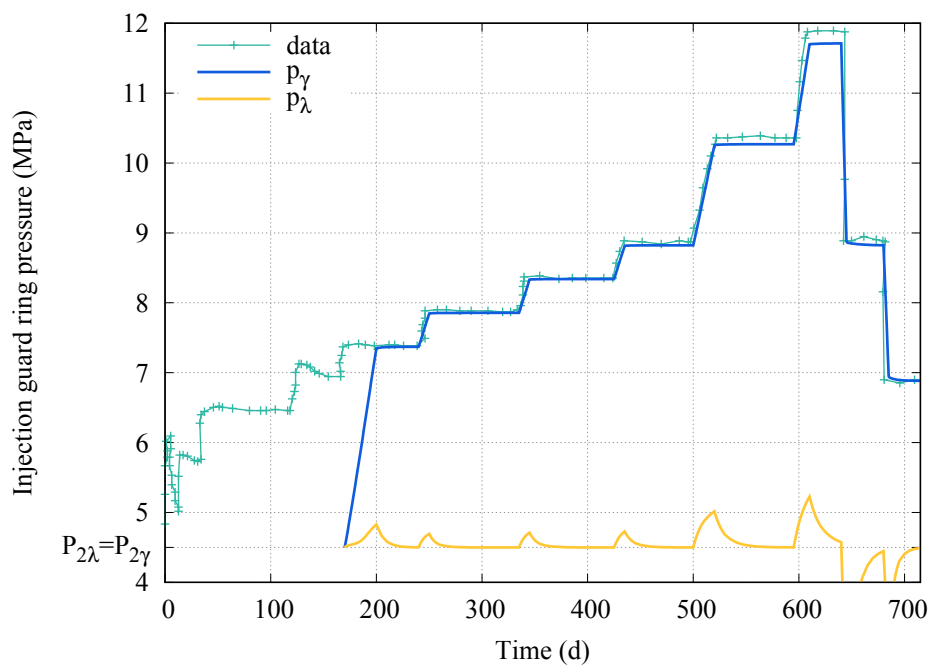


FIGURE 2.4 – Pressure at the injection guard ring.

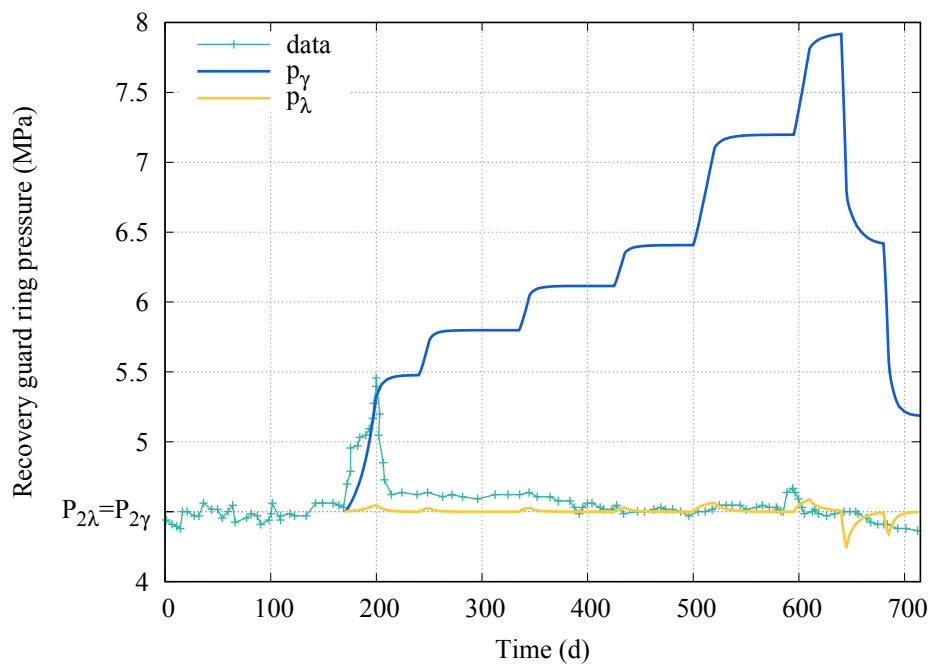


FIGURE 2.5 – Pressure at the recovery guard ring.

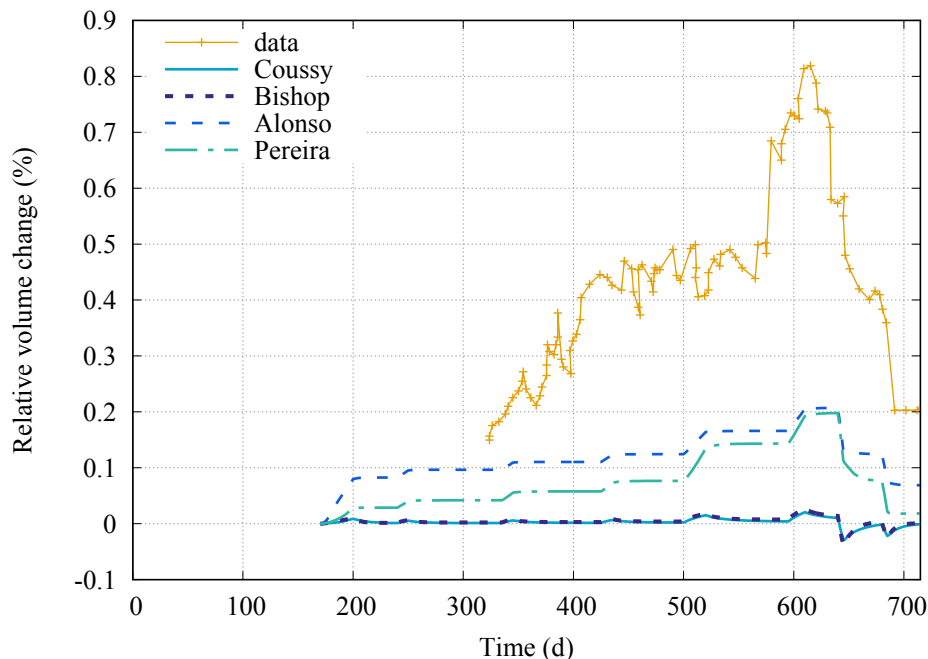


FIGURE 2.6 – Cumulative volume change using four definitions of the effective stress.

clayey material like argillite, the liquid phase is strongly attached to the solid matrix and the gaseous phase flows through discrete pathways by pushing the mixture of clay and water. The use of more suitable definitions of the effective stress (the Alonso (2.13) and Pereira (2.14) formulations) improved considerably the results, but was still insufficient to explain the experimentally observed expansion.

In fact, these formulations can be separated into two categories : (i) Coussy and Bishop formulations which are more accurate for “classical” porous media, where the solid matrix does not interact with the fluid phases that share equitably the porous network (for example, grained materials), and (ii) Alonso and Pereira formulations which were introduced for clayey materials, where the liquid phase is strongly linked to the solid matrix and the gas phase flows into the porous medium by creating its own pathways after pushing the mixture of clay and water. To illustrate this classification, the four formulations may be written in the same form $p = p_\gamma - \varpi(S_\lambda)p_c$ where $\varpi_B(S_\lambda) = S_\lambda$, $\varpi_A(S_\lambda) = 0$, $\varpi_P(S_\lambda) = \chi(S_\lambda)$ and $\varpi_C(S_\lambda) = \frac{1}{p_c} \int_0^{p_c} S_\lambda(x)dx$. Figure 2.7 represents the function $\varpi(S_\lambda)$ for the four formulations, using parameters in Table 2.1, and shows a clear distinction between the two categories.

The simulations presented above showed that the assumption of an elastic behavior for the solid matrix was not sufficient to explain the measured volume expansion of the sample. Another mechanism seemed to be responsible for those observations. A possible explanation was investigated : the damage of the elastic parameters due to the activation of the existing microcracks inside the sample. In fact, the small value of the Young modulus compared to the commonly measured values for the Bure argillite (ANDRA, 2012) and the small value of the breakthrough pressure compared to other tests (for example, for the same back-pressure, Cuss et al. (2014) measured a gas breakthrough at $P_{1\gamma} = 9.5$ MPa, whereas the breakthrough in this test is at 7.5 MPa) were indicators of the possible

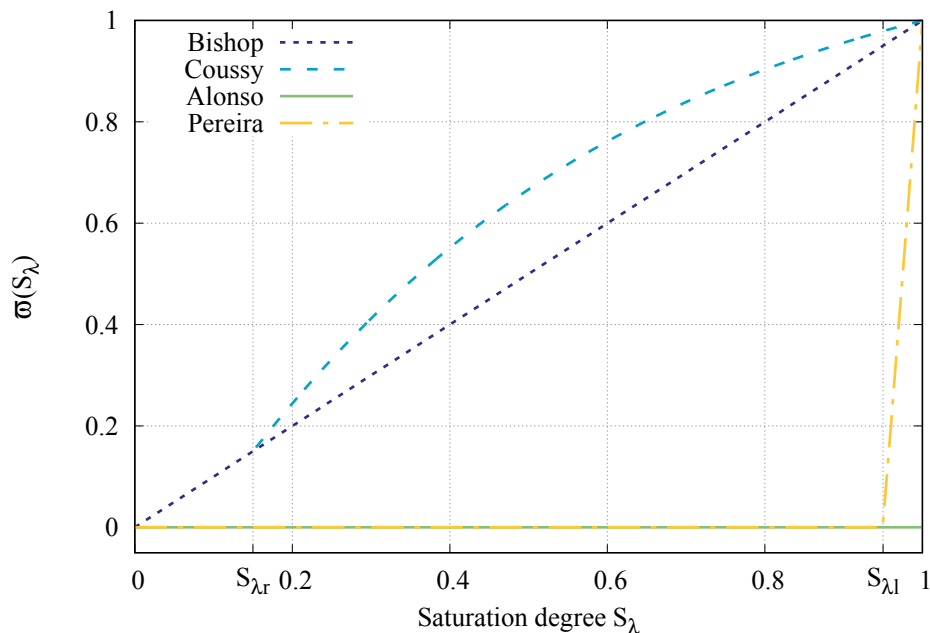


FIGURE 2.7 – Comparison between the different formulations of the function $\varpi(S_\lambda)$ using parameters from Table 2.1.

existence of microcracks in the sample. These features may evolve due to the gas flow, and thus cause a damage of the elastic parameters of the material. To account for this behavior, the damage model explained in equation (2.16) was employed. The model parameters a_1 and a_2 are given in Table 2.1.

This behavior law was coupled with the Alonso and Pereira pore pressure definitions (p_A and p_P), and new hydromechanical simulations were carried out. Satisfactory results were obtained for the sample volume change as can be seen in Figure 2.8. Notice that these results aimed only at explaining the order of magnitude of the measurements without a refined fitting, since the recorded values of the volume change were obtained from the hydraulic confining system, which may be not precise enough. Figure 2.9 shows the predicted evolution of the Young modulus during the injection test. Although the recovery of the Young modulus, when decreasing the injection pressure, may be explained by the self-sealing capacity of the COx, this aspect is still questionable and a more sophisticated model (either damage or elasto-viso-plastic model with proper evolution laws) is needed to investigate this point.

Regarding the hydraulic response, as demonstrated in Figure 2.10, the volume increase had a visible effect on the predicted flow rates especially in the transients, whereas the stabilization levels were the same with or without damage.

2.3.4 Numerical simulations of the filling stage (before breakthrough)

To complete the previous simulations, hydraulic calculations of the filling stage (before breakthrough time) were performed using the system of equations (2.9). The employed capillary curve and relative permeabilities were the same as in the previous simulations

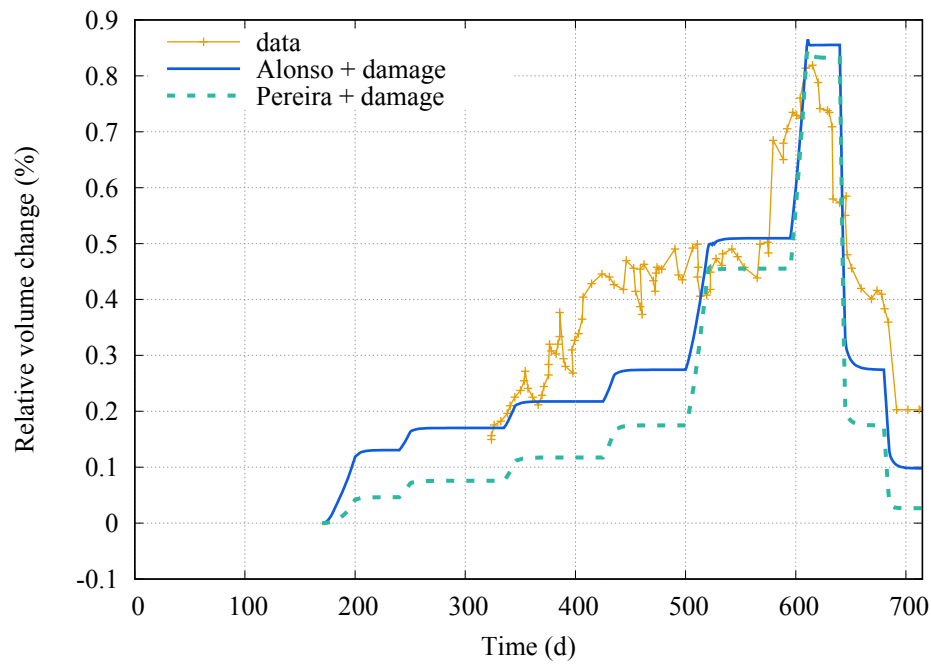


FIGURE 2.8 – Cumulative volume change using Alonso and Pereira definitions of the effective stress with the damage model.

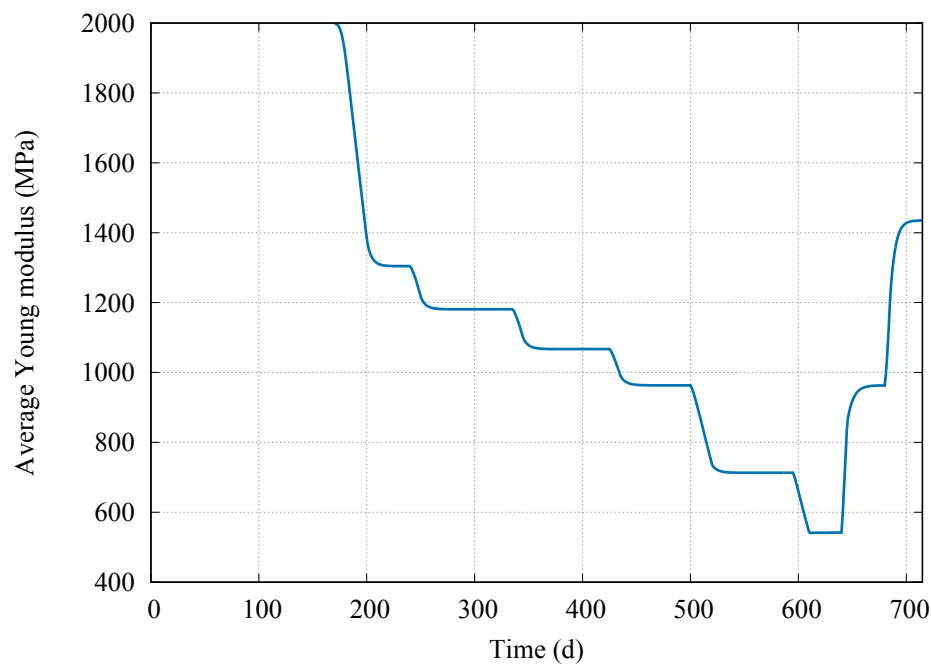


FIGURE 2.9 – Average Young modulus of the sample $(\frac{1}{V} \int_V E(\vec{x})dV)$ using Alonso definition of the effective stress with the damage model.

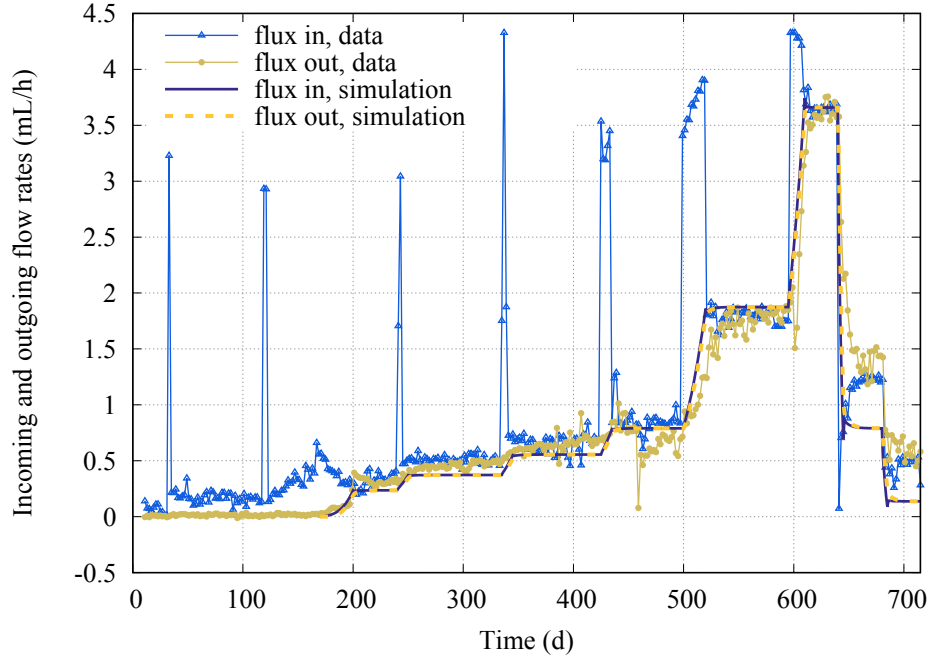


FIGURE 2.10 – Incoming and outgoing gas flow rates using Alonso formulation of the effective stress and the damage law (2.16).

(Table 2.1). However, the value of the intrinsic permeability fitted to the flow rate measurements ($K = 1.4 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$) was found to be unable to explain the observed breakthrough time (it yielded an earlier breakthrough time than observed during the experiment). A lower permeability ($K = 5.5 \cdot 10^{-22} \text{ m}^2$) was then necessary to match the experimental breakthrough time (170 days). This is graphically shown in Figure 2.11 in which the evolution of the sample volume fraction containing a gaseous phase is displayed for both permeability values. Figure 2.12 presents the boundary of this area at different moments. The breakthrough time was well reproduced using these parameters but at the detriment of the ingoing flow rate, that becomes too small compared to the data (not represented here). The difference between the parameters fitted to the breakthrough time (filling stage) and flow rate measurements (after breakthrough) indicated that the injected gas advanced in the sample along with damage which induced the observed increase of the permeability.

2.3.5 Comparison between the two experimental stages

When comparing the results of the two experiment stages (before and after breakthrough), one can notice that both mechanical and hydraulic properties of the material were significantly altered : not only the permeability was drastically increased after the breakthrough but also the material rigidity was deteriorated. It seems that the gas breakthrough phenomenon was directly related to the mechanical damage of the material. At the beginning of the test, when the gas pressure reached a certain level next to the injection face, the material started to be damaged, and consequently the material permeability started to increase. The damage was then propagated through the sample (along with the permeability increase) starting from the injection face towards the recovery face which explains the important values of ongoing flow rates at this stage (which could not be explained by

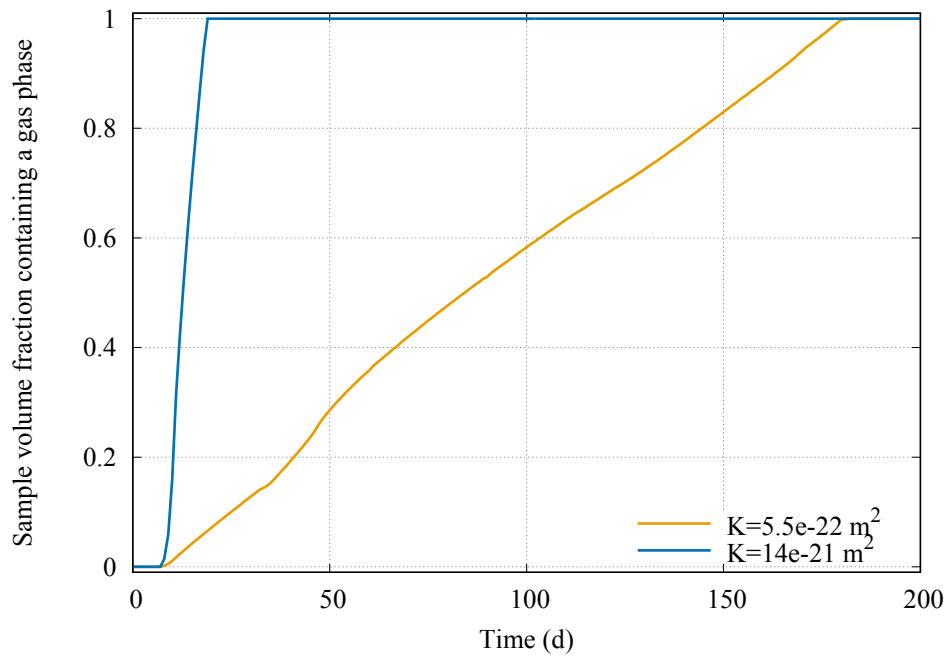


FIGURE 2.11 – Evolution of the sample volume fraction containing a gaseous phase.

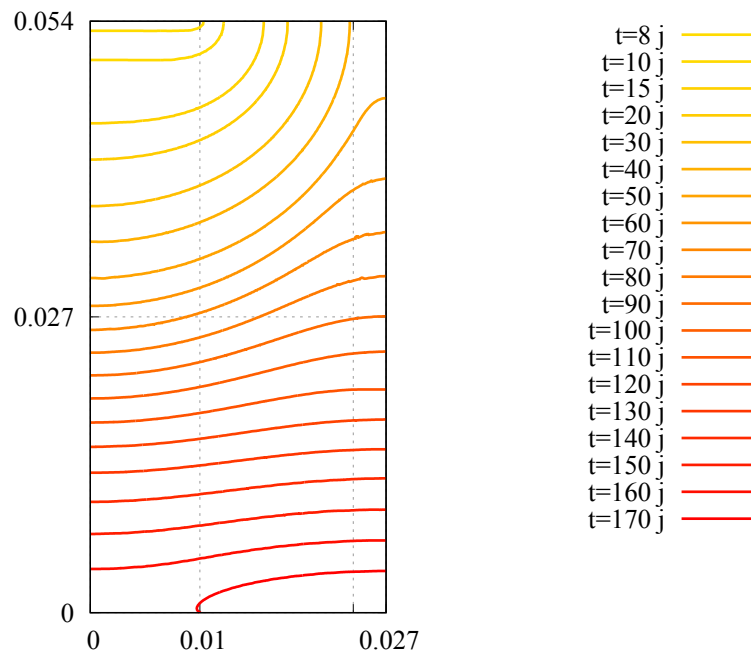


FIGURE 2.12 – Boundary of the area containing a gaseous phase at different moments (gas is injected from the upper face).

the permeability fitted to the breakthrough time). Afterwards, when the cracks became diffuse and reached the recovery face, the breakthrough phenomenon occurred and the global sample permeability was significantly increased, which explains the fitted values to the flow rates starting from the breakthrough time. Simultaneously, this damage led to an important increase of the sample volume as discussed above.

2.4 Model validation on a different test

To confirm the modeling hypotheses assumed in the previous section, the damage model was applied to a second experiment, the SPP (stress-path permeameter) test conducted by Cuss et al. (2014). It was also a gas injection test using the same apparatus as before and conducted on an argillite sample (named SPP-COx-2) with different dimensions ($L = 82.5$ mm and $D = 55.9$ mm). The main difference between those two tests, besides the injection history, was the accurate measurements of the axial and radial displacements (radial displacement was measured in three different points on the lateral surface of the sample). Moreover, unlike the first test, the bedding plane was parallel to the sample axis in this experiment. Therefore, the problem can be regarded in an axisymmetric configuration only if the material was assumed isotropic. In the anisotropic case, 3D simulations should be considered. In the present work, the two configurations were tested.

The numerical simulations were performed starting from the breakthrough time. The hydromechanical parameters (including the damage function (2.16) and the effective stress definition of Pereira et al. (2.14)) were held the same as in the previous experiment except for the permeability and the rigidity, which were fitted to the experimental data through two simulation configurations : 2D axisymmetric simulations using an isotropic material ($K = 5.10^{-20}$ m² and $E = 5500$ MPa), and 3D simulations using isotropic permeability and anisotropic rigidity ($K = 5.10^{-20}$ m², $E = 4500$ MPa, and $E/E' = 1.3$ where E and E' are the Young moduli in the bedding plane and perpendicular to it, respectively).

Figure 2.13 shows a comparison between the equivalent pressure p_p and the measured values at the injection and recovery guard rings (only the 2D results were presented since there was no significant difference with the 3D computations). The predicted values were rather acceptable. Figures 2.14 and 2.15 present the obtained displacements with 2D and 3D simulations, respectively. A good agreement between the theoretical predictions and experimental measurements was obtained. These results could be regarded as a confirmation of the hypotheses presented above about the pore pressure definition and the gas-induced damage. In fact, both hydraulic and mechanical responses of the material were fitted using the same damage function and the same effective stress definitions for two different samples. Concerning the different values of permeability and rigidity, it can be explained by the fact that the first sample was initially damaged (small measured rigidity and breakthrough pressure), whereas the SPP-COx-2 sample was rather undisturbed (which is in accordance with the fitted permeability and Young moduli).

2.5 Conclusions

To model the propagation of a gas (hydrogen for a radioactive waste project or a safe substitute for laboratory experiments) into an initially water-saturated rock, the first

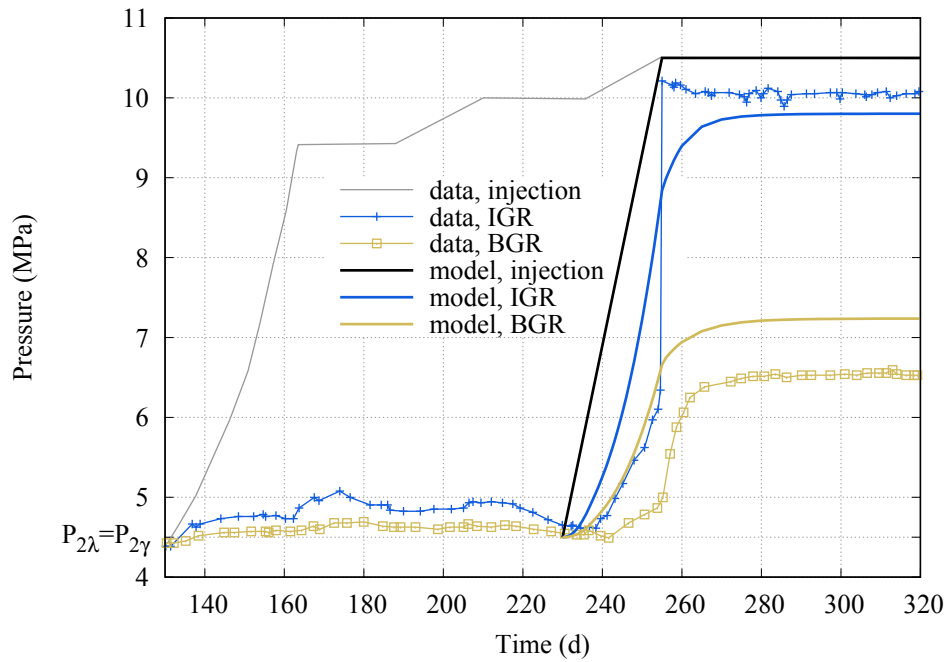


FIGURE 2.13 – Equivalent pressure p_p compared to experimental data for the SPP-COx-2 test (IGR : injection guard ring, BGR : back-pressure guard ring) after breakthrough time (gas injection started after 130 days).

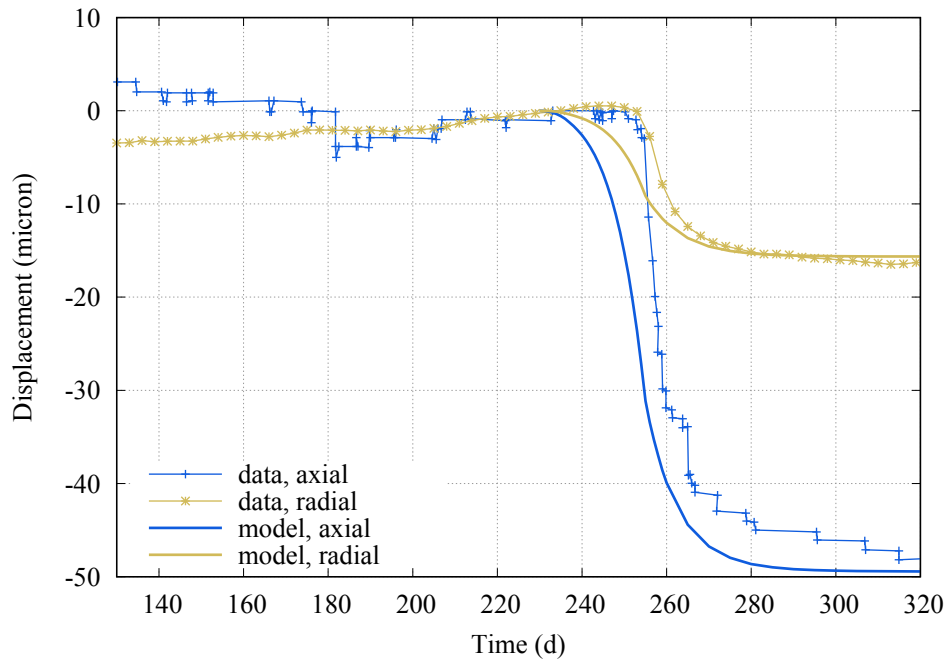


FIGURE 2.14 – Theoretical axial and radial (mean of the three measurements) displacements compared to experimental measurements (2D model).

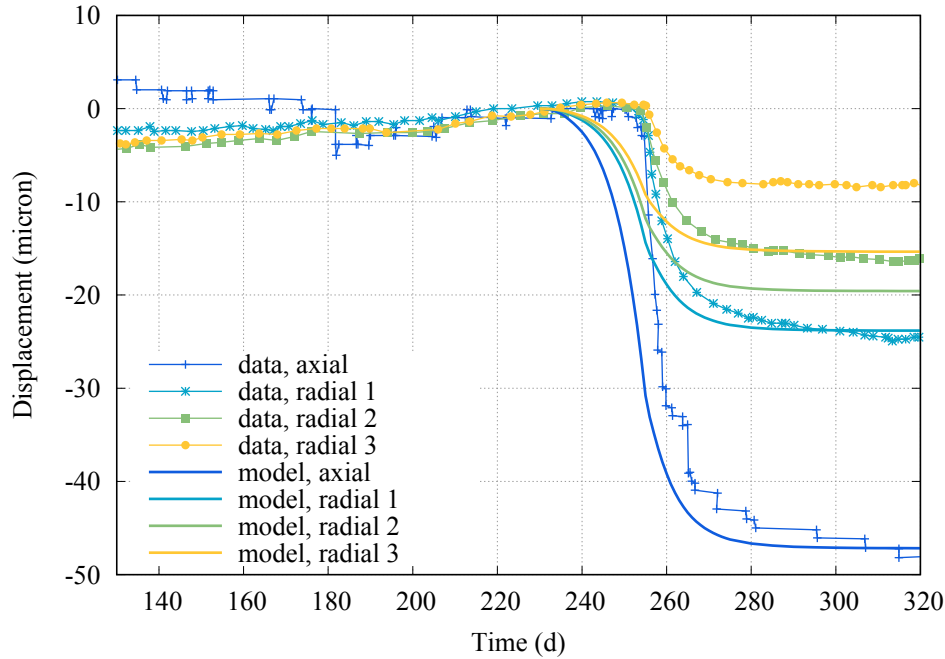


FIGURE 2.15 – Theoretical axial and radial displacements with an anisotropic material compared to experimental measurements (3D model).

part of this paper was dedicated to the description of the necessary hydromechanical equations accounting for gas diffusion and dissolution into water and advective flows of gas and water. Then, the theoretical equations were used in numerical codes to perform hydromechanical simulations of two gas injection tests into an initially saturated rock under isotropic confining pressure. The two stages of these tests, before and after gas breakthrough, were simulated separately and showed that a significant change in both mechanical and hydraulic properties occurred during those experiments. On the one hand, the permeability fitted to the breakthrough time was found to be very small compared to the permeability fitted to the flow rates; and, on the other hand, the introduction of a damage model was necessary to explain the registered sample expansion due to gas injection especially after the breakthrough.

These observations may be explained by the simultaneous advance of gas and damage through the sample. When the gas reached a certain level, the increase of capillary pressure (or suction) induced the damage of the material, which caused the degradation of the hydraulic properties (permeability and capillary curve). Consequently, the gas front advanced along with the damage front until they reached the recovery face of the sample and led to gas breakthrough and volume increase.

These conclusions require, however, to be validated, in future works, by a more complete hydromechanical model. For the mechanical response, as discussed in this paper, the classical effective stress formulations seemed to be not appropriate to describe the behavior of the COx in the gas injection experiments. A formulation taking into account the fact that the water is strongly attached to the solid phase should be employed. Besides, the capillary pressure should be involved to define the evolution law of the mechanical internal variables such as damage or visco-plastic strain. As for the hydraulic part, the permeability and the capillary curve have to be defined as functions of the mechanical damage in such

a way that both breakthrough time and flow rates could be simultaneously reproduced.

2.A Appendix : Determination of flow rates at atmospheric pressure

In the gas injection experiments, volumetric flow rates of the mixture (water, gaseous and dissolved helium) were measured at atmospheric pressure. Hence, one had to account for the possible changes in densities and liquid composition due to the transformation from the boundary condition pressures to atmospheric pressure. Indeed, at a given time, the recovered (or equivalently injected) volume next to the recovery face of the sample contained gas at pressure p_γ^0 and liquid at pressure p_λ^0 with an initial concentration of helium. Let's denote m_γ^0 , $m_{h\lambda}^0$, and $m_{w\lambda}^0$ the mass of gaseous helium, dissolved helium, and water in this volume, respectively. When transformed to atmospheric pressure $p_\gamma^1 = p_\lambda^1 = P_{atm}$, a new dissolved helium concentration was obtained and by consequence a new set of masses have to be computed m_γ^1 , $m_{h\lambda}^1$, and $m_{w\lambda}^1$.

Equations of state of the different components 2.7 and Henry's law 2.8 were used to update their densities :

$$\rho_\gamma^1 = \frac{M_h}{RT} P_{atm} \quad ; \quad \rho_{h\lambda}^1 = \frac{M_h}{K_H} P_{atm} \quad ; \quad \rho_{w\lambda}^1 = \rho_{w\lambda}^0 \exp\left(-\frac{RT P_{atm}}{K_H K_w}\right)$$

Mass conservation equations for h and w were written for this transformation as follows :

$$m_\gamma^0 + m_{h\lambda}^0 = m_\gamma^1 + m_{h\lambda}^1 \quad ; \quad m_{w\lambda}^0 = m_{w\lambda}^1$$

Knowing that $m_{w\lambda} = \rho_{w\lambda} V_\lambda$, it follows that $V_\lambda^1 = m_{w\lambda}^1 / \rho_{w\lambda}^1 = m_{w\lambda}^0 / \rho_{w\lambda}^0$. Moreover, since $m_{h\lambda} = \rho_{h\lambda} V_\lambda$ then $m_{h\lambda}^1 = \frac{\rho_{h\lambda}^1}{\rho_{w\lambda}^1} m_{w\lambda}^0$. The conservation equation of h leads to $m_\gamma^1 = m_\gamma^0 + m_{h\lambda}^0 - m_{h\lambda}^1 = m_\gamma^0 + \left(1 - \frac{P_{atm} \rho_{w\lambda}^0}{p_\gamma^0 \rho_{w\lambda}^1}\right) m_{h\lambda}^0$. Finally, since $V_\gamma^1 = m_\gamma^1 / \rho_\gamma^1$, the corresponding volume at atmospheric pressure can therefore be written as :

$$V^1 = V_\lambda^1 + V_\gamma^1 = \frac{m_{w\lambda}^0}{\rho_{w\lambda}^1} + \frac{m_\gamma^0}{\rho_\gamma^1} + \left(1 - \frac{P_{atm} \rho_{w\lambda}^0}{p_\gamma^0 \rho_{w\lambda}^1}\right) \frac{m_{h\lambda}^0}{\rho_\gamma^1} \quad (2.A.1)$$

If the volumetric flow rate at atmospheric pressure was denoted ϕ and the mass flow rates (given by a numerical code) of gaseous helium, dissolved helium and water were denoted φ_γ , $\varphi_{h\lambda}$, and $\varphi_{w\lambda}$, respectively, then one can conclude that :

$$\phi = \frac{\varphi_{w\lambda}}{\rho_{w\lambda}^1} + \frac{\varphi_\gamma}{\rho_\gamma^1} + \left(1 - \frac{P_{atm} \rho_{w\lambda}^0}{p_\gamma^0 \rho_{w\lambda}^1}\right) \frac{\varphi_{h\lambda}}{\rho_\gamma^1} \quad (2.A.2)$$

Chapitre 3

Une approche de modélisation du comportement mécanique des matériaux isotropes transverses

Ce chapitre est consacré à la mise en place d'une nouvelle approche de modélisation du comportement mécanique des matériaux isotropes transverses basée sur l'idée d'une équivalence entre le matériau réel et un matériau isotrope fictif. Même si les développements mathématiques sont assez élaborés, l'utilisation pratique de cette méthode est très simple. Cette approche permet d'étendre n'importe quelle loi de comportement des matériaux isotropes vers les matériaux isotropes transverses moyennant une transformation tensorielle qui ne fait intervenir que deux paramètres supplémentaires qui sont les paramètres élastiques du matériau isotrope fictif. En plus, comparée au modèle de comportement du matériau isotrope, cette méthode ne rajoute pas beaucoup de complications numériques lors de l'implémentation dans un code de calcul. Ce processus de modélisation est appliqué pour adapter la fonction de charge de Drucker-Prager et une loi d'endommagement anisotrope aux matériaux isotropes transverses. Les résultats de ces modèles ont été comparés aux données expérimentales d'essais de compression triaxiale et d'essais brésiliens avec plusieurs orientations et pour plusieurs roches sédimentaires. La pertinence de l'approche de modélisation a été prouvée surtout lorsque l'anisotropie des déformations n'est pas trop prononcée.

An approach to model the mechanical behavior of transversely isotropic materials

Abstract

The present work proposes an approach to adapt existing isotropic models to transversely isotropic materials. The main idea is to introduce equivalence relations between the real material and a fictitious isotropic one on which one can take all the advantages of the well established isotropic theory. Two applications of this approach are presented here : a failure criterion and a damage model that takes into account the load-induced anisotropy. In both cases, theoretical predictions are in agreement with the experimental data. In the present paper, the developed approach is applied to sedimentary rock materials, nevertheless, it can be generalized to any material that exhibits transverse isotropy.

Keywords : Transverse isotropy, Anisotropy, Damage behavior law, Failure criteria, Brazilian test

3.1 Introduction

In rock engineering, anisotropy is an important aspect that has to be taken into account. This material feature has been a long-standing issue in geomechanics. Multiple studies are interested in this problem since the early developmental stages of rock mechanics (Boehler, 1986; Amadei, 1996; Hobbs, 1964, 1965, 1967; Barla et Innaurato, 1973; Barron, 1971; Hudson, 1969; Fine et Vouille, 1970; Nova et Zaninetti, 1990). Recently, new applications such as nuclear waste disposal in argillaceous formations and shale gas exploitation increased the interest to characterize these materials (Fjær et al., 2013; Crawford et al., 2012; Rouabhi et al., 2007; Ambrose et al., 2014; Tien et Kuo, 2001; Cho et al., 2012; Rejeb, 1999; Vervoort et al., 2014; Claesson et Bohloli, 2002; Chen et al., 1998; Exadaktylos et Kaklis, 2001; Chen et Hsu, 2001; Dan et Konietzky, 2014; Tavallali et Vervoort, 2010, 2013; Dan, 2011; Dan et al., 2013; Barpi et al., 2012). Rocks anisotropy may be caused by mineral foliation, stratification or discontinuities. For the sake of simplification, it is generally admitted that the elastic behavior of sedimentary rocks like shales and schists can be reasonably described by transverse isotropy characterized by five independent parameters. It has been proven that the assumption of complete symmetry (isotropy) for this kind of materials may induce large errors in the measured *in situ* stress field (Amadei, 1996). Moreover, this work being in the framework of the french nuclear waste disposal project in an argillaceous rock of the region of Bure, the anisotropic behavior of the considered rock must be more studied (*c.f.* Giot et al. (2012) and (ANDRA, 2012, chapter 2))

Besides the characterization of the deformation anisotropy (determination of elastic constants) (Cho et al., 2012; Rejeb, 1999), special attention was paid to the compression (Cho et al., 2012; Rejeb, 1999; Rouabhi et al., 2007; Ambrose et al., 2014; Tien et Kuo, 2001; Crawford et al., 2012; Fjær et al., 2013) and tensile (Cho et al., 2012; Claesson et Bohloli, 2002; Chen et al., 1998; Exadaktylos et Kaklis, 2001; Chen et Hsu, 2001;

Dan et Konietzky, 2014; Tavallali et Vervoort, 2010, 2013; Dan, 2011; Dan et al., 2013; Vervoort et al., 2014; Hobbs, 1964, 1965, 1967; Barla et Innaurato, 1973; Barron, 1971; Hudson, 1969; Fine et Vouille, 1970; Barpi et al., 2012) strength anisotropy. Experimental, analytical and numerical investigations was made in order to examine the effect of the bedding plane orientation on the material response to some mechanical experiments such as triaxial compression, Brazilian, ring and bending tests.

Numerous studies attempted to model the mechanical behavior of transversely isotropic materials. Multiple failure criteria were developed and compared to experimental results of triaxial compression tests (Rouabhi et al., 2007; Ambrose et al., 2014; Crawford et al., 2012; Fjær et al., 2013; Tien et Kuo, 2001). Rouabhi et al. (2007) proposed a viscoplastic constitutive model in order to characterize triaxial creep tests. A fracture mechanics approach was used by Barpi et al. (2012) in order to analyze experimental results of three-point-bend tests on semi-cylindrical samples of argillite. On the other hand, a crack propagation method was employed to define anisotropic damage behavior laws for transversely isotropic materials (*cf.* (Kolari, 2007, chapter 4 and 5) and (Gatelier, 2001, chapter 5 and 6)). However, a general methodology to introduce such a model is not yet available.

In order to define a general procedure to produce mechanical behavior models for transversely isotropic materials, the present work proposes an approach to adapt existing isotropic models. This method consists in a three steps process. First, a fictitious equivalent isotropic material is introduced. Second, an isotropic model is chosen to characterize the new material. Finally, equivalence relations are used to adapt this model to the real material. A transformation between the behavior of the real anisotropic material and that of an isotropic fictitious one is introduced. This idea is proposed by Car et al. (2001) to simulate the non-linear constitutive behavior of composite materials and used in Rouabhi et al. (2007) to define a viscoplastic behavior law and two failure criteria. The respect of the material symmetry is ensured by the application of the representation theorem (*cf.* (Truesdell et Noll, 2004, part B)).

As a first application of this approach, a failure criterion based on the Drucker-Prager one is adapted to transversely isotropic materials. In addition to the two parameters of the Drucker-Prager criterion, the elastic moduli of the fictitious isotropic material need to be determined. Therefore, the new criterion is characterized by four adjusting parameters. These material constants are identified for four different rocks using uniaxial and triaxial compression tests for samples with different bedding orientations (Cho et al., 2012; Rejeb, 1999).

On the other hand, a damage constitutive model taking into account both initial and induced anisotropy is introduced. This model is based on works Rouabhi et al. (2005); Carol et al. (2001a,b) and chapter 2 of Rouabhi (2004) where a damage second order tensor is considered. The definition and evolution of the damage is established for the fictitious isotropic material and afterward transferred to the real material. Numerical simulations of the Brazilian test for three rocks using this behavior law are presented and compared to experimental data from Cho et al. (2012).

The constitutive law proposed in this paper is the cornerstone of a more complete model coupling the mechanical damage with the fluid flow and the heat transfer in the material. Nevertheless, for the sake of clarity, in this paper, the effective stress tensor in the poromechanics framework and the mechanical strain tensor will be simply called stress

and strain tensor respectively. Moreover, the transformation from the real material to the fictitious isotropic one concerns only the mechanical behavior and not the other material properties such as permeability $\underline{\underline{K}}$ and coefficient of thermal expansion $\underline{\underline{\alpha}}$.

This paper is organized as follows. In section 2, the approach of equivalent isotropic material is explained and the necessary relations are listed. In section 3, this procedure is applied to define failure criteria for transversely isotropic materials and the example of the Drucker-Prager criterion is detailed and fitted on experimental measures of the shear strength with different orientation angles. Section 4 describes an anisotropic damage behavior law for transversely isotropic materials based on the equivalent isotropic material method. The model parameters are fitted using measures of the tensile strength. Afterward, the behavior law is used to simulate 3D Brazilian tests with different orientation angles and the results are compared to experimental data. At the end of this paper, Appendix 3.A presents some mathematical definitions used in our development concerning second order and fourth order tensors.

Notations Throughout this paper, a first order tensor (vector) is designed by an arrow over an undercase letter (\vec{a}), a second order one is denoted by two lines under a letter ($\underline{\underline{a}}$) and a fourth order tensor is designed by a tilde beneath a capital letter ($\underline{\underline{\tilde{A}}}$). Superscript ‘ t ’ indicates the transpose operation, while ‘tr’ is the trace operator. Symbol ‘ $:$ ’ denotes the product with double contraction, e.g. $\underline{\underline{a}} : \underline{\underline{b}} = a_{ij}b_{ji}$, where the index denotes cartesian components and repeated subscript imply summation unless otherwise indicated. The product $\underline{\underline{a}} \underline{\underline{b}}$ denotes a single contraction, *i.e.* $(\underline{\underline{a}} \underline{\underline{b}})_{ij} = a_{ik}b_{kj}$. In the same way, the product $\underline{\underline{\tilde{A}}}\underline{\underline{\tilde{B}}}$ is defined as $(\underline{\underline{\tilde{A}}}\underline{\underline{\tilde{B}}})_{ijkl} = A_{ijmn}B_{nmkl}$. The dyadic or tensor products are $(\underline{\underline{a}} \otimes \underline{\underline{b}})_{ijkl} = a_{ij}b_{kl}$ and $(\vec{a} \otimes \vec{b})_{ij} = a_ib_j$. Symbol ‘ $\underline{\underline{\otimes}}$ ’ denotes the symmetrized dyadic product defined as $(\underline{\underline{a}} \underline{\underline{\otimes}} \underline{\underline{b}})_{ijkl} = \frac{1}{2}(a_{ik}b_{jl} + a_{il}b_{jk})$. The second-order $\underline{\underline{1}}$ and the fourth-order $\underline{\underline{\tilde{1}}}$ are identity tensors.

3.2 Equivalent fictitious isotropic material approach

Given a transversely isotropic material where the stress tensor $\underline{\underline{\sigma}}$ and strain tensor $\underline{\underline{\varepsilon}}$ are linked by the transversely isotropic Hooke tensor $\underline{\underline{H}}(E, E', \nu, \nu', G)$ (see equation 3.A.14), a fictitious isotropic material is defined where the stress $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$ and strain $\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}$ are linked by an isotropic tensor $\underline{\underline{\bar{H}}}$ associated to the fictitious elastic parameters $(\bar{E}, \bar{\nu})$. The real and the fictitious stress can be related by a second order tensorial transformation function $\underline{\underline{\ell}}$:

$$\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \underline{\underline{\ell}}(\underline{\underline{\sigma}}) \quad (3.2.1)$$

This function must respect material symmetry. In this work, $\underline{\underline{\ell}}$ is assumed linear. Therefore, this transformation may be represented by a fourth order transversely isotropic

tensor $\underline{\underline{L}}$:

$$\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}} \quad (3.2.2)$$

In order to relate the real and fictitious strain, three approaches are used in the literature : strain equivalence, stress equivalence and energy equivalence. Among these approaches, only the latter can ensure the symmetry of the equivalent stiffness tensor. For that reason, the equivalence of energy is employed here and the restrictive relation $\underline{\underline{\bar{\sigma}}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}} = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}}$ is used leading to :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}} \quad (3.2.3)$$

Combining equations 3.2.2 and 3.2.3 and given that $\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \underline{\underline{\bar{H}}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}$, it follows :

$$\underline{\underline{\bar{H}}} = \underline{\underline{L}} \underline{\underline{H}} \underline{\underline{L}} \quad (3.2.4)$$

In order to drive the expression of $\underline{\underline{L}}$ as a function of $\underline{\underline{H}}$ and $\underline{\underline{\bar{H}}}$, the general problem $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{L}} \underline{\underline{B}} \underline{\underline{L}}$ for any positive definite tensors $\underline{\underline{A}}$, $\underline{\underline{B}}$ and $\underline{\underline{L}}$ is solved. Multiplying this equation by $\underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}}$ on the left and on the right, one gets $\underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{A}} \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} = \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{L}} \underline{\underline{B}} \underline{\underline{L}} \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}}$. By writing $\underline{\underline{B}} = \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}}$, $\left(\underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{L}} \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}}\right)^2 = \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{A}} \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}}$ is obtained. Finally :

$$\underline{\underline{L}} = \underline{\underline{B}}^{-\frac{1}{2}} \left(\underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{A}} \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}}\right)^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{B}}^{-\frac{1}{2}} \quad (3.2.5)$$

Writing equation 3.2.4 in the form $\underline{\underline{H}}^{-1} = \underline{\underline{L}} \underline{\underline{\bar{H}}}^{-1} \underline{\underline{L}}$, replacing $\underline{\underline{A}}$ by the transversely isotropic tensor $\underline{\underline{H}}^{-1}$ and $\underline{\underline{B}}$ by the isotropic tensor $\underline{\underline{\bar{H}}}^{-1}$ and using the basis 3.A.3 ($\underline{\underline{I}}, \underline{\underline{J}}_1, \underline{\underline{J}}_2, \underline{\underline{J}}_3, \underline{\underline{J}}_4, \underline{\underline{J}}_5$) (in which, as explained in Appendix 3.A, subsection 3.A.4, a transversely isotropic tensor $\underline{\underline{A}}$ can be represented by a 2×2 matrix $[A]$ and two eigenvalues \hat{a}_4 and \hat{a}_5), one obtains :

$$[L] = [\bar{H}^{\frac{1}{2}}] \left([\bar{H}^{-\frac{1}{2}}][H^{-1}][\bar{H}^{-\frac{1}{2}}]\right)^{\frac{1}{2}} [\bar{H}^{\frac{1}{2}}], \quad \hat{\ell}_4 = \sqrt{\hat{h}_4/\hat{h}_4}, \quad \hat{\ell}_5 = \sqrt{\hat{h}_5/\hat{h}_5} \quad (3.2.6)$$

Finally, the following expressions of $\hat{\ell}_i$ as function of (E, E', ν, ν', G) and $(\bar{E}, \bar{\nu})$ can be derived :

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_1 &= \sqrt{\bar{E}} \cdot \frac{\hat{h}_1 + \sqrt{(\bar{b}/\bar{a})}\gamma}{\Delta}, \quad \hat{\ell}_2 = \sqrt{\bar{E}} \cdot \frac{\hat{h}_2}{\Delta}, \quad \hat{\ell}_3 = \sqrt{\bar{E}} \cdot \frac{\hat{h}_3 + \sqrt{(\bar{a}/\bar{b})}\gamma}{\Delta}, \\ \hat{\ell}_4 &= \sqrt{\bar{E}} \cdot \sqrt{\frac{\hat{h}_4}{\bar{b}}}, \quad \hat{\ell}_5 = \sqrt{\bar{E}} \cdot \sqrt{\frac{\hat{h}_5}{\bar{b}}} \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

where $\bar{a} = 1 - 2\bar{\nu}$, $\bar{b} = 1 + \bar{\nu}$, $\gamma = \sqrt{\hat{h}_1\hat{h}_3 - \hat{h}_2^2}$, $\Delta = \sqrt{\bar{a}\hat{h}_1 + \bar{b}\hat{h}_3 + 2\sqrt{\bar{a}\bar{b}}\gamma}$ and \hat{h}_i and $\hat{\hat{h}}_i$ are the components of the tensor $\underline{\underline{H}}^{-1}$ and $\underline{\underline{\bar{H}}}^{-1}$ in the basis 3.A.3, respectively, and are expressed using the equations 3.A.16, 3.A.13 and 3.A.14 :

$$\begin{aligned} \hat{h}_1 &= \frac{1}{3} [2(1 - \nu)/E + (1 - 4\nu')/E'], \quad \hat{h}_2 = \frac{\sqrt{2}}{3} [(1 - \nu)/E - (1 - \nu')/E'], \\ \hat{h}_3 &= \frac{1}{3} [(1 - \nu)/E + 2(1 + 2\nu')/E'], \quad \hat{h}_4 = (1 + \nu)/E \quad \hat{h}_5 = 1/2G \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

$$\hat{h}_1 = (1 - 2\bar{\nu})/\bar{E}, \quad \hat{h}_2 = 0, \quad \hat{h}_3 = \hat{h}_4 = \hat{h}_5 = (1 + \bar{\nu})/\bar{E} \quad (3.2.9)$$

For a given elastic tensor $\underline{\underline{H}}$, an infinity of isotropic equivalent materials, each one defined by the couple $(\bar{E}, \bar{\nu})$, can be built. For instance, these parameters may be fixed in such a way that the distance between $\underline{\underline{H}}$ and $\underline{\underline{\tilde{H}}}$ be minimized, anyway, it is preferred here to keep rather $(\bar{E}, \bar{\nu})$ free to take into account the observed independence between the elastic behavior and damage.

The developed approach makes it possible to extend existing isotropic constitutive models to transversely isotropic materials using only two parameters $(\bar{E}, \bar{\nu})$ with clear physical meaning (a Young modulus is always positive and a Poisson ratio is always included between -1 and 0.5). Moreover, this method allows the model to preserve the main features of the fictitious isotropic material and to take into account the initial anisotropy of the real material. In addition, such a constitutive model can be easily implemented in a numerical code. In fact, compared to a model for isotropic materials, only slight differences have to be considered. Generally, in numerical codes, either the stress or strain tensor is provided at each time step. For a given $\underline{\underline{\sigma}}$ (resp. $\underline{\underline{\varepsilon}}$), equation 3.2.2 (resp. 3.2.3) is used to compute $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$ (resp. $\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}$). Afterwards, the fictitious behavior law is used to compute $\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}$ (resp. $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$) and internal variables. Finally, $\underline{\underline{\varepsilon}}$ (resp. $\underline{\underline{\sigma}}$) is derived using equation 3.2.3 (resp. 3.2.2). Consequently, compared to the isotropic model, the constant tensor $\underline{\underline{L}}$ (resp. $\underline{\underline{L}}^{-1}$) need to be recorded, only one time for all time steps and all material elements, and 2 extra-operations are required $\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\sigma}}$ and $\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}$ (resp. $\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}} = \underline{\underline{L}}^{-1} : \underline{\underline{\varepsilon}}$ and $\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{L}}^{-1} : \underline{\underline{\bar{\sigma}}}$).

3.3 Failure criteria

It is of a big interest to adapt isotropic failure criteria to anisotropic materials. To illustrate the approach idea, in the following, as an example, the well known Drucker-Prager criterion is considered. Obviously, the approach can be extended to any criterion.

The general form of a failure surface can be expressed by a scalar-valued function $F(\underline{\underline{\sigma}})$ which describes the failure envelope in six-dimensional stress space. For transversely isotropic materials, any scalar function can be expressed as $F(\underline{\underline{\sigma}}) = \bar{F}(\underline{\underline{\bar{\sigma}}})$ where \bar{F} and $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$ are invariant relative to the orthogonal second order tensors space. The tensor $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$ can be the fictitious one already introduced and the advantage of using $\bar{F}(\underline{\underline{\bar{\sigma}}})$ instead of $F(\underline{\underline{\sigma}})$ is that one can make use of failure surfaces developed for isotropic materials.

To respect the material symmetry, \bar{F} must only depend on the invariants of $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$. In particular, \bar{F} can be expressed in terms of the invariants $(\bar{p}, \bar{q}, \bar{\theta})$ where $\bar{p} = -\text{tr}(\underline{\underline{\bar{\sigma}}})/3$ is the mean stress value, $\bar{q} = \sqrt{\frac{3}{2} \underline{\underline{\bar{\sigma}}}' : \underline{\underline{\bar{\sigma}}}'}$ is the stress deviator, $\bar{\theta} = \arccos(\frac{3}{2} \frac{\bar{\sigma}'_1}{\bar{q}})$ is the Lode angle and $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}' = \underline{\underline{\bar{\sigma}}} + \bar{p}\underline{\underline{1}}$ is the deviatoric stress tensor.

In the particular case of the Drucker-Prager criterion, the failure surface is independent of the Lode angle and one needs to express only \bar{p} and \bar{q} as functions of $\underline{\underline{\sigma}}$ and $\underline{\underline{e}}$. To do this easily, one starts by writing the equation 3.2.2 in the same form as 3.A.11. Thereafter,

the use of the definitions of \bar{p} and \bar{q} leads to :

$$\bar{p} = \alpha_1 p + \alpha_2 \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{e}}); \quad \bar{q}^2 = \alpha_3 q^2 + \alpha_4 p^2 + \alpha_5 \text{tr}^2(\underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{e}}) + \alpha_6 p \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{e}}) + \alpha_7 \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}}^2 \underline{\underline{e}}) \quad (3.3.1)$$

where $\alpha_1 = 3\ell_1 + \ell_2 + \ell_4$, $\alpha_2 = -(\ell_3 + 3\ell_4 + 2\ell_5)/3$, $\alpha_3 = \ell_2^2$, $\alpha_4 = 9(\ell_4^2 - \ell_2\ell_4)$, $\alpha_5 = \ell_3^2 + \ell_5^2 + 4\ell_3\ell_5 + 3\ell_2\ell_3$, $\alpha_6 = -3(-\ell_2\ell_3 + 3\ell_2\ell_4 - 2\ell_2\ell_5 + 2\ell_3\ell_4 + 4\ell_4\ell_5)$ and $\alpha_7 = 3\ell_5(2\ell_2 + \ell_5)$. The coefficients ℓ_i for $i = 1..5$ are the components of the tensor $\underline{\underline{L}}$ using the writing 3.A.12 and can be determined using equations 3.A.16 and 3.2.7.

The Drucker-Prager failure surface can then be expressed as :

$$\bar{F}(\underline{\underline{\sigma}}) = \bar{q} - \bar{\alpha}_1 \bar{p} - \bar{\alpha}_2 = 0 \quad (3.3.2)$$

where $\bar{\alpha}_1$ and $\bar{\alpha}_2$ are two material constants. Thus, in the transversely isotropic case, the criterion is then characterized by four parameters $(\bar{E}, \bar{\nu}, \bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2)$.

Under triaxial compression, combining equation 3.3.1 with $\underline{\underline{\sigma}} = P\underline{\underline{1}} + (Q - P)\underline{\underline{z}} \otimes \underline{\underline{z}}$ and writing equation 3.3.2 in the form $\bar{q}^2 - (\bar{\alpha}_1 \bar{p} + \bar{\alpha}_2)^2 = 0$, one can express the ultimate axial stress Q at failure for a given confining pressure P as a function of the orientation angle Θ between the axial load direction $\underline{\underline{z}}$ and the bedding vector $\underline{\underline{e}}$ by solving the following second order equation :

$$(F_3 - \bar{\alpha}_1 F_1^2)Q^2 + ((F_4 - 2\bar{\alpha}_1^2 F_1 F_2)P - 2\bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_2 F_1)Q + ((F_5 - F_2^2)P^2 - 2\bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_2 F_2 P - \bar{\alpha}_2^2) = 0 \quad (3.3.3)$$

$$\begin{aligned} \text{where } \bar{p} &= F_1 Q + F_2 P, & \bar{q}^2 &= F_3 Q^2 + F_4 P Q + F_5 P^2, \\ F_1 &= \alpha_1/3 - \alpha_2 \cos^2 \Theta, & F_2 &= 2\alpha_1/3 - \alpha_2(1 - \cos^2 \Theta), \\ F_3 &= (\alpha_3 + \alpha_4/9) + (-\alpha_6/3 + \alpha_7) \cos^2 \Theta + \alpha_5 \cos^4 \Theta, \\ F_4 &= (-2\alpha_3 + 4\alpha_4/9 - \alpha_6/3) + (2\alpha_5 - \alpha_6/3) \cos^2 \Theta - 2\alpha_5 \cos^4 \Theta, \\ F_5 &= (\alpha_3 + 4\alpha_4/9 + \alpha_5 - 2\alpha_6/3 + \alpha_7) + (-2\alpha_5 + 2\alpha_6/3 - \alpha_7) \cos^2 \Theta + \alpha_5 \cos^4 \Theta \end{aligned}$$

Under uniaxial compressive conditions, combining equation 3.3.1 with $\underline{\underline{\sigma}} = Q\underline{\underline{z}} \otimes \underline{\underline{z}}$ and solving equation 3.3.2, one can find the expression of the shear strength R_c as a function of the orientation angle Θ :

$$R_c(\Theta) = \frac{\bar{\alpha}_2 / \sqrt{\bar{E}}}{\sqrt{\beta_1 + \beta_2 \cos^2 \Theta + \beta_3 \cos^4 \Theta - \bar{\alpha}_1(\beta_4 + \beta_5 \cos^2 \Theta) / 3}} \quad (3.3.4)$$

where $\beta_1 = (\ell_1^2 + \ell_4^2 - \ell_2\ell_4)/\bar{E}$, $\beta_2 = (-\ell_2\ell_3 + 3\ell_2\ell_4 + 4\ell_4\ell_5 + 3\ell_5^2)/\bar{E}$, $\beta_3 = (\ell_3^2 + \ell_5^2 + 4\ell_3\ell_5 + 3\ell_2\ell_3)/\sqrt{\bar{E}}$, $\beta_4 = (3\ell_1 + \ell_2 + \ell_4)/\sqrt{\bar{E}}$ and $\beta_5 = (\ell_3 + 3\ell_4 + 2\ell_5)/\sqrt{\bar{E}}$. One can notice, knowing the expressions of $\ell_{i, i=1..5}$, that the coefficients $\beta_{i, i=1..5}$ are only functions of the fictitious Poisson coefficient $\bar{\nu}$. Therefore, in this particular case, only three independent parameters $\bar{\nu}$, $\bar{\alpha}_1$ and $\bar{\alpha}_2/\sqrt{\bar{E}}$ are involved.

The criterion's parameters were fitted using uniaxial compression tests for three different rocks (Asan gneiss, Boryeong shale and Yeoncheon schist) as presented by Cho et al. (2012) and triaxial compression tests for the Tournemire shale as presented in Rouabhi et al. (2007) and Rejeb (1999). Table 3.1 presents the elastic values used to fix the $\underline{\underline{H}}$ tensor for each material. The adjustment results are shown in figures 3.2 and 3.3. In the case of uniaxial compression, since repeated tests are available (3 measures per orientation), the

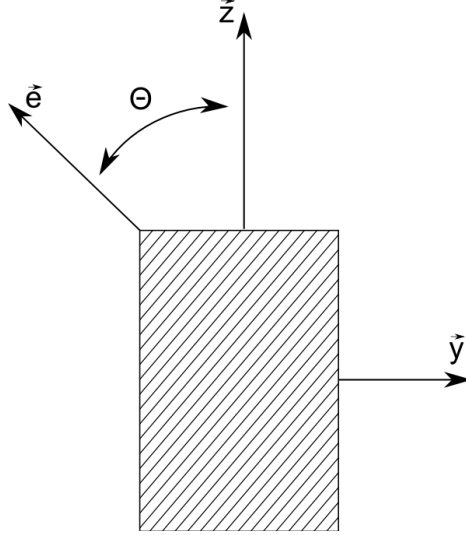


FIGURE 3.1 – Orientation angle Θ definition

TABLE 3.1 – Elastic parameters

	$E(GPa)$	$E'(GPa)$	ν	ν'	$G(GPa)$	Reference
Asan gneiss	68.3	54.4	0.30	0.20	17.1	Cho et al. (2012)
Boryeong shale	39.3	19.0	0.18	0.20	8.7	Cho et al. (2012)
Yeoncheon schist	72.1	21.2	0.25	0.16	13.7	Cho et al. (2012)
Tournemire shale	24.19	9.27	0.15	0.20	3.94	Rejeb (1999)

fitting parameters are adjusted to the mean values. Table 3.2 presents the obtained model parameters for the four rocks. As it can be seen, the agreement between the predicted results and the experimental data is satisfactory knowing that, when it comes to "failure", there is a high discrepancy on results (in figure 3.2(a), for $\Theta = 0^\circ$, the measured strength ranges from 94.2 to 260.2 MPa). In the case of the Tournemire shale, one had to add the Young modulus E and the shear modulus G to the fitting set of parameters ($\bar{\nu}, \bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2/\sqrt{\bar{E}}$) in order to improve the fitting quality. In fact, the proposed approach in this paper suggests a relation between the initial and induced anisotropies by creating an isotropic equivalent material. However, for the case of the Tournemire shale, this assumption makes the failure criteria not flexible enough to follow the shape of the experimental data. In such a case, one can consider the failure criteria as independent from the elastic parameters (which means that the induced anisotropy is independent from the initial one) and consequently the parameters (E, E', ν, ν', G) become additional fitting parameters other than the elastic parameters. Moreover, in order to keep a reasonable number of fitting parameters, only the more influential elastic parameters are used for fitting and which may be the Young moduli anisotropy E/E' and the shear moduli anisotropy $2G/(E/(1 + \nu))$ (the Poisson ratio anisotropy ν/ν' is supposed to have less influence) or simply the Young modulus E and the shear modulus G . The adjustment parameters in table 3.2 are obtained for $E = 11.5659MPa$ and $G = 2.1434MPa$. The adjustment is rather acceptable in both planes $\Theta - Q$ and $P - Q$ (see figure 3.4).

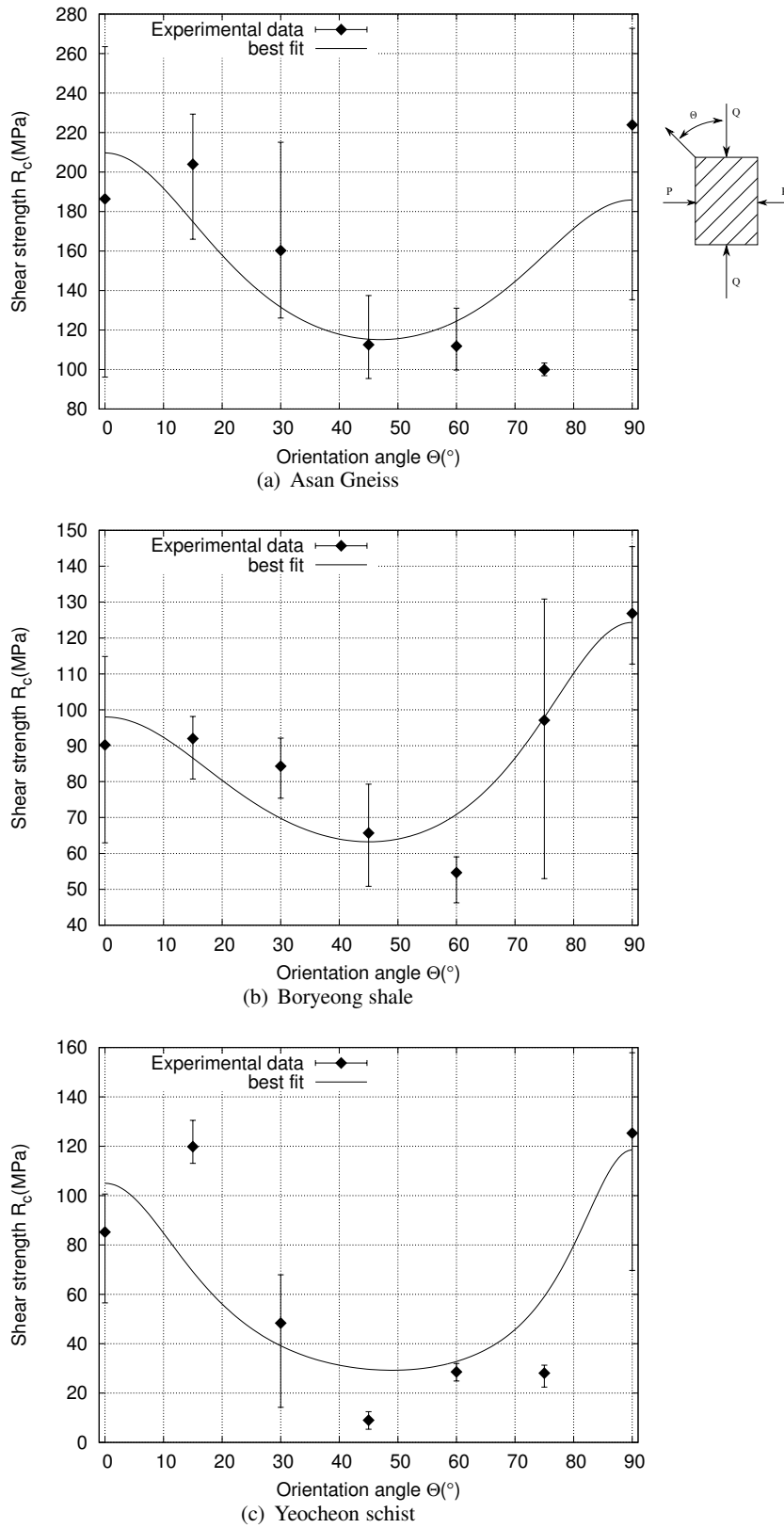


FIGURE 3.2 – Axial stress at failure as a function of the orientation angle for uniaxial tests carried on Asan gneiss, Boryeong shale and Yecheon schist (Cho et al., 2012)

TABLE 3.2 – Best fit parameters

	$\bar{\nu}$	$\bar{\alpha}_1$	$\bar{\alpha}_2/\sqrt{\bar{E}}$
Asan gneiss	0.2028	2.5661	5.6626
Boryeong shale	0.2586	3.1248	0.2363
Yeoncheon schist	0.1242	3.4718	2.4193
Tournemire shale	0.15	0.4562	7.2738

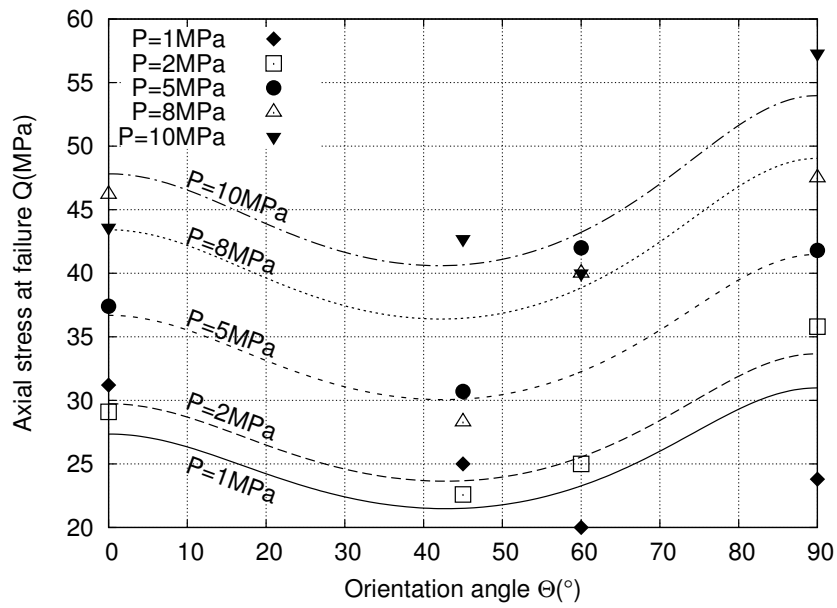


FIGURE 3.3 – Axial stress at failure as a function of the orientation angle for triaxial tests carried on Tournemire shale (Rejeb, 1999)

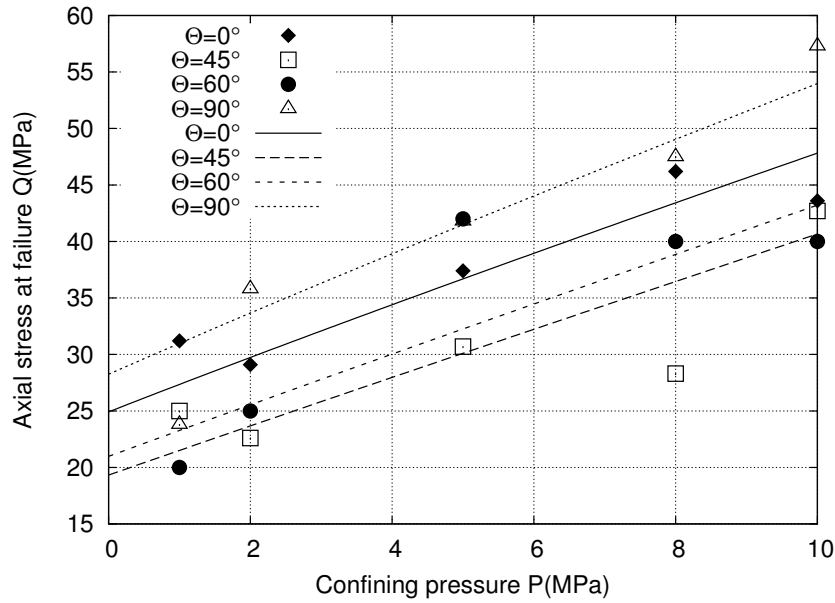


FIGURE 3.4 – Measured (dots) and predicted (lines) values of the axial stress at failure versus confining pressure for the Tournemire shale

3.4 Anisotropic damage behavior law for transversely isotropic materials

Lemaitre et Desmorat (2005)(chapter 1) defined the mechanical damage as the creation and growth of discontinuities, microvoids and microcracks, in a medium considered as continuous at a large scale. In engineering, the damage is represented by continuous variables in the space. In fact, the mechanics of continuous media introduces a Representative Elementary Volume (REV) on which all properties are represented by homogenized variables. Mathematically, the damage variable may be represented either by a scalar, a higher order tensor or a combination of two or more scalar and tensorial variables if several mechanisms of damage occur. In order to take into account the directional bias introduced by the formation of cracks, an anisotropic damage model is to be considered *i.e.* the damage is represented by a higher order tensor variable. In this case, the largest generality for a damage variable is a representation by a fourth order tensor. However, such a representation is too difficult to use. Therefore, second order symmetric tensors are commonly employed since they are mathematically simpler and yet can describe most essential features of anisotropic damage (Carol et al., 2001a; Rouabhi, 2004; Rouabhi et al., 2005; Lemaitre et al., 2000; Murakami et Kamiya, 1997; Badel et al., 2007). In general numerical codes, what is called "damage-model" consists principally of a linear relationship between stress and strain with an elastic tensor \tilde{H} which varies as function of a damage variable. One can notice that this formalism is commonly used to describe the damage of initially isotropic solids. To the knowledge of the authors, an anisotropic damage model for transversely isotropic materials using the mechanics of continuous media is not available.

In order to define an anisotropic damage behavior law for the transversely isotropic material, the equivalent isotropic material approach is used herein. Further, the relationship between the real and fictitious materials ($\tilde{H} = \tilde{L}H\tilde{L}$) remains valid at every stage of the damage but with a fixed \tilde{L} . This assumption means that the following relationship between the real and the fictitious materials is considered :

$$\tilde{H}^{-1}(\underline{\omega}) = \tilde{L}\tilde{H}^{-1}(\underline{\omega})\tilde{L} \quad (3.4.1)$$

where $\underline{\omega}$ is the damage second order tensor. This may be interpreted as a separation between the effect of natural anisotropy represented by the tensor \tilde{L} and the induced anisotropy represented by the damage tensor $\underline{\omega}$.

It remains now to define a damage behavior law for the fictitious isotropic material ($\tilde{H}(\underline{\omega})$). An established constitutive model for isotropic materials may be employed. Herein, the damage behavior law introduced by Rouabhi (2004) and Rouabhi et al. (2005) is selected. It is an rate-dependent behavior law where the anisotropic damage is activated only in tensile regime, in compression regime, material stiffness is recovered. The developed model is based on the so called effective stress $\tilde{\underline{\sigma}} = \underline{\omega}^{\frac{1}{2}}\underline{\bar{\sigma}}\underline{\omega}^{\frac{1}{2}}$ and strain $\tilde{\underline{\varepsilon}} = \underline{\omega}^{-\frac{1}{2}}\underline{\bar{\varepsilon}}\underline{\omega}^{-\frac{1}{2}}$ tensors, in which $\underline{\bar{\sigma}}$ and $\underline{\bar{\varepsilon}}$ denote the stress and strain tensors in the damaged isotropic material. The compliance tensor of the fictitious damaged material is given by the following expression :

$$\tilde{H}^{-1}(\underline{\omega}) = -\frac{\bar{\nu}}{E}\underline{\omega} \otimes \underline{\omega} + \frac{1+\bar{\nu}}{E}\underline{\omega} \otimes \underline{\omega} \quad (3.4.2)$$

The rate-dependent evolution law of the damage variable $\underline{\omega}$ is given by :

$$\dot{\underline{\omega}} = 2\underline{\omega}^{-\frac{1}{2}}\dot{\underline{\omega}}\underline{\omega}^{-\frac{1}{2}} = \sum_{k=1}^3 \dot{\lambda}(a_k)\tilde{\underline{n}}_k \otimes \tilde{\underline{n}}_k, \quad \dot{\lambda}(x) = v_d \left[1 - \exp\left(-\left\langle \frac{x}{R_d} - 1 \right\rangle^{n_d}\right) \right] \quad (3.4.3)$$

where a_k and $\tilde{\underline{n}}_k$ are respectively the eigenvalues and the eigenvectors of the tensor $\underline{a} = \frac{1}{2}\langle \tilde{\underline{\sigma}} \rangle \langle \tilde{\underline{\varepsilon}} \rangle$, v_d , R_d and n_d are material parameters and $\langle x \rangle$ denotes the positive part of the tensor \underline{x} , that is the only tensor having the same eigenvectors as \underline{x} and whose eigenvalues are deduced by the operator $\langle x_i \rangle = (x_i + |x_i|)/2$.

Finally, in order to distinguish the different response in tension and compression, an active damage tensor was introduced as follows :

$$\underline{\omega}^{ac} = \underline{1} + \underline{P}(\underline{\omega} - \underline{1})\underline{P}, \quad \underline{P} = \sum_{k=1}^3 \mathcal{H}(\bar{\varepsilon}_k)\tilde{\underline{n}}_k \otimes \tilde{\underline{n}}_k \quad (3.4.4)$$

where $\bar{\varepsilon}_k$ and $\tilde{\underline{n}}_k$ are the eigenvalues and eigenvectors of $\underline{\bar{\varepsilon}}$ respectively and \mathcal{H} is the Heaviside function.

3.4.1 Uniaxial computational results

The model has been implemented in two Finite Element Method (FEM) codes : V-PLF3D (Tijani, 2000), the FEM code of the geosciences center of Mines ParisTech, and Code-Aster (www.code-aster.org), the FEM code of EDF (Electricité de France).

TABLE 3.3 – Simulation parameters

E	ν	E'	ν'	G	\bar{E}	$\bar{\nu}$	$R_{t0} = \sqrt{2\bar{E}R_d}$	v_d	n_d	stain rate v
6GPa	0.2	4GPa	0.2	2GPa	4GPa	0.2	2.5MPa	$145s^{-1}$	1	$0.001s^{-1}$

In order to illustrate the major characteristics of this model and the role of the adjusting parameters, uniaxial computational tests are considered. In these tests, the parameters presented in table 3.3 are kept constant. Moreover, in the model implementation, the bedding vector \vec{e} is defined by two angles : an azimuth Φ and a slope angle Θ . In the following tests, Φ is kept equal to 0° and only Θ is changing.

The present damage model is characterized by three major features : rate dependency, stiffness recovery and initial anisotropy. Among these characteristics, only the effect of the initial anisotropy is investigated here since the interpretation of rate dependency effect and stiffness recovery is the same as for isotropic materials (see Rouabhi (2004) and Rouabhi et al. (2005)). Figure 3.5 shows the model response for different orientation angles and the stress peak for each angle. One observes that this value is greater in the bedding plane than perpendicularly to it which is in agreement with experimental observations (see (ANDRA, 2012, chapter2) for instance).

3.4.2 Simulation of Brazilian tests

Indirect tensile tests such as Brazilian tests are very useful in rock mechanics since it is too difficult to carry out direct tensile tests. It is generally used to find the tensile strength R_t for isotropic materials since its value could be directly estimated knowing the ultimate applied load (P) and the sample dimensions (diameter D and thickness t) :

$$R_t = \frac{2P}{\pi Dt} \quad (3.4.5)$$

Unfortunately, this result is not valid in the case of transversely isotropic materials and that is why some authors have attempted to develop more complicated solutions which take into account not only the applied load and the sample dimensions but also the elastic parameters and the orientation angle (Chen et al., 1998; Chen et Hsu, 2001; Exadaktylos et Kaklis, 2001; Dan, 2011). Claesson et Bohloli (2002) gave the following approximate formula using the hypothesis of plane stress and point loading :

$$R_t = \frac{2P}{\pi Dt} \left[\left(\frac{E}{E'} \right)^{\frac{\cos(\pi-2\Theta)}{4}} - \frac{\cos 2(\pi - 2\Theta)}{4} (b - 1) \right], \quad b = \frac{\sqrt{EE'}}{2} \left(\frac{1}{G} - \frac{2\nu'}{E'} \right) \quad (3.4.6)$$

3.4.2.a Analytical fit using direct traction

Before treating the Brazilian test as a structure with boundary conditions, let's assume first a homogeneous stress state which can be degraded when the criterion in 3.4.3 is reached : $a_k = R_d$. To do this, only a uniaxial stress state $\underline{\underline{\sigma}} = Q\vec{z} \otimes \vec{z}$ is required. The

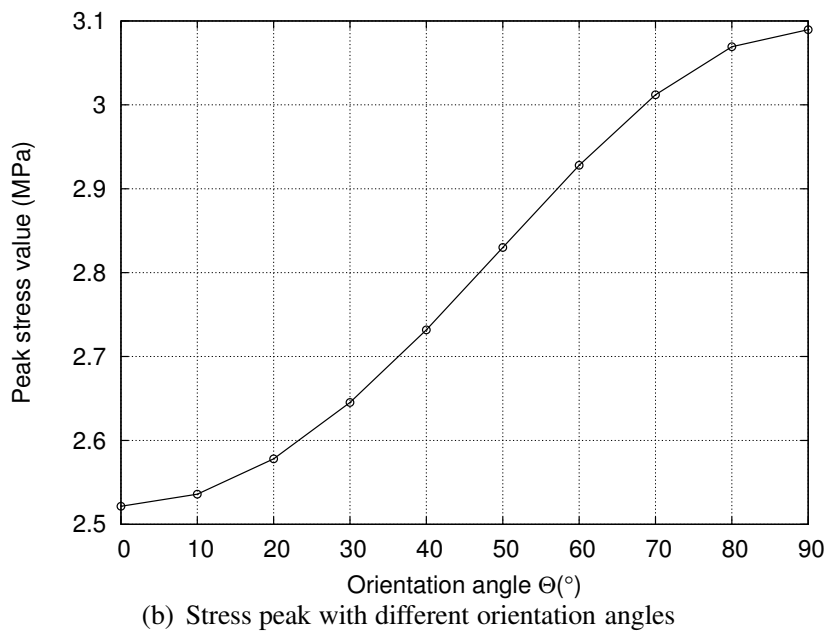
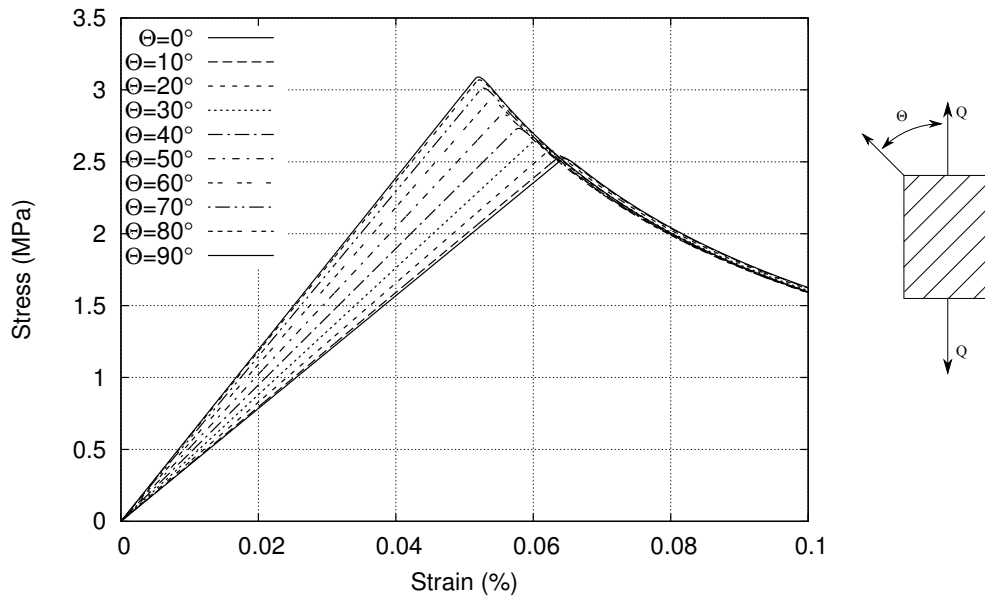


FIGURE 3.5 – Model response to a monotonous solicitation with different orientation angles

transformation $\underline{\bar{\sigma}} = \underline{L} : \underline{\sigma}$ leads to :

$$\underline{\bar{\sigma}} = Q \begin{pmatrix} \ell_1 + \ell_4 \cos \Theta & 0 & 0 \\ 0 & \ell_1 + \ell_4 + \ell_3 \cos^2 \Theta \sin^2 \Theta & -\ell_3 \cos^3 \Theta \sin \Theta - (\ell_4 + \ell_5) \cos \Theta \sin \Theta \\ 0 & -\ell_3 \cos^3 \Theta \sin \Theta - (\ell_4 + \ell_5) \cos \Theta \sin \Theta & \ell_1 + \ell_2 + 2(\ell_4 + \ell_5) \cos^2 \Theta + \ell_3 \cos^4 \Theta \end{pmatrix} \quad (3.4.7)$$

Knowing that $\underline{\bar{\varepsilon}} = \underline{\bar{H}}^{-1} : \underline{\bar{\sigma}}$, a numerical code was used to compute the tensor $\underline{a} = \frac{1}{2} \underline{\bar{\sigma}} \underline{\bar{\varepsilon}}$ and its maximum eigenvalue a_k . When the condition $a_k = R_d$ is satisfied, for a given Θ , the applied stress Q equals the tensile strength $R_t(\Theta)$. This calculation is simplified when the orientation angle is equal to 0° or to 90° since the tensor $\underline{\bar{\sigma}}$ becomes diagonal. In these

particular cases, the failure criterion becomes $a_3 = \frac{1}{2} \bar{\sigma}_3 \bar{\varepsilon}_3 = R_d$ and one can deduce that

$$\frac{R_t(90^\circ)}{R_t(0^\circ)} = \sqrt{\frac{(\ell_1 + \ell_2 + \ell_3 + 2\ell_4 + 2\ell_5)^2 - 2\bar{\nu}(\ell_1 + \ell_4)(\ell_1 + \ell_2 + \ell_3 + 2\ell_4 + 2\ell_5)}{(\ell_1 + \ell_2)^2 - \bar{\nu}(\ell_1 + \ell_2)(2\ell_1 + \ell_4)}} \quad (3.4.8)$$

which depends, for a given material with elastic parameters (E, E', ν, ν', G) , only on the fictitious Poisson ratio ($\bar{\nu} \in]-1, 0.5[$). Figure 3.6 illustrates this dependence for the four rocks already presented in the previous section (table 3.1). As it can be seen, the parallel tensile strength can not be less than the perpendicular one for all possible values of $\bar{\nu}$. The maximum value of $\frac{R_t(90^\circ)}{R_t(0^\circ)}$ is reached when $\bar{\nu} \rightarrow -1$ whereas the minimum value is attained for $\bar{\nu} \rightarrow 0.5$. These extremum values may be directly computed using the following expressions :

$$\left(\frac{R_t(90^\circ)}{R_t(0^\circ)} \right)_{\bar{\nu} \rightarrow -1} = \sqrt{\frac{4\gamma(4\hat{h}_1 - 5\sqrt{2}\hat{h}_2 + 2\hat{h}_3)}{3(\gamma + 3\sqrt{\hat{h}_1\hat{h}_4})(2\hat{h}_1 + \sqrt{2}\hat{h}_2)}}, \quad \left(\frac{R_t(90^\circ)}{R_t(0^\circ)} \right)_{\bar{\nu} \rightarrow 0.5} = \sqrt{\frac{10\sqrt{2}\hat{h}_2 + 12\hat{h}_3}{3\sqrt{2}\hat{h}_2 + \hat{h}_3 + 3\sqrt{\hat{h}_3\hat{h}_4}}} \quad (3.4.9)$$

The values of the material constants $(R_d, \bar{E}, \bar{\nu})$ involved in the proposed tensile criterion were calculated in order to obtain the best fit to experimental data (in the case of Tourneire shale, data from Brazilian tests with different orientation angles is not available). However, since $\bar{\nu}$ is fixed from the uniaxial compressive strength (section 3.3), the fitting parameter here is R_d only, the fictitious Young modulus not included. The obtained values are given in table 3.4.

TABLE 3.4 – Parameter fitting using Brazilian tests

Rock	$\bar{\nu}$	R_d	$\left(\frac{R_t(90^\circ)}{R_t(0^\circ)} \right)_{\bar{\nu} \rightarrow -1}$	$\left(\frac{R_t(90^\circ)}{R_t(0^\circ)} \right)_{\bar{\nu} \rightarrow 0.5}$
Asan gneiss	0.2028	1.8324	1.510	1.070
Boryeon shale	0.1242	1.9170	2.215	1.237
Yeoncheon schist	0.2586	0.9948	4.111	1.415

Figure 3.7 shows the comparison between experimental data and theoretical results. The solid lines correspond to the best fit of the tensile strength as a function of the orientation angle. The measured data are from Cho et al. (2012). As can be seen, the proposed model furnishes quite good tendencies compared to the experimental data, especially for Boryeong shale and Yeoncheon schist. This affirmation has to be confirmed by simulations of the laboratory tests (Brazilian tests).

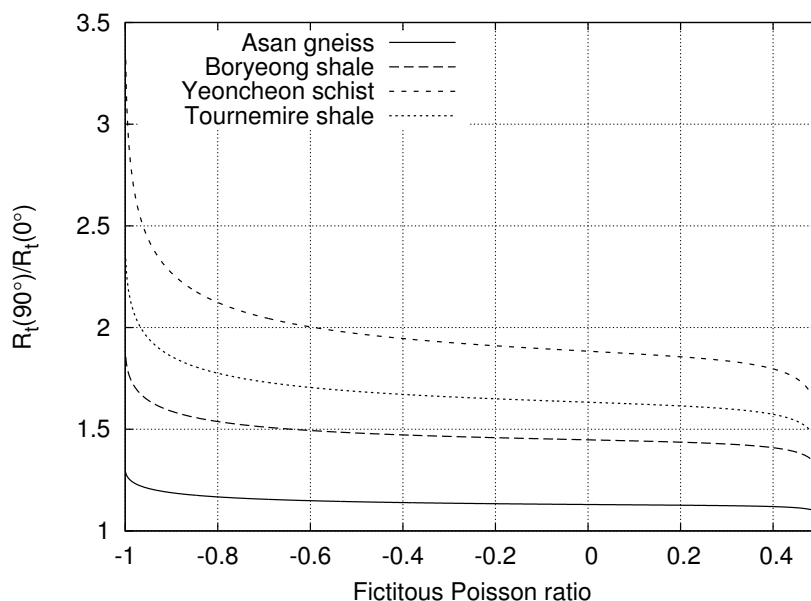


FIGURE 3.6 – $R_t(90^\circ)/R_t(0^\circ) = f(\bar{\nu})$

3.4.2.b Simulation of Brazilian tests

In order to show the capabilities of the developed oriented damage model for transversely isotropic materials, in what follows, the FEM code VIPLEF3D is used to numerically simulate a Brazilian test in 3D configuration ($t = D/2 = 30 \text{ mm}$) for different orientation angles and for the three considered rocks using the parameters in table 3.4. In these numerical simulations, the rock sample is supposed to be totally adhering the platens of the press therefore a totally 3D problem is considered. Figure 3.8 shows the whole simulation plot (the applied load versus the axial displacement). The peak of these curves is recorded and used in the expression 3.4.6 in order to estimate the tensile strength of the rock for the corresponding orientation angle. Figure 3.9 shows the obtained tensile strength values (curve "simulation R_d ") compared to experimental data and to the analytical expression of $R_t(\Theta)$. One can notice that the obtained values by simulation are below the analytical expression of $R_t(\Theta)$ which means that the expression 3.4.6 underestimate the value of the tensile strength. In fact, this expression is conducted doing the hypothesis of plane stress state and supposing that the maximum tensile stress is at the sample center. However, simulations prove that the hypothesis of plane stress state is not very accurate since the damage starts in the external faces of the sample. Moreover, the maximum tensile stress occurs not exactly at the center but above and down it (see figure 3.10). For these reasons, one has to adjust the simulation results directly on the experimental data. To do so, one can slightly increase the value of R_d . Other simulations are done with $2.25R_d$ (the coefficient 2.25 is manually fixed so as to ensure better fitting) and the results are presented in figure 3.9 (curve "simulation $2.25R_d$ "). In order to visualize the sample's damage state at the end of the test, the horizontal damage for the three rocks for orientations 0° , 45° and 90° is presented in figure 3.11. It is visible that the damage develops mainly along the centerline of the sample.

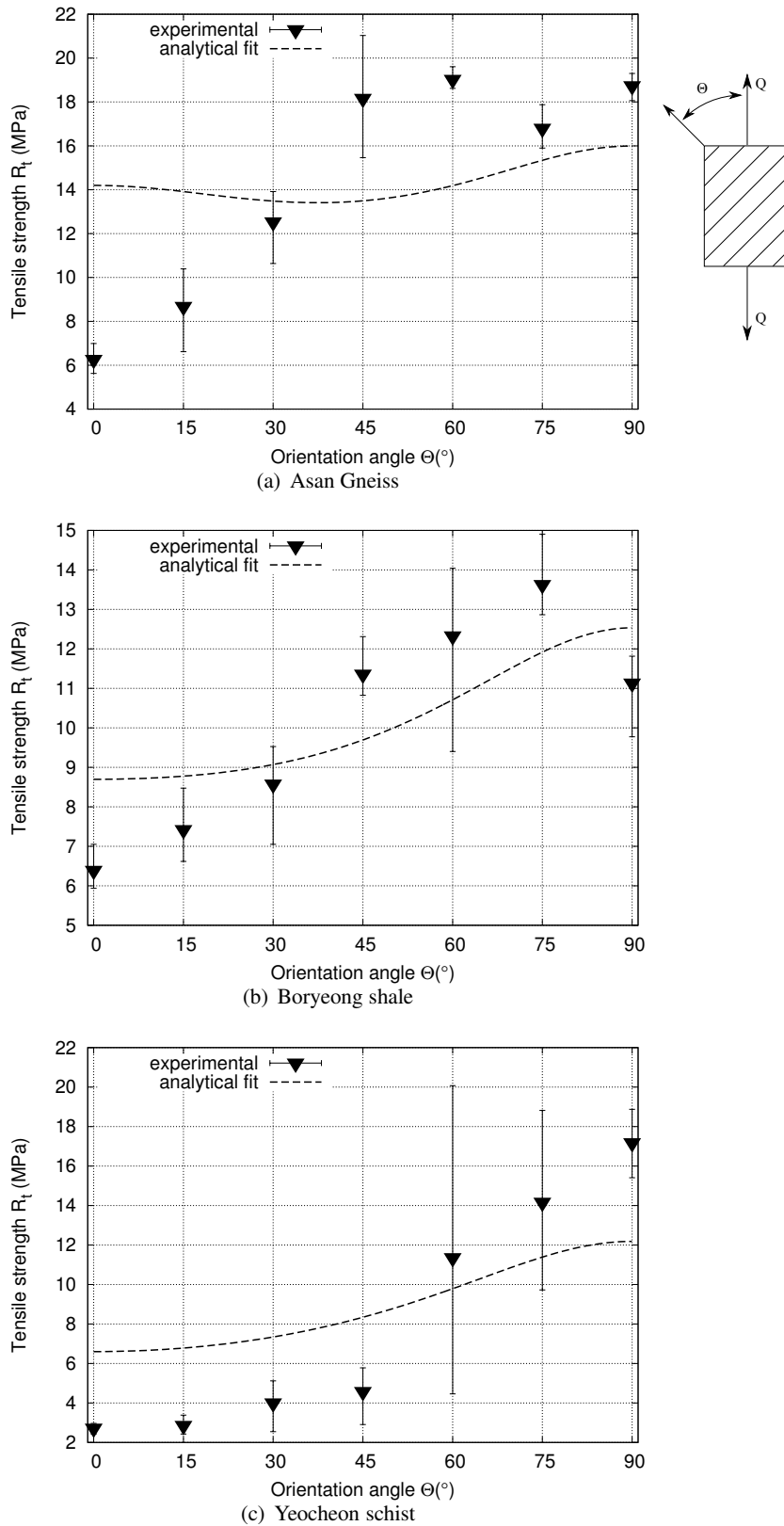
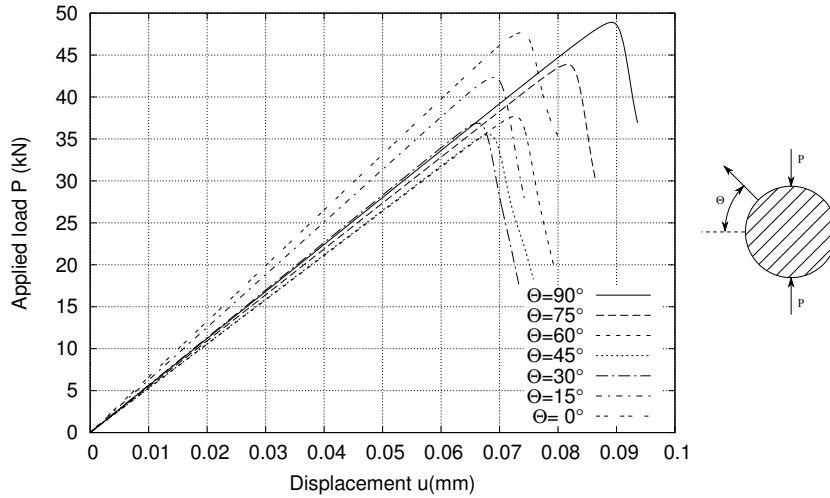
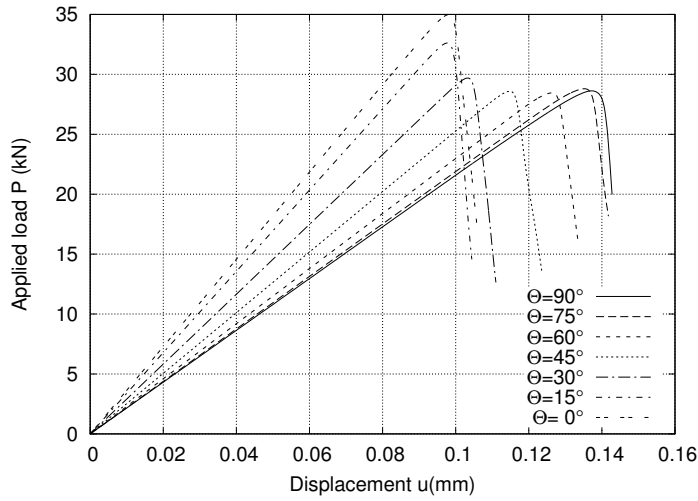


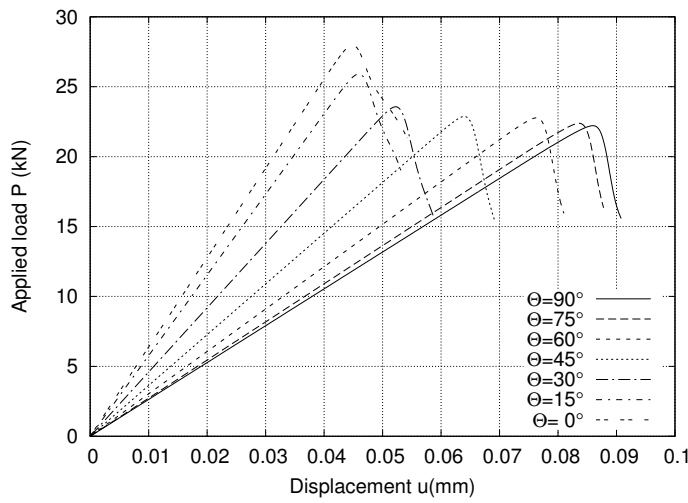
FIGURE 3.7 – Tensile strength as a function of orientation angle



(a) Asan Gneiss



(b) Boryeong shale



(c) Yecheon schist

FIGURE 3.8 – Brazilian test simulation for different orientation angles with $2.25R_d$

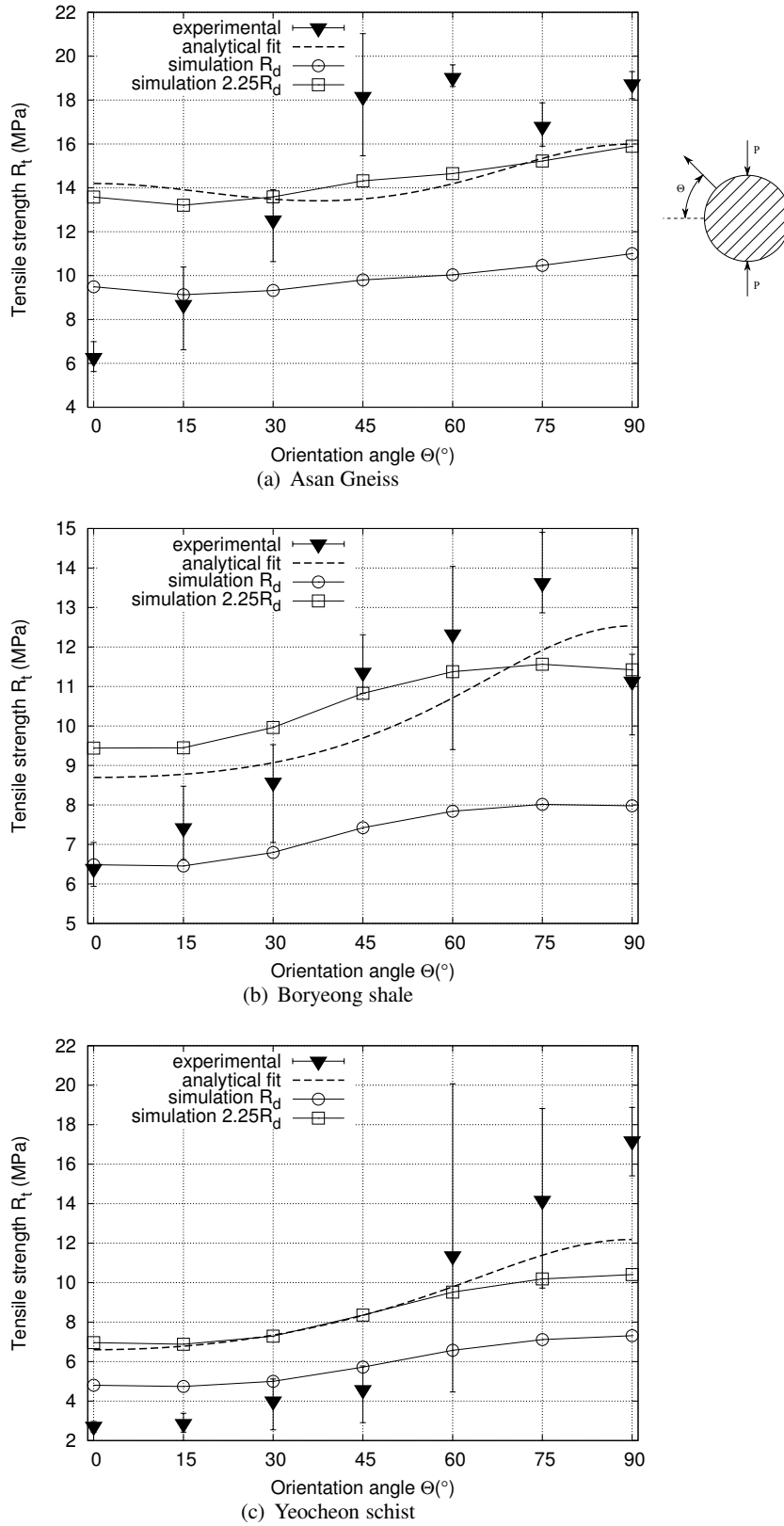


FIGURE 3.9 – Tensile strength with simulation

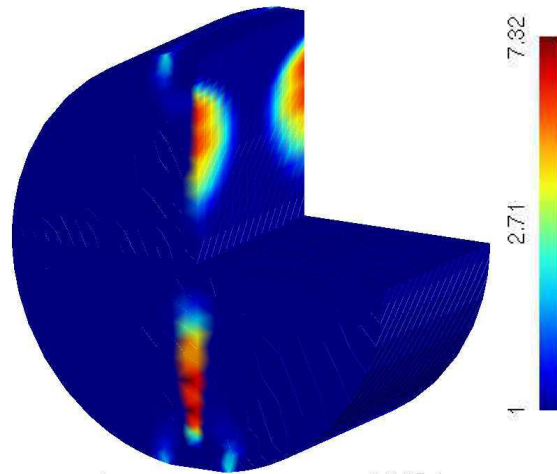


FIGURE 3.10 – Horizontal damage initiation (Yeoncheon schist $\Theta = 0^\circ$)

As can be seen, the proposed model furnishes satisfactory results. However, the obtained compression strength anisotropy is of same range as the Young moduli anisotropy and can not reach the observed values for rocks where a big difference between the two anisotropy values is measured. A further study on the used yield function has to be done in order to overcome this problem. Moreover, some authors such as [Hobbs \(1964\)](#), [Hobbs \(1965\)](#), [Hudson \(1969\)](#), [Barla et Innaurato \(1973\)](#), and [Chen et Hsu \(2001\)](#) proved that the Brazilian test is not very convenient to determine the tensile strength especially for laminated materials. In fact, in most of cases, the crack does not happen within the loading plane but within an inclined one which means that the failure is of a shear nature and not tensile one. This observation could be explained by the fact that the compression stress next to the platens of the press reaches the shear limit before that the tensile stress in the sample's center reaches the tensile strength. For that reason, an other test was proposed and consists on making a hole in the sample's center (This test is called the ring test). This way the tensile stress next to the hole is increased and will probably reach the stress strength before that the compression stress reaches the shear strength. As a future work, it would be of a great interest to simulate the ring test and compare the results to experimental data.

3.5 Conclusions

In this paper, an approach to describe the behavior of transversely isotropic materials is introduced. The method consists in introducing a fictitious isotropic equivalent material, choosing an established isotropic model and transferring it to the real material. The elastic moduli of the fictitious material are the only two supplementary parameters introduced by this procedure. This method is used here to define a failure criterion and an anisotropic damage behavior law for transversely isotropic solids. First, a failure criterion based on the Drucker-Prager yield function is presented. Its parameters are adjusted to experimental results for four different rocks and a good fit is obtained. Then, an anisotropic damage behavior law in tensile regime is detailed. The model parameters are adjusted to experimental results and used in an FEM code (VIPLEF 3D and Code-Aster) to simulate 3D Brazilian tests for three rocks with different orientation angles. These simulations

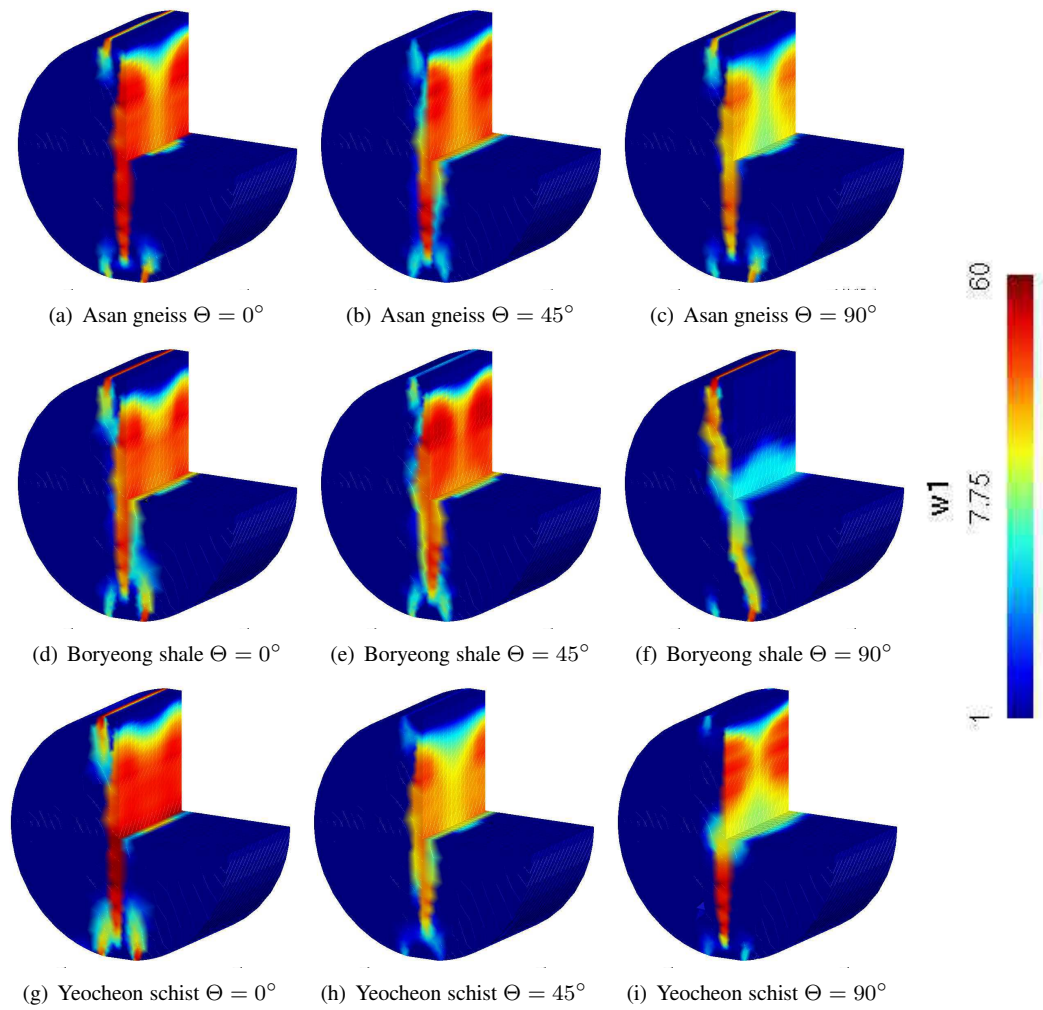


FIGURE 3.11 – Horizontal damage state at the end of the Brazilian test

show that the hypothesis of plane stress state is not verified and the maximum tensile stress does not occur at the sample center. Compared to experimental data, the furnished results are rather satisfactory. However, the obtained tensile strength anisotropy is of the same range as the Young moduli anisotropy and can not reach the observed values for rocks where a big difference between the two anisotropy values is measured. A further work must be done to overcome this issue. Moreover, since the failure in a Brazilian test might be of a shear nature and not only a pure tensile nature, other simulations of the ring test have to be compared to experimental data.

3.A Appendix : Mathematical preliminaries

3.A.1 Second order symmetric tensors

Let \mathcal{S} be the set of second order symmetric tensors and $B = (\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ an orthonormal basis of \mathbb{R}^3 . Every tensor $\underline{a} \in \mathcal{S}$ can be decomposed according to the basis B as $\underline{a} = a_{ij}\vec{e}_i \otimes \vec{e}_j$ and therefore, knowing that \underline{a} is symmetric, one can deduce the following writing :

$$\underline{a} = \sum_i a_{ii}\vec{e}_i \otimes \vec{e}_i + \sum_{i<j} a_{ij}(\vec{e}_i \otimes \vec{e}_j + \vec{e}_j \otimes \vec{e}_i) \quad (3.A.1)$$

An orthonormal basis of the set \mathcal{S} , called canonical basis, may be built as follows :

$$\begin{aligned} \underline{e}_1 &= \vec{e}_1 \otimes \vec{e}_1, & \underline{e}_2 &= \vec{e}_2 \otimes \vec{e}_2, & \underline{e}_3 &= \vec{e}_3 \otimes \vec{e}_3, & \underline{e}_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_1 \otimes \vec{e}_2 + \vec{e}_2 \otimes \vec{e}_1), \\ \underline{e}_5 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_1 \otimes \vec{e}_3 + \vec{e}_3 \otimes \vec{e}_1), & \underline{e}_6 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_2 \otimes \vec{e}_3 + \vec{e}_3 \otimes \vec{e}_2) \end{aligned} \quad (3.A.2)$$

The components of \underline{a} in this basis are $(a_{11}, a_{22}, a_{33}, \sqrt{2}a_{12}, \sqrt{2}a_{13}, \sqrt{2}a_{23})$. In mechanics, the sum of the three first terms, which is none either than the identity tensor, is of a particular interest since it is related to the spherical part of the strain and stress tensors. Therefore, a new basis of \mathcal{S} can be built taking this requirement into account. The elements of this basis may be deduced by using the Schmidt's orthonormalisation process which leads to :

$$\underline{I} = \underline{1}/\sqrt{3}, \quad \underline{J}_1 = (\underline{1} - 3\underline{e}_3)/\sqrt{6}, \quad \underline{J}_2 = (\underline{e}_1 - \underline{e}_2)/\sqrt{2}, \quad \underline{J}_3 = \underline{e}_4, \quad \underline{J}_4 = \underline{e}_5, \quad \underline{J}_5 = \underline{e}_6 \quad (3.A.3)$$

3.A.2 Representation theorem of isotropic functions

Definition

1. A second order tensor \underline{Q} is called orthonormal if $\underline{Q}\underline{Q}^t = \underline{1}$
2. A scalar function $f : \mathcal{S}^n \mapsto \mathbb{R}$ is called isotropic if the following equality is verified for any orthonormal tensor \underline{Q} and $\forall(\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_n) \in \mathcal{S}^n$:

$$f(\underline{Q}\underline{a}_1\underline{Q}^t, \underline{Q}\underline{a}_2\underline{Q}^t, \dots, \underline{Q}\underline{a}_n\underline{Q}^t) = f(\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_n) \quad (3.A.4)$$

3. A second order tensorial function $\underline{\underline{F}} : \mathcal{S}^n \mapsto \mathcal{S}$ is called isotropic if the following equality is verified for any orthonormal tensor $\underline{\underline{Q}}$ and $\forall(\underline{\underline{a}}_1, \underline{\underline{a}}_2, \dots, \underline{\underline{a}}_n) \in \mathcal{S}^n$:

$$\underline{\underline{F}}(\underline{\underline{Q}} \underline{\underline{a}}_1 \underline{\underline{Q}}^t, \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{a}}_2 \underline{\underline{Q}}^t, \dots, \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{a}}_n \underline{\underline{Q}}^t) = \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{F}}(\underline{\underline{a}}_1, \underline{\underline{a}}_2, \dots, \underline{\underline{a}}_n) \underline{\underline{Q}}^t \quad (3.A.5)$$

Representation theorem, (Truesdell et Noll, 2004, part B)

1. A scalar function $f : \mathcal{S} \mapsto \mathbb{R}$ is isotropic if and only if it depends only on its argument's invariants *i.e.* $\forall \underline{\underline{a}} \in \mathcal{S}$

$$f(\underline{\underline{a}}) = \phi(\text{tr}(\underline{\underline{a}}), \text{tr}(\underline{\underline{a}}^2), \text{tr}(\underline{\underline{a}}^3)) \quad (3.A.6)$$

2. A second order tensorial function $\underline{\underline{F}} : \mathcal{S} \mapsto \mathcal{S}$ is isotropic if and only if $\forall \underline{\underline{a}} \in \mathcal{S}$ it has the following representation :

$$\underline{\underline{F}}(\underline{\underline{a}}) = f_0 \underline{\underline{1}} + f_1 \underline{\underline{a}} + f_2 \underline{\underline{a}}^2 \quad (3.A.7)$$

where $f_i(\underline{\underline{a}})$ are isotropic scalar functions.

3. A scalar function $f : \mathcal{S} \times \mathcal{S} \mapsto \mathbb{R}$ is isotropic if and only if $\forall(\underline{\underline{a}}, \underline{\underline{b}}) \in \mathcal{S} \times \mathcal{S}$, $f(\underline{\underline{a}}, \underline{\underline{b}})$ depends only on :

$$\text{tr}(\underline{\underline{a}}), \text{tr}(\underline{\underline{a}}^2), \text{tr}(\underline{\underline{a}}^3), \text{tr}(\underline{\underline{b}}), \text{tr}(\underline{\underline{b}}^2), \text{tr}(\underline{\underline{b}}^3), \text{tr}(\underline{\underline{a}} \underline{\underline{b}}), \text{tr}(\underline{\underline{a}} \underline{\underline{b}}^2), \text{tr}(\underline{\underline{b}} \underline{\underline{a}}^2), \text{tr}(\underline{\underline{a}}^2 \underline{\underline{b}}^2)$$

4. A second order tensorial function $\underline{\underline{F}} : \mathcal{S} \times \mathcal{S} \mapsto \mathcal{S}$ is isotropic if and only if $\forall(\underline{\underline{a}}, \underline{\underline{b}}) \in \mathcal{S} \times \mathcal{S}$ it has the following representation :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{F}}(\underline{\underline{a}}, \underline{\underline{b}}) &= \psi_0 \underline{\underline{1}} + \psi_1 \underline{\underline{a}} + \psi_2 \underline{\underline{b}} + \psi_3 \underline{\underline{a}}^2 + \psi_4 \underline{\underline{b}}^2 + \psi_5 (\underline{\underline{a}} \underline{\underline{b}} + \underline{\underline{b}} \underline{\underline{a}}) \\ &+ \psi_6 (\underline{\underline{a}}^2 \underline{\underline{b}} + \underline{\underline{b}} \underline{\underline{a}}^2) + \psi_7 (\underline{\underline{a}} \underline{\underline{b}}^2 + \underline{\underline{b}}^2 \underline{\underline{a}}) + \psi_8 (\underline{\underline{a}}^2 \underline{\underline{b}}^2 + \underline{\underline{b}}^2 \underline{\underline{a}}^2) \end{aligned} \quad (3.A.8)$$

where $\psi_i(\underline{\underline{a}}, \underline{\underline{b}})$ are isotropic.

Application A second order tensorial function $\underline{\underline{F}} : \mathcal{S} \mapsto \mathcal{S}$ is isotropic and linear if and only if $\forall \underline{\underline{a}} \in \mathcal{S}$

$$\underline{\underline{F}}(\underline{\underline{a}}) = a_1 \text{tr}(\underline{\underline{a}}) \underline{\underline{1}} + a_2 \underline{\underline{a}} \quad (3.A.9)$$

where $a_1, a_2 \in \mathbb{R}$. To this function, one can associate a fourth order tensor $\underline{\underline{\underline{A}}}$ such that $\underline{\underline{F}}(\underline{\underline{a}}) = \underline{\underline{\underline{A}}} : \underline{\underline{a}} \forall \underline{\underline{a}} \in \mathcal{S}$. Hence, one can deduce the representation of an isotropic fourth order tensor $\underline{\underline{\underline{A}}}$:

$$\underline{\underline{\underline{A}}} = a_1 \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}} + a_2 \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}} \quad (3.A.10)$$

3.A.3 Transverse isotropy

Definition The transverse isotropy is characterized by a rotational symmetry around a fixed unit vector \vec{e} . In all the definitions above of isotropic functions one needs only to restrict $\underline{\underline{Q}}$ with the condition $\underline{\underline{Q}}\vec{e} = \pm\vec{e}$.

Representation theorem, (Boehler, 1986) Let $\varphi(X)$ be a scalar or tensorial function with argument $X \in \mathcal{S}^n$. The function φ is \vec{e} -transversely isotropic if and only if it exists a function $\varphi^*(X, \underline{e})$ where $\underline{e} = \vec{e} \otimes \vec{e}$ and φ^* is isotropic such that $\varphi(X) = \varphi^*(X, \underline{e})$.

Application A linear transversely isotropic function could be written as :

$$\underline{F}(\underline{a}) = a_1 \text{tr}(\underline{a}) \underline{1} + a_2 \underline{a} + a_3 \text{tr}(\underline{a} \underline{e}) \underline{e} + a_4 (\text{tr}(\underline{a} \underline{e}) \underline{1} + \text{tr}(\underline{a}) \underline{e}) + a_5 (\underline{a} \underline{e} + \underline{e} \underline{a}) \quad (3.A.11)$$

where $(a_1, a_2, a_3, a_4, a_5) \in \mathbb{R}^5$. As previously, a fourth order tensor $\underline{\underline{A}}$ can be associated to this function such that $\underline{F}(\underline{a}) = \underline{\underline{A}} : \underline{a}$:

$$\underline{\underline{A}} = a_1 (\underline{1} \otimes \underline{1}) + a_2 (\underline{1} \otimes \underline{e} + \underline{e} \otimes \underline{1}) + a_3 (\underline{e} \otimes \underline{e}) + a_4 (\underline{1} \otimes \underline{e} + \underline{e} \otimes \underline{1}) + a_5 (\underline{e} \otimes \underline{e}) \quad (3.A.12)$$

3.A.4 Different writings of a fourth order transversely isotropic tensor

Varying the basis of \mathcal{S} and the fourth order tensors space, one can find several writings of a fourth order transversely isotropic tensor $\underline{\underline{A}}$. The most common writing uses the canonical basis of \mathcal{S} , it is generally represented by a 6x6 matrix. In fact, the relation $\underline{b} = \underline{\underline{A}} : \underline{a}$ is replaced by a matrix relation $\vec{b} = A \vec{a}$ in which a second order symmetric tensor is represented by the vector of its components in the canonical basis of \mathcal{S} *i.e.* $\vec{a} = (a_{11}, a_{22}, a_{33}, \sqrt{2}a_{12}, \sqrt{2}a_{13}, \sqrt{2}a_{23})^t$. In this case, if $\vec{e}_3 = \vec{e}$ is chosen, then the matrix representation A of the tensor $\underline{\underline{A}}$ is :

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & 0 & 0 & 0 \\ A_{12} & A_{11} & A_{13} & 0 & 0 & 0 \\ A_{13} & A_{13} & A_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{11} - A_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{55} \end{pmatrix} \quad (3.A.13)$$

This writing is commonly used to express the elastic compliance tensor $\underline{\underline{H}}^{-1}$ (Obviously, one can easily find the elastic compliance tensor for an isotropic material by setting $E = E'$, $\nu = \nu'$ and $2G = E/(1 + \nu)$) :

$$\underline{\underline{H}}^{-1} = \begin{pmatrix} 1/E & -\nu/E & -\nu'/E' & 0 & 0 & 0 \\ -\nu/E & 1/E & -\nu'/E' & 0 & 0 & 0 \\ -\nu'/E' & -\nu'/E' & 1/E' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (1 + \nu)/E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/(2G) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/(2G) \end{pmatrix} \quad (3.A.14)$$

Another useful writing deduced from the representation theorem (equation 3.A.12) and using the invariants of \underline{a} and \underline{e} can be used.

In this work, neither of the previous forms were useful for us that is why it was essential to find a much more interesting one. This form uses the basis 3.A.3 ($\underline{I}, \underline{J}_1, \underline{J}_2, \underline{J}_3, \underline{J}_4, \underline{J}_5$) in which $\vec{e}_3 = \vec{e}$. The decomposition of \underline{A} according to this basis leads to :

$$\begin{aligned} \underline{A} &= \hat{a}_1 \underline{I} \otimes \underline{I} + \hat{a}_2 \left(\underline{I} \otimes \underline{J}_1 + \underline{J}_1 \otimes \underline{I} \right) + \hat{a}_3 \underline{J}_1 \otimes \underline{J}_1 + \hat{a}_4 \left(\underline{J}_2 \otimes \underline{J}_2 + \underline{J}_3 \otimes \underline{J}_3 \right) \\ &+ \hat{a}_5 \left(\underline{J}_4 \otimes \underline{J}_4 + \underline{J}_5 \otimes \underline{J}_5 \right) \end{aligned} \quad (3.A.15)$$

which has the advantage of showing four eigenvectors of $\underline{A} : (\underline{J}_2, \underline{J}_3, \underline{J}_4, \underline{J}_5)$ to which are associated the eigenvalues $(\hat{a}_4, \hat{a}_4, \hat{a}_5, \hat{a}_5)$. In this way, the fourth order tensor could be represented by two eigenvalues (\hat{a}_4, \hat{a}_5) and a 2x2 matrix $[A] = \begin{pmatrix} \hat{a}_1 & \hat{a}_2 \\ \hat{a}_2 & \hat{a}_3 \end{pmatrix}_{(\underline{I}, \underline{J}_1)}$.

The correspondence between these three writings is ensured by the following relations :

$$\begin{cases} a_1 = A_{12} \\ a_2 = A_{11} - A_{12} \\ a_3 = A_{11} - 2A_{13} + A_{33} - 2A_{55} \\ a_4 = A_{13} - A_{12} \\ a_5 = -A_{11} + A_{12} + A_{55} \end{cases} \quad \begin{cases} 6a_1 = 2\hat{a}_1 + 2\sqrt{2}\hat{a}_2 + \hat{a}_3 - 3\hat{a}_4 \\ a_2 = \hat{a}_4 \\ 2a_3 = 3\hat{a}_3 + \hat{a}_4 - 4\hat{a}_5 \\ 2a_4 = -\sqrt{2}\hat{a}_2 - \hat{a}_3 + \hat{a}_4 \\ a_5 = \hat{a}_5 - \hat{a}_4 \end{cases} \quad (3.A.16)$$

$$\begin{cases} 3\hat{a}_1 = 2A_{11} + 2A_{12} + 4A_{13} + A_{33} \\ 3\hat{a}_2 = \sqrt{2}(A_{11} + A_{12} - A_{13} - A_{33}) \\ 3\hat{a}_3 = A_{11} + A_{12} - 4A_{13} + 2A_{33} \\ \hat{a}_4 = A_{11} - A_{12} \\ \hat{a}_5 = A_{55} \end{cases}$$

Chapitre 4

Analyse numérique de l'anisotropie de l'argilite Callovo-Oxfordien à partir des mesures à long terme de convergence des tunnels

L'approche de modélisation décrite dans le chapitre précédent est employée pour la caractérisation du comportement mécanique de l'argilite COx via une loi de comportement elasto-viscoplastique prenant en compte les phénomènes d'écrouissage positif et négatif, de contractance, de dilatance et de dépendance du temps physique. Les capacités du modèle sont démontrées, tout d'abord, sur des essais de compression triaxiale avec plusieurs pressions de confinement et plusieurs paliers de relaxation. Ensuite, la nouvelle loi de comportement est appliquée sur le problème de creusement des galeries souterraines du laboratoire de Bure. Trois types de calculs ont été effectués : (i) sans aucune anisotropie, (ii) avec l'anisotropie des paramètres élastiques et non élastiques et (iii) avec l'anisotropie des paramètres élastiques seulement. Les résultats de ces calculs ont montré que l'anisotropie des contraintes in-situ est la plus importante ; viennent ensuite les anisotropies du matériau que ce soit des paramètres élastiques ou non élastiques. Avec la prise en compte de ces anisotropies, et en utilisant le même jeu de paramètres, les convergences mesurées et les formes des zones endommagées dans les galeries creusées dans les sens des contraintes horizontales majeure et mineure sont reproduites par le modèle.

Numerical investigation of the Callovo-Oxfordian claystone anisotropy based on long-term drift convergence measurements

Abstract

This study proposed a new viscoplastic model for transversely isotropic materials to explain the observed asymmetries in convergence measurements from drifts excavated in the Callovo-Oxfordian (COx) claystone at the Meuse/Haute Marne Underground Research Laboratory (M/HM URL) of the French National Radioactive Waste Management Agency (Andra). First, the model was validated using triaxial compression tests conducted by Zhang (2016), fully accounting for pre-peak hardening, post-peak softening, contractancy, dilatancy and time-dependency phenomena. The model parameters were fitted using the convergence measurements from two different drifts. A series of simulations were conducted that outlined the importance of each anisotropy involved in the excavation problem, namely, the stress and diverse material anisotropies. When both elastic and non-elastic anisotropies were considered, good agreement was obtained between the theoretical and experimental convergence measurements, and all the observed asymmetries were accurately reproduced. The effects of the excavation scenarios were investigated, and the results indicated that the long-term behavior of the drifts was insensitive to the deconfining history. The observed differences between the material constants adjusted to the triaxial compression tests and convergence measurements were justified by the existence of two distinct mechanisms governing the short- and long-term behaviors of the COx claystone.

Keywords : Tunnel excavation modeling, Anisotropy, Transverse isotropy, Viscoplasticity, Callovo-Oxfordian claystone

4.1 Introduction

In a French nuclear waste repository project in a deep geological formation, the Callovo-Oxfordian (COx) claystone was chosen as the potential host formation due to its interesting hydromechanical properties. The numerous research studies on the anisotropic behavior of other rocks such as the Mont Terri (see, for example, the work of Marschall et al. (2006)) and Tournemire (see, for example, Noiret et al. (2011)) shales represent an important knowledge database for this project. An Underground Research Laboratory (URL) was built in the COx formation to better characterize the behavior of that rock using laboratory tests and *in situ* measurements. At the main level of the URL (490 m), an anisotropic stress state was recorded (Wileveau et al., 2007); the minor horizontal stress (σ_h) was highly similar to the vertical stress (σ_v), whereas the major horizontal stress (σ_H) was approximately 30% larger than the vertical stress. Convergence measurements were conducted on several drifts excavated at that level and showed important differences between drifts parallel to the minor and major stresses (Armand et al., 2013; Guayacán-Carrillo et al., 2016); the ratios between the vertical and horizontal convergences were approximately 4 for drifts along σ_h and approximately 1/2 in the perpendicular direction. In addition, the shapes of the excavation fractured

zones (EFZs) were found to differ considerably in each direction (Armand et al., 2013, 2014); fractures were more developed at the ceilings and floors of the tunnels, which are parallel to σ_h , and at the lateral sides of tunnels, which are parallel to σ_H .

Several recent studies have attempted to explain these observations. Guayacán-Carrillo et al. (2016) used a semi-empirical law that considered time and face-advancing effects to analyze the convergence data in the two drift directions. Many numerical simulations of the excavation problem using different modeling approaches have provided important insights regarding the short- and long-term behaviors of the COx claystone. Martín et al. (2011) used a viscoplastic model that accounts for the anisotropies of the elastic parameters and creep behavior to explain the convergence asymmetry in drifts along the minor stress. However, that model cannot reproduce the convergence measurements in the other direction (parallel to σ_H). In 2012, based on experimental data presented by Armand et al. (2016), Andra launched a model benchmark exercise named “Transverse Action” (Seyedi et al., 2016) to provide a comparative study of the developed thermo-hydro-mechanical models for the COx claystone when considering the *in situ* excavation observations. Both continuous (elasto-visco-plastic and damage models) and discrete methods were used and showed the importance of the material anisotropy to obtain a good representation of the *in situ* observations. Cuvilliez et al. (2016), Plassart et al. (2013) and Souley et al. (2011) used an isotropic plastic model for the short-term behavior and an isotropic viscoplastic model for the long-term behavior. However, the model parameters adjusted to laboratory triaxial and creep tests could not reproduce the convergence asymmetric measurements. Pardoën et al. (2015) employed a local second gradient method to describe the shear banding around the tunnels parallel to σ_h . The model included elastic and shear strength anisotropies (Pardoën et Collin, 2016) to account for the shear banding around the drifts parallel to σ_H . Moreover, a viscoplastic behavior was considered to account for the long-term behavior of the material, which provided a good representation of the radial displacement and convergence measurements. Van den Eijnden et al. (2016) also used a local second gradient method to conduct drift excavation simulations using a double-scale finite-element method (FEM) and proved the importance of the material anisotropy to accurately reproduce the *in situ* observations in the direction of the major stress. Mánica et al. (2016) highlighted the importance of the non-elastic anisotropy regarding the shape of the excavation-damaged zone. Hauseux et al. (2016) used an enhanced FEM with an anisotropic yield function to study the crack distributions around the drifts in a 3D configuration. A multitude of other works were accomplished in Andra’s model benchmark exercise but are not presented here. One can refer to the corresponding paper (Seyedi et al., 2016) for the complete list of models.

Several other constitutive models have been established to describe the mechanical behaviors of claystones. For example, the works Chen et al. (2010), Chiarelli et al. (2003), and Zhou et al. (2006) introduced constitutive models that use coupled plasticity and damage to analyze triaxial compression tests. However, it is outside the scope of this paper to describe all of the models presented in the literature.

Regarding the laboratory mechanical experiments on the COx claystone, the majority of the triaxial compression and creep tests (see ANDRA (2005c, 2012); Armand et al. (2016); Zhang (2016); Zhang et al. (2010), for example) have been conducted on samples either parallel or perpendicular to the bedding plane. Although some tests enabled estimates of

the Young's modulus anisotropy (approximately 1.3 according to [Armand et al. \(2013\)](#)), the shear modulus and compressive strength anisotropies remain unknown. Auvray C. 2004b (as cited in [ANDRA \(2012\)](#)) conducted compressive tests at an intermediate orientation (45°), but the limited number of experiments and the discrepant results prevent us from obtaining an accurate characterization of the material anisotropy. For this reason, the laboratory experiments were used in this work to describe the COx behavior only as an isotropic material, whereas the elastic and non-elastic anisotropies will be directly characterized using the field measurements.

The majority of the above-cited models require an important number of parameters that are generally difficult to determine from classical triaxial tests. In this paper, the proposed model requires only a few parameters for which the identification process is greatly simplified and can still predict the maximum number of physical phenomena. The modeling approach developed by [Mahjoub et al. \(2016\)](#) for transversely isotropic materials was employed to build a new elasto-viscoplastic model. This model accounts for the pre-peak hardening, post-peak softening, contractancy, dilatancy, time-dependency and both elastic and non-elastic anisotropies. The remainder of this paper is organized as follows. In the first part, the modeling approach and behavior law are explained, and the model characteristics are highlighted by simulating the triaxial compression tests conducted by [Zhang \(2016\)](#). In the second part, the model is adjusted to the convergence measurements and applied to simulate the excavation of two perpendicular drifts ($//\sigma_h$ and $//\sigma_H$) in the M/HM URL. The different problem anisotropies (stress, elastic parameters and non-elastic parameters) are discussed to understand the contribution of each anisotropy. The importance of a realistic excavation scenario is questioned by comparing different deconfining functions. Finally, the difference between the parameters adjusted to the triaxial tests and convergence data is also discussed, and explanations and supplementary improvements are suggested.

Although hydromechanical coupling may be critical for the studied material, only mechanical aspects are considered here because the main goal of this work is to outline the importance of each anisotropy involved in the mechanical excavation problem. The coupling with hydraulic phenomena will be investigated in future research based on this work.

Notations Throughout this paper, first-order tensors (vectors) are represented by an arrow over a letter (\vec{a}), second-order tensors are denoted by two lines under a letter ($\underline{\underline{a}}$), and fourth-order tensors are designated by a tilde beneath a letter ($\underline{\underline{\underline{A}}}$). A superscript $'^t'$ indicates the transpose operation, whereas 'tr' is the trace operator. The symbol ' $:'$ ' denotes the product with double contraction, e.g., $\underline{\underline{a}} : \underline{\underline{b}} = a_{ij}b_{ji}$, where the index denotes the Cartesian components, and repeated subscripts imply summation unless otherwise noted. The product $\underline{\underline{a}} \underline{\underline{b}}$ denotes a single contraction, i.e., $(\underline{\underline{a}} \underline{\underline{b}})_{ij} = a_{ik}b_{kj}$. In the same manner, the product $\underline{\underline{\underline{A}}} \underline{\underline{\underline{B}}}$ is defined as $(\underline{\underline{\underline{A}}} \underline{\underline{\underline{B}}})_{ijkl} = A_{ijmn}B_{nmkl}$. The dyadic or tensor products are $(\underline{\underline{a}} \otimes \underline{\underline{b}})_{ijkl} = a_{ij}b_{kl}$ and $(\vec{a} \otimes \vec{b})_{ij} = a_i b_j$. For any tensor $\underline{\underline{a}}$, its trace is denoted by $a = \text{tr}(\underline{\underline{a}})$, and its deviatoric part is designated by a prime : $\underline{\underline{a}}' = \underline{\underline{a}} - (a/3)\underline{\underline{1}}$,

where $\underline{\underline{1}}$ is the second-order identity tensor.

4.2 An elasto-viscoplastic behavior law considering material elastic and non-elastic anisotropies

The modeling approach developed by Mahjoub et al. (2016) is employed to define a new elasto-viscoplastic behavior law that accounts for both elastic and non-elastic anisotropies. Compared to this previous work, where the approach is used to define a yield function and a tensile damage model for transversely isotropic materials, the current study defines a complete model for compression. In addition to material anisotropies, the model accounts for the phenomena of hardening/softening, dilatancy/contractancy, Lode angle dependency and time dependency.

4.2.1 Isotropy-transverse isotropy transformation

Mahjoub et al. (2016) introduced a new isotropy-transverse isotropy transformation based on an equivalent fictitious isotropic material approach to adapt existing constitutive models from isotropic materials to transversely isotropic materials. The main features of this modeling procedure are recalled hereafter with the aim to use it to define a new behavior law for transversely isotropic materials.

Consider a real elastic transversely isotropic material whose stress, strain and Hooke's tensors are denoted by $\underline{\underline{\sigma}}$, $\underline{\underline{\varepsilon}}$ and $\underline{\underline{H}}(E, E', \nu, \nu', G)$ (see equation 4.A.3), respectively, and a fictitious elastic isotropic material whose corresponding tensors are denoted by $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$, $\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}$ and $\underline{\underline{\bar{H}}}(\bar{E}, \bar{\nu})$, respectively. The real and fictitious stress tensors can be related by a second-order tensorial transformation function $\underline{\underline{\ell}}$ such that $\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \underline{\underline{\ell}}(\underline{\underline{\sigma}})$. This function, which is assumed to be linear, may be represented using a symmetric positive defined fourth-order tensor $\underline{\underline{L}}$:

$$\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\sigma}} \quad (4.2.1)$$

The equivalence of energy $\underline{\underline{\bar{\sigma}}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}} = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}}$ is employed to relate the real and fictitious strains and to ensure the symmetry of the equivalent stiffness tensor, leading to

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}} \quad (4.2.2)$$

Combining equations 4.2.1 and 4.2.2 and given that $\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \underline{\underline{\bar{H}}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}$, it follows that

$$\underline{\underline{\bar{H}}} = \underline{\underline{L}} \underline{\underline{H}} \underline{\underline{L}} \quad (4.2.3)$$

To derive the expression of $\underline{\underline{L}}$ as a function of $\underline{\underline{H}}$ and $\underline{\underline{\bar{H}}}$, the general problem $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{L}} \underline{\underline{B}} \underline{\underline{L}}$ for any positive definite tensors $\underline{\underline{A}}$, $\underline{\underline{B}}$ and $\underline{\underline{L}}$ is solved. Multiplying this equation by $\underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}}$ on the left and right, one obtains $\underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{A}} \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} = \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{L}} \underline{\underline{B}} \underline{\underline{L}} \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}}$. Writing $\underline{\underline{B}} = \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}}$ leads to $\left(\underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{L}} \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} \right)^2 = \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{A}} \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}}$, which yields the following relation :

$$\underline{\underline{L}} = \underline{\underline{B}}^{-\frac{1}{2}} \left(\underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{A}} \underline{\underline{B}}^{\frac{1}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{B}}^{-\frac{1}{2}} \quad (4.2.4)$$

Because it is easier to determine the square root of an isotropic tensor rather than a transversely isotropic tensor, equation 4.2.3 is written in the form $\tilde{H}^{-1} = \tilde{L}\tilde{H}^{-1}\tilde{L}$, and tensors \tilde{A} and \tilde{B} are replaced by \tilde{H}^{-1} and \tilde{H}^{-1} , respectively. Considering that \tilde{A} is transversely isotropic and \tilde{B} is isotropic in equation 4.2.4, one can prove that \tilde{L} is also transversely isotropic with the same axis as \tilde{A} . Moreover, a new basis ($\underline{I}, \underline{J}_1, \underline{J}_2, \underline{J}_3, \underline{J}_4, \underline{J}_5$) (defined in appendix 4.A) of the symmetric second-order tensor space is employed to simplify the analytical determination of the components of \tilde{L} . In fact, for any transversely isotropic tensor \tilde{A} , one can write

$$\begin{aligned} \tilde{A} = a_1 \underline{I} \otimes \underline{I} + a_2 \left(\underline{I} \otimes \underline{J}_1 + \underline{J}_1 \otimes \underline{I} \right) + a_3 \underline{J}_1 \otimes \underline{J}_1 + a_4 \left(\underline{J}_2 \otimes \underline{J}_2 + \underline{J}_3 \otimes \underline{J}_3 \right) \\ + a_5 \left(\underline{J}_4 \otimes \underline{J}_4 + \underline{J}_5 \otimes \underline{J}_5 \right) \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

which has the advantage of showing four eigenvectors of \tilde{A} ($\underline{J}_2, \underline{J}_3, \underline{J}_4,$ and \underline{J}_5) to which the eigenvalues ($a_4, a_4, a_5,$ and a_5) are associated. Consequently, \tilde{A} could be completely defined by two eigenvalues (a_4 and a_5) and a 2x2 matrix $[A] = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_2 & a_3 \end{pmatrix}$ in the basis ($\underline{I}, \underline{J}_1$). Let l_i, h_i and \bar{h}_i ($i = 1 \dots 5$) be the components of $\tilde{L}, \tilde{H}^{-1}$ and \tilde{H}^{-1} , respectively, in this basis. It follows that

$$[L] = [\bar{H}^{\frac{1}{2}}] \left([\bar{H}^{-\frac{1}{2}}][H^{-1}][\bar{H}^{-\frac{1}{2}}] \right)^{\frac{1}{2}} [\bar{H}^{\frac{1}{2}}], \quad \ell_4 = \sqrt{h_4/\bar{h}_4}, \quad \ell_5 = \sqrt{h_5/\bar{h}_5} \quad (4.2.6)$$

Finally, the resolution of the first relation in this equation leads to the following expressions of l_i as functions of (E, E', ν, ν' , and G) and (\bar{E} , and $\bar{\nu}$) :

$$\begin{aligned} \ell_1 = \sqrt{\bar{E}} \left(h_1 + \sqrt{(\bar{b}/\bar{a})\gamma} \right) / \Delta, \quad \ell_2 = \sqrt{\bar{E}} h_2 / \Delta, \quad \ell_3 = \sqrt{\bar{E}} \left(h_3 + \sqrt{(\bar{a}/\bar{b})\gamma} \right) / \Delta, \\ \ell_4 = \sqrt{\bar{E}} \sqrt{h_4/\bar{b}}, \quad \ell_5 = \sqrt{\bar{E}} \sqrt{h_5/\bar{b}} \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

where $\bar{a} = 1 - 2\bar{\nu}$, $\bar{b} = 1 + \bar{\nu}$, $\gamma = \sqrt{h_1 h_3 - h_2^2}$, $\Delta = \sqrt{\bar{a} h_1 + \bar{b} h_3 + 2\sqrt{\bar{a}\bar{b}}\gamma}$ and h_i and \bar{h}_i are expressed as follows :

$$\begin{aligned} h_1 = \frac{1}{3} [2(1 - \nu)/E + (1 - 4\nu')/E'], \quad h_2 = \frac{\sqrt{2}}{3} [(1 - \nu)/E - (1 - \nu')/E'], \\ h_3 = \frac{1}{3} [(1 - \nu)/E + 2(1 + 2\nu')/E'], \quad h_4 = (1 + \nu)/E, \quad h_5 = 1/2G, \\ \bar{h}_1 = (1 - 2\bar{\nu})/\bar{E}, \quad \bar{h}_2 = 0, \quad \bar{h}_3 = \bar{h}_4 = \bar{h}_5 = (1 + \bar{\nu})/\bar{E} \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

4.2.2 Modeling approach

Although the \tilde{L} -transformation is determined based on elasticity, it is also used for non-elastic behaviors, such as for elasto-viscoplastic materials. The fictitious effective stress $\underline{\bar{\sigma}}$, elastic strain $\underline{\bar{\varepsilon}}_e$, viscoplastic strain $\underline{\bar{\varepsilon}}_{vp}$ and Hooke's \tilde{H} tensors can be related to the real quantities $\underline{\sigma}$, $\underline{\varepsilon}_e$, $\underline{\varepsilon}_{vp}$ and \tilde{H} , respectively, using the equivalence relations $\underline{\bar{\sigma}} = \tilde{L} : \underline{\sigma}$, $\underline{\bar{\varepsilon}}_e = \tilde{L} : \underline{\varepsilon}_e$, $\underline{\bar{\varepsilon}}_{vp} = \tilde{L} : \underline{\varepsilon}_{vp}$ and $\tilde{H} = \tilde{L}\tilde{H}\tilde{L}$. Using this approach, as illustrated in Mahjoub

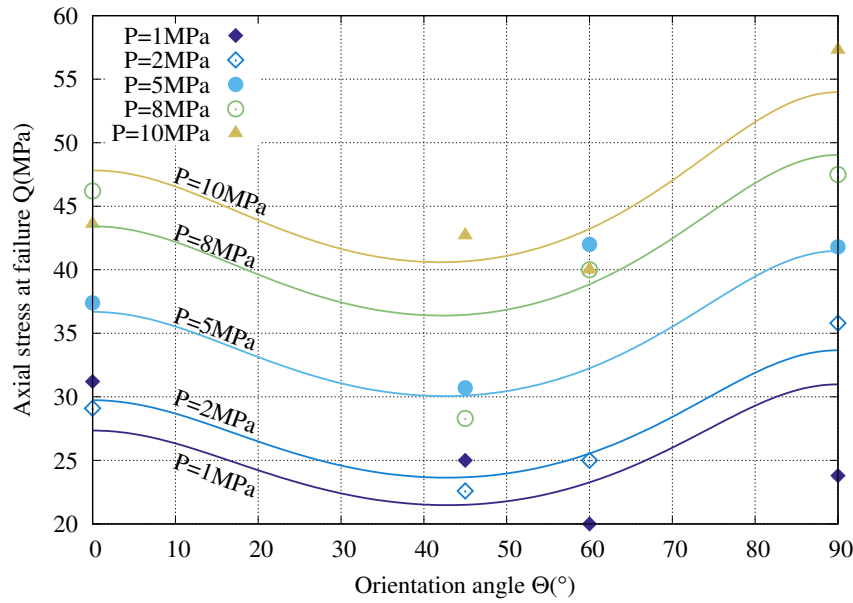


FIGURE 4.1 – Axial stress at failure as a function of the orientation angle for triaxial tests conducted on Tournemire shale (Rejeb, 1999).

et al. (2016), the model accounts for the anisotropy of the non-elastic parameters (yield functions) in addition to the anisotropy of the elastic parameters. Figure 4.1 illustrates an example of a yield criterion obtained using this approach.

Thus, the inelastic anisotropy is represented by only two additional parameters (\bar{E} and $\bar{\nu}$). The viscoplastic model can be given as follows :

$$\underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\sigma}}_0 = \underline{\underline{H}} : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}) \quad (4.2.9)$$

where $\underline{\underline{\sigma}}_0$ is the initial stress state. The use of the equivalence approach implies that the behavior law of the equivalent isotropic material could be written in the same form,

$$\bar{\underline{\underline{\sigma}}} - \bar{\underline{\underline{\sigma}}}_0 = \bar{\underline{\underline{H}}} : (\bar{\underline{\underline{\varepsilon}}} - \bar{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp}) \quad (4.2.10)$$

and, thus, the real viscoplastic strain tensor is defined via the fictitious material such that

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp} = \underline{\underline{L}} : \bar{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp} \quad \text{with} \quad \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp} = \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp}(\bar{\underline{\underline{\sigma}}}, \xi) \quad (4.2.11)$$

where the internal variable ξ is a scalar variable characterizing the isotropic hardening/softening viscoplasticity defined such that $\dot{\xi} = \sqrt{\frac{2}{3}} \|\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}'_{vp}\|$. The thermodynamic consistency of the real and fictitious behavior laws are directly related due to the use of the $\underline{\underline{L}}$ -transformation; the Clausius-Duhem inequality reads $\underline{\underline{\sigma}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp} = (\underline{\underline{L}} : \bar{\underline{\underline{\sigma}}}) : (\underline{\underline{L}}^{-1} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp}) = \bar{\underline{\underline{\sigma}}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp} \geq 0$ (this simplification is ensured by the symmetry of $\underline{\underline{L}}$).

The evolution law of $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{vp}$ is based on the Perzyna non-associated model and can be written as

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{vp} = A \left\langle \frac{F(\underline{\underline{\sigma}}, \xi)}{F_0} \right\rangle^n \partial_{\underline{\underline{\sigma}}} G(\underline{\underline{\sigma}}, \xi) \quad (4.2.12)$$

where A , n and F_0 are model parameters. The functions F and G are the yield and plastic potential surfaces, respectively. In this work, they are assumed to follow a modified Drucker-Prager model :

$$\begin{aligned} F(\underline{\underline{\sigma}}, \xi) &= \bar{q}/\varrho(\bar{\theta}) - 3\alpha\bar{p} - R(\xi) \\ G(\underline{\underline{\sigma}}, \xi) &= \bar{q} - 3\beta(\xi)\bar{p} \end{aligned} \quad (4.2.13)$$

where

- $\bar{p} = -\bar{\sigma}/3$ is the mean stress value ;
- $\bar{q} = \sqrt{\frac{3}{2}\bar{\sigma}' : \bar{\sigma}'}$: $\bar{\sigma}'$ is the stress deviator ;
- $\cos(3\bar{\theta}) = 3\sqrt{6} \det(\bar{\sigma}' / \|\bar{\sigma}'\|)$, where $\bar{\theta}$ is the Lode angle ; and
- $\varrho(\bar{\theta}) = I(-1)/I(\cos(3\bar{\theta}))$ defines the deviatoric section of the yield function, in which $I(x) = \cos(\chi_2\pi/6 - \arccos(\chi_1x)/3)$ and $(\chi_1, \chi_2) \in [0, 1] \times [0, 2]$ are model parameters (refer to [Bigoni et Piccolroaz \(2004\)](#)).

In expression 4.2.13, α is a constant parameter, whereas the following expressions are used for $\beta(\xi)$ and $R(\xi)$:

$$\begin{aligned} &\text{for } \xi \leq \xi_p : \\ &\quad \beta(\xi) = \beta_0 + (\beta_p - \beta_r)(\xi/\xi_p) \\ &\quad R(\xi) = R_0 + (R_p - R_r)(\xi/\xi_p)^m \\ &\text{for } \xi_p < \xi \leq \xi_r : \\ &\quad \beta(\xi) = \beta_p + (\beta_r - \beta_p)(\xi - \xi_p)/(\xi_r - \xi_p) \\ &\quad R(\xi) = R_p + (R_r - R_p)(\xi - \xi_p)/(\xi_r - \xi_p) \\ &\text{for } \xi > \xi_r : \\ &\quad \beta(\xi) = \beta_r \\ &\quad R(\xi) = R_r \end{aligned} \quad (4.2.14)$$

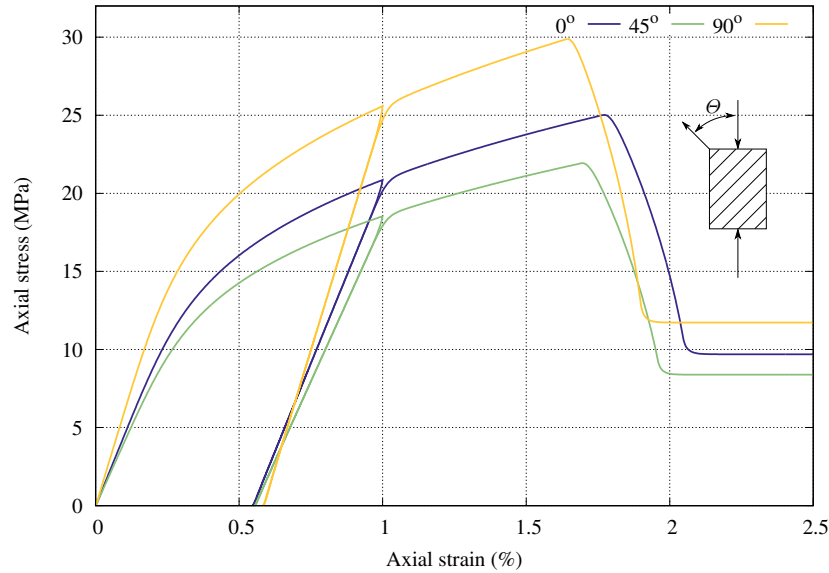
where ξ_p , ξ_r , β_0 , β_p , β_r , R_0 , R_p , R_r and m are material constants. In these definitions, the model parameters ξ_p and ξ_r are specific values of ξ that delimit the pre-peak hardening and the post-peak softening phases, respectively.

It is important to highlight the effect of the parameter β on the volumetric response of the material. Because $\dot{\varepsilon}_{vp} = \text{tr}(\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{vp}) = A \left\langle \frac{F(\underline{\underline{\sigma}}, \xi)}{F_0} \right\rangle^n \text{tr}(\partial_{\underline{\underline{\sigma}}} G(\underline{\underline{\sigma}}, \xi)) = A \left\langle \frac{F(\underline{\underline{\sigma}}, \xi)}{F_0} \right\rangle^n \beta(\xi)$, the sign of $\dot{\varepsilon}_{vp}$ is controlled by the sign of β , which means that the material is contracting when $\beta < 0$ and dilating when $\beta > 0$.

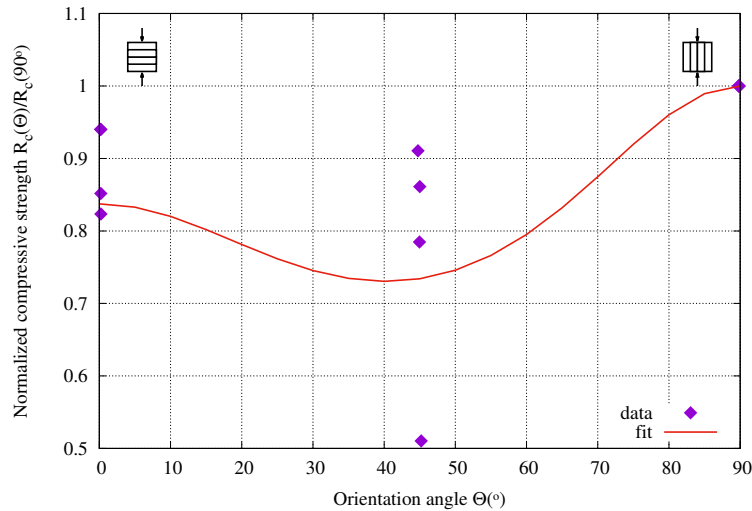
The present model has been implemented in the numerical software Code-Aster (www.code-aster.com). An example of its response to a uniaxial compression test is shown in Figure 4.2(a), where the main model features, hardening/softening and anisotropy, are shown. In figure 4.2(b), the compressive strength predicted by the model is compared to experimental data for COx claystone. At this moment, those experimental data, which are obtained by Auvray C. 2004b (as cited in [ANDRA \(2012\)](#)), are the only available measurements for different orientations (0° , 45° , and 90°) in the literature.

4.2. An elasto-viscoplastic behavior law considering material elastic and non-elastic anisotropies

The final behavior law is characterized by 15 material constants for the viscoplastic model in addition to 2 fictitious (for the \tilde{L} -transformation) and 5 real elastic parameters. It follows that when the model is used for an isotropic material, the real and fictitious materials become the same, and the number of elastic parameters is reduced to 2.



(a) Model responses to a uniaxial compression test for different orientation angles Θ between the applied force and the normal to the bedding plane.



(b) Compressive strength function of the orientation angle (data obtained by Auvray C., 2004b, as cited in ANDRA (2012), for COx claystone).

FIGURE 4.2 – Illustration of the major characteristics of the elasto-viscoplastic model.

4.2.3 Numerical scheme

In the Code-Aster software, the model integration consists of computing the viscoplastic strain and the stress tensors at a time $t + \Delta t$ (which is denoted by the superscript $^+$) given the total strain, viscoplastic strain and stress tensors at a previous time t (denoted by the superscript $^-$), in addition to an increment of the total strain tensor $\Delta \underline{\underline{\varepsilon}}$ (which is equivalent to providing of the total strain at time $t + \Delta t$ because $\underline{\underline{\varepsilon}}^+ = \underline{\underline{\varepsilon}}^- + \Delta \underline{\underline{\varepsilon}}$). The following explicit two-step scheme is employed in this study :

1. Compute $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^+$ using $\underline{\underline{\sigma}}^-$ and $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^-$:
 - $\underline{\underline{\sigma}}^- = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\sigma}}^-$;
 - $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^+ = f(\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^-, \underline{\underline{\sigma}}^-)$;
 - $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^+ = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^+$.
2. Compute $\underline{\underline{\sigma}}^+$ using $\underline{\underline{\varepsilon}}^+$ and $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^+$:
 - $\underline{\underline{\sigma}}^+ = \underline{\underline{H}} : (\underline{\underline{\varepsilon}}^+ - \underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}^+)$;
 - $\underline{\underline{\sigma}}^+ = \underline{\underline{L}}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}^+$.

In this algorithm, the tensors $\underline{\underline{L}}$ and $\underline{\underline{L}}^{-1}$ are considered to be known. In fact, they should be computed using the real and fictitious elastic parameters as detailed above. If the material anisotropy is the same throughout the simulated structure (\vec{e} is constant), these tensors need to be computed only once for all time steps and all material elements.

In the developed constitutive model, the post-failure regime is described by a strain softening mechanism using an internal variable (see equations 4.2.14). Unlike rate-independent plasticity, rate-dependent models, such as the one used in this study, generally lead to well-posed problems and produce regularized numerical solutions, particularly when the viscosity is increased (by decreasing A , for example).

4.2.4 Validation of the model on triaxial compression tests

As explained in the introduction, in the absence of triaxial compression tests with different orientation angles for the COx claystone, the model will be first validated using laboratory experiments assuming an isotropic material ; the elastic and non-elastic anisotropies shall be directly characterized using drift convergence measurements.

The triaxial compression tests with gas injection conducted by [Zhang \(2016\)](#) are considered to demonstrate the capability of the proposed model to reproduce the major characteristics of the macroscopic behavior of the COx claystone. During those tests, as schematically illustrated in [Figure 4.3](#), a constant confining pressure P and a variable axial displacement (corresponding to an axial stress Q) were applied, whereas a gas was flowing through the rock sample due to an upstream pressure P_1 and a downstream pressure P_2 . The samples had a porosity of approximately 16.8% and a degree of water saturation of approximately 90%. Among the several confining pressures tested in the experiments, which ranged from 0.5 to 10 MPa, only three values are represented in this paper : $P = 1, 3$ and 8 MPa. Concerning the axial loading, as illustrated in [Figure 4.4](#), the applied displacement was not strictly monotonous (the strain rate was 10^{-6} s^{-1}), but stabilization levels were introduced to deduce a global sample gas permeability at each

4.2. An elasto-viscoplastic behavior law considering material elastic and non-elastic anisotropies

level. To obtain comparable results for all confining pressures in terms of rigidity, all of the samples were hydrostatically compacted up to 20 MPa. This hydrostatic compaction phase was not simulated in this work ; only the deviatoric loading was considered. Figure 4.5 shows the experimental results of the axial, radial and volumetric responses of the material obtained for the confining pressures considered. In the figure, contrary to the theoretical formulations, the strain values were considered to be positive in contraction.

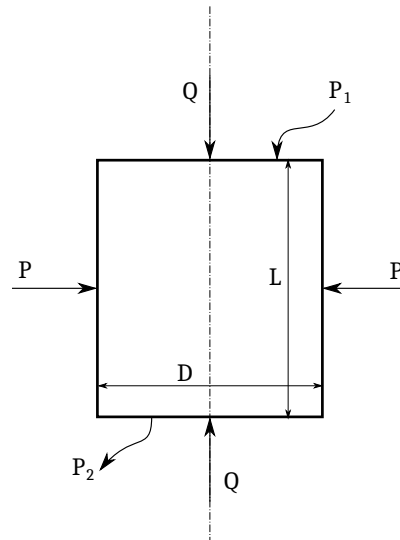


FIGURE 4.3 – Schematic representation of the triaxial compression tests conducted by Zhang (2016).

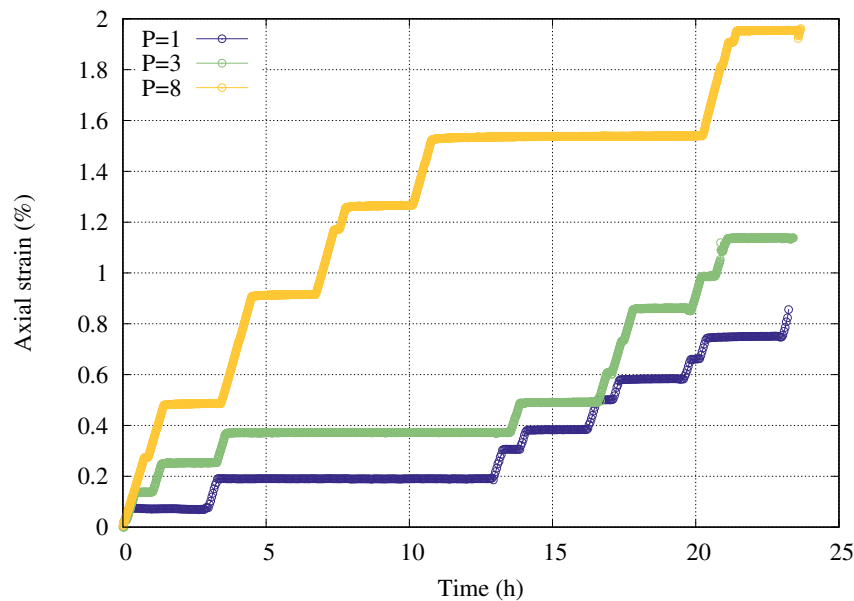


FIGURE 4.4 – History of the applied axial strain for three triaxial compression tests ($P = 1, 3,$ and 8 MPa).

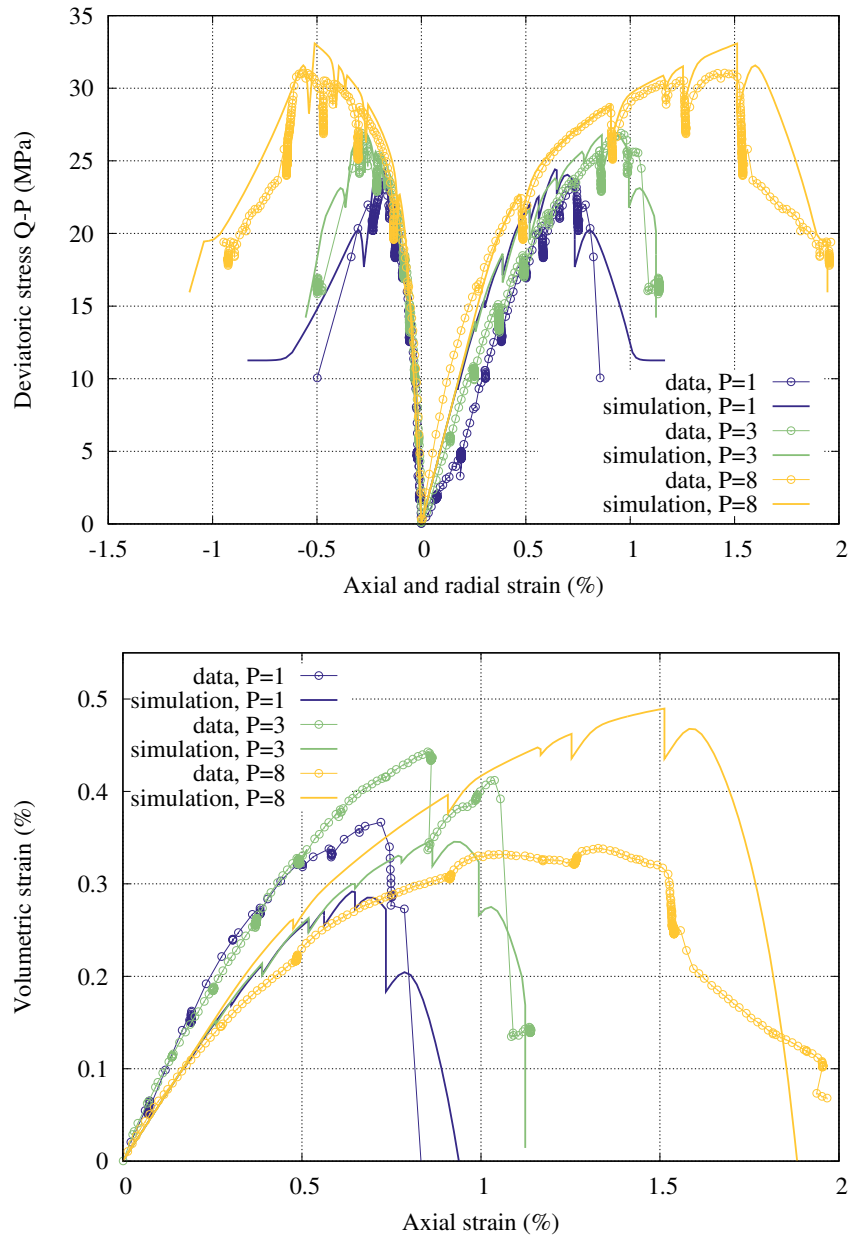


FIGURE 4.5 – Experimental data and numerical simulation results of the mechanical responses of three triaxial compression tests ($P = 1, 3$ and 8 MPa) : deviatoric stress function of the axial and radial strains (up) and volumetric strain function of the axial strain (bottom).

Because the applied gas pressures were too small ($P_1 = 0.2$ MPa and $P_2 = 0.1$ MPa) compared to the confining pressures, the hydraulic effect was neglected in this study; only the mechanical aspect was considered. Thus, the mechanical parameters (see Table 4.1) were fitted to the strain-stress data for the three considered tests ($P = 1, 3$ and 8 MPa), as shown in Figure 4.5. In this fitting procedure, the higher confining pressure test ($P = 8$ MPa) was accorded the most importance because it is the closest one to the *in situ* conditions where the stress is approximately 12 MPa. As can be observed, the model was able to reproduce not only the general tendencies of the hardening, softening,

failure, plastic contractancy and plastic dilatancy phenomena but also the time effect at each displacement stabilization level. The relaxation phenomena that occurred in these experiments (when the applied displacement was constant) are further clarified in Figure 4.6, in which the deviatoric stress is represented as a function of time. It was additionally deduced from the model calibration that the constant values of the parameters ξ_p and ξ_r were insufficient to describe the entire set of tests ; thus, they were set as functions of the confining pressure (which was the same idea used by Zhang et Rodriguez-Dono (2016)). Although these results are satisfactory, the observed dependency of the viscoplastic parameters on the confining pressure should be studied further in a more complete model to gain a better representation of the tested material.

TABLE 4.1 – Elastic and viscoplastic model parameters used for the triaxial compression tests (P : confining pressure in MPa).

E (MPa)	ν	A (d ⁻¹)	n	F_0 (MPa)	m	α	χ_1	χ_2
5600	0.2	10 ⁻¹¹	6	0.1	0.3	0.28	0	0

ξ_p	ξ_r	β_0	β_p	β_r	R_0 (MPa)	R_p (MPa)	R_r (MPa)
0.001 P + 0.001	ξ_p + 0.007	-0.1	0	0.35	0	12.75	2.4

4.3 Application : Drift excavations in Callovo-Oxfordian claystone

In this section, the developed model that accounts for elastic and non-elastic anisotropies is used to explain the drift convergence measurements from the Meuse/Haute Marne URL. At the main level of the URL (490 m), an anisotropic stress state has been recorded (Wileveau et al., 2007), where the minor horizontal stress (absolute value) was nearly equal to the vertical stress ($\sigma_h \simeq \sigma_v \simeq 12$ MPa), whereas the major horizontal stress was approximately 30% larger ($\sigma_H \simeq 16$ MPa) than the vertical stress. Convergence measurements were performed on several drifts excavated at that level and indicated important differences between drifts parallel to the minor and major stresses (Armand et al., 2013; Guayacán-Carrillo et al., 2016) ; the ratio between the vertical and horizontal convergences was approximately 4 for drifts along σ_h and approximately 1/2 in the perpendicular direction. In addition, the shapes of the EFZs were found to be directionally different (Armand et al., 2013, 2014) ; fractures develop more at the ceilings and the floors of tunnels, which are parallel to σ_h and at the lateral sides of tunnels, which are parallel to σ_H . In this work, the convergence data concern two particular drifts. The first drift, denoted GCS, was parallel to σ_H and had a circular section with a radius of 2.6 m, and the second drift, denoted GED, was parallel to σ_h and had a horseshoe section with an average radius of 2.3 m. For each drift, convergence measurements are presented for three sections, which are referred to by letters A, B and C and are described in Table 4.2.

Before conducting any numerical simulations, an in-depth analysis of the experimental results was necessary. Although both drifts are excavated into the material bedding plane (same material anisotropy), the fact that the tunnels are not subjected to the same initial stress state (when referring to the local referential of each tunnel) makes the results

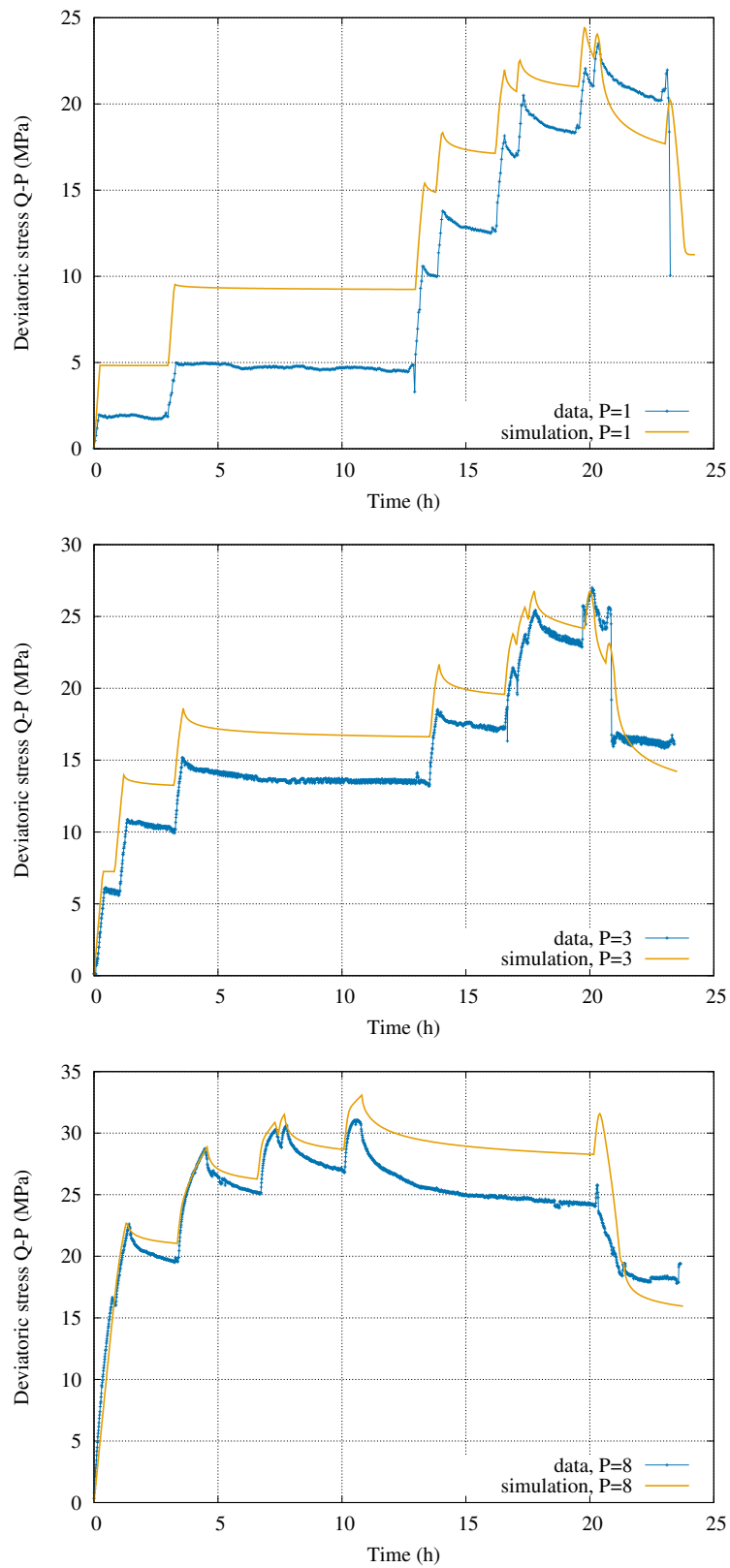


FIGURE 4.6 – Time-dependent behavior of COx for $P = 1, 3, 8$ MPa.

TABLE 4.2 – Descriptions of sections A, B and C from drifts GCS and GED.

Drift	Section	Metric position to the front on 30/10/2012	Measurement beginning
GCS	A	54.8	24/07/2008
	B	46.4	17/09/2008
	C	33.2	28/10/2008
GED	A	51.7	12/02/2010
	B	35.7	18/05/2010
	C	19.7	30/10/2010

extremely different. Furthermore, when the excavation is along the major stress, the drift section is subjected to an isotropic stress state, and a non-negligible difference between the horizontal and vertical convergence measurements is recorded, which proves the importance of the material anisotropy.

To provide more complete explanations of these observations, numerical simulations were conducted using a 2D plane strain configuration, where, for simplicity, the cross sections were assumed circular in the two directions of the drifts, with radii R of 2.6 m for GCS and 2.3 m for GED. The normal stress was set to $\underline{\sigma} \cdot \underline{n} = \lambda \underline{\sigma}_0 \cdot \underline{n}$, where λ is a deconfining function that decreased in a non-linear manner from 1 to 0 over a period of 30 days and remained at zero after the excavation period (see Figure 4.15, curve “scenario 1”). Similar to the *in situ* set up, the convergence measurements are supposed to start at a time t_0 fixed to 17 days in this work (chosen as a fitting parameter). A second-order quadrangular structured mesh (see Figure 4.7(a)) was employed for all of the simulations. The mesh distribution was chosen to be nearly symmetrical next to a drift’s wall to avoid localization problems due to mesh asymmetries. The sizes of the elements varied from $R/100$ next to the drift wall to $0.4R$ far from it (at $10R$).

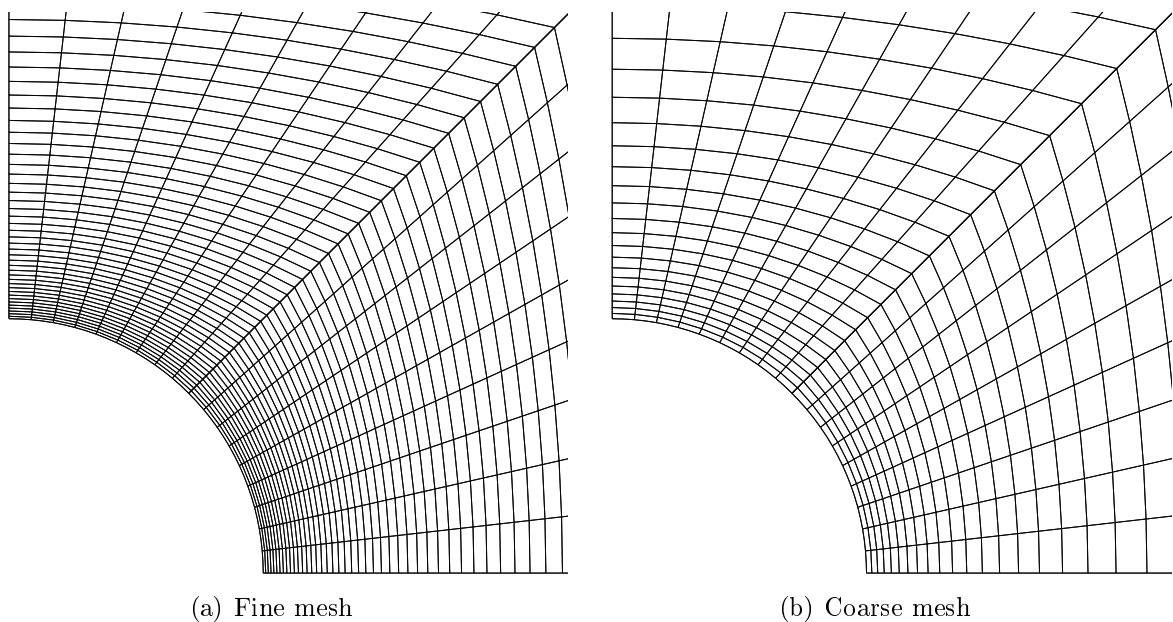


FIGURE 4.7 – Illustration of the meshes used in vicinity of the excavation.

The first step in the simulation of the drift excavation problem was to test whether the model parameters fitted to triaxial compression tests (Table 4.1) could reproduce the convergence measurements. Because no extension tests were used, the dependency of the yield criterion on the Lode angle was undetermined. Thus, two configurations were tested : with and without Lode angle dependency. Figure 4.8 shows a comparison between the obtained simulation results and the experimental data for drifts $//\sigma_h$ and $//\sigma_H$. In this figure, the circular and triangle-like shapes (curves labeled “no Lode” and “Lode” respectively) represent the border of the yield function F in the deviatoric plane, which is defined using the parameters χ_1, χ_2 as explained in subsection 4.2.2. Both simulation results differed from the field data because failure was not reached in these simulations (ξ was always below ξ_p). As shown in the previous section, using the set of parameters in Table 4.1, the material began with a contracting behavior once out of the elastic domain ($\beta = -0.1$) and became dilatant beyond failure (β from 0 to 0.35). It follows that because failure was not reached, β was always negative, and thus, the material contracted.

The mechanisms involved in the excavation problem differed from those involved in the triaxial compression tests. The loading regime around the drifts was in extension rather than in compression, yet the durations of the two problems differed greatly (compression tests are short-term experiments, whereas excavations involve rather long-term phenomena). Moreover, dilatant behavior was expected based on the previous observations.

Because the phenomena in the excavation problem could not be identified using the available experimental database and until appropriate experiments are conducted (extension creep tests, for example), the material parameters were directly fitted to the convergence measurements. In addition, the model will be reduced to its simplest form to better understand the results and facilitate the parameter identification ; the yield criterion is assumed to be independent from the Lode angle ($\chi_1 = \chi_2 = 0$), the mean stress dependency in the yield criterion is omitted ($\alpha = 0$), and the parameters R and β are assumed to be constant. According to those assumptions, one can express the yield and the potential functions as $F(\underline{\underline{\sigma}}) = \bar{q} - R$ and $G(\underline{\underline{\sigma}}) = \bar{q} - 3\beta\bar{p}$, respectively. With these simplifications, there are only five material constants, other than elastic parameters. In addition, the problem of the numerical treatment of the post-failure regime is avoided because the hardening/softening phenomena are not accounted for in the reduced model.

Even with the previous simplifications, the total number of parameters is too high (5 parameters for the viscoplastic behavior, 5 real elastic parameters and 2 fictitious elastic parameters), which makes their simultaneous identification extremely difficult. For that reason, the complexity of the problem will be increased progressively starting from an isotropic material up to a fully anisotropic material. In what follows, three parameter adjustments are employed : (i) an isotropic material is employed to highlight the importance of the stress anisotropy, (ii) an anisotropic material considering both elastic and non-elastic anisotropies is used, and (iii) a third material is tested in which only the elastic anisotropy is considered to prove the importance of the non-elastic anisotropy.

4.3.1 Modeling using an isotropic material

First, numerical computations using an isotropic material ($\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\sigma}}$) were conducted with the parameters listed in Table 4.3 to confirm the importance of the *in situ* stress aniso-

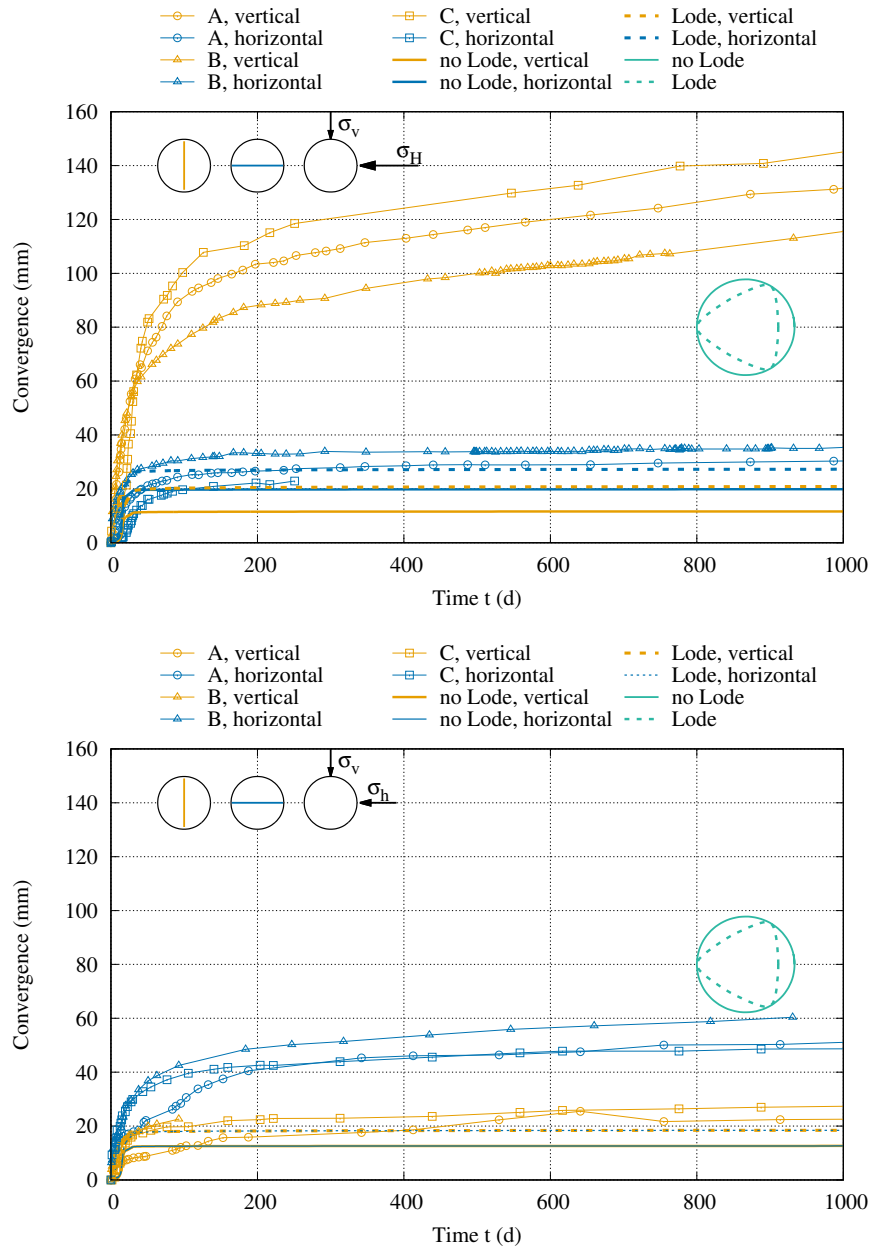


FIGURE 4.8 – Vertical and horizontal convergences of two drifts parallel to σ_h (up) and σ_H (bottom) using the parameters from Table 4.1 with two configurations : without Lode angle dependency (no Lode) ($\chi_1 = \chi_2 = 0$) and with Lode angle dependency (Lode) ($\chi_1 = 0.9, \chi_2 = 0.1$).

trophy. Figure 4.9 shows a comparison between the obtained results and the experimental data from three different sections of the two drifts oriented along the minor and major principle stresses. The proposed model effectively explained the important difference between the horizontal and vertical convergence measurements when the initial stress state was anisotropic. To understand this difference, the deviatoric stress was recorded at the drift ceiling and side wall and compared to an elastic computation, as illustrated in Figure 4.10. Because $F(\underline{\sigma}) = q - R$ when $\bar{\sigma} = \underline{\sigma}$, as in this case, the elastic yield was crossed at the ceiling before the side wall, which allowed viscoplasticity and the resulting dilatancy

(because $\beta > 0$) to develop more at the ceiling. In the other direction (along the major stress), although the obtained convergence was in the range of the measured data, no differences were obtained between horizontal and vertical results because the stress and material were isotropic in this configuration.

TABLE 4.3 – Elastic and viscoplastic model parameters when the material was considered isotropic.

$E(\text{MPa})$	ν	$A(\text{d}^{-1})$	n	$F_0(\text{MPa})$	$R(\text{MPa})$	β
5600	0.2	2.10^{-13}	6	0.1	9	0.3

4.3.2 Modeling using an anisotropic material

Now that the importance of the stress anisotropy has been highlighted, one can proceed to new computations in which the material anisotropy is considered to explain the entire set of measurements. Table 4.4 contains the material constants used in those simulations. Due to a lack of information regarding the shear modulus perpendicular to bedding plane G , its value was approximated by $G = (E + E')/(4(1 + \nu))$. As shown in Figure 4.11, good agreement can be observed between the numerical calculations and experimental measurements in both drift directions and for both vertical and horizontal measurements. Similar to the isotropic case, the deviatoric stress was recorded at the drift ceiling and side wall and compared to an elastic computation, as illustrated in Figure 4.13. Moreover, as illustrated in Figure 4.12, which shows the extent of the EFZ, the obtained shapes were similar to the *in situ* observations (Armand et al., 2014). At a threshold of $\varepsilon_{vp} = 0.001$, the extents of the EFZ at the ceiling and wall were compared with the results obtained by Armand et al. (2014) (who discerned the extents of the extensional and shear fractures). Table 4.5 shows an agreement in the proportions between the ceiling and wall values. Concerning the employed material parameters, the elastic anisotropy employed ($E/E' = 4/3$) was in accordance with the values of the Young's moduli obtained in the laboratory. Regarding the non-elastic parameters anisotropy, the ratio $R_c(0^\circ)/R_c(90^\circ) \simeq 0.86$ was also acceptable compared to experimental measurements (see Figure 4.2(b), for example).

TABLE 4.4 – Elastic and viscoplastic parameters of the complete model used in the drift excavation computations.

$E(\text{MPa})$	$E'(\text{MPa})$	ν	ν'	$G(\text{MPa})$	$\bar{E}(\text{MPa})$	$\bar{\nu}$	$A(\text{d}^{-1})$	n	$F_0(\text{MPa})$	$R(\text{MPa})$	β
6000	4500	0.2	0.2	2187.5	4500	0.2	2.10^{-13}	6	0.1	9.8	0.38

4.3.3 Importance of the non-elastic anisotropy

Considering the importance of the material anisotropy shown by the previous results, one can wonder whether it is rather the elastic anisotropy that is of greatest importance, whether the non-elastic anisotropy that has a greater effect or whether the two anisotropy types are both necessary. To answer this question, supplementary simulations

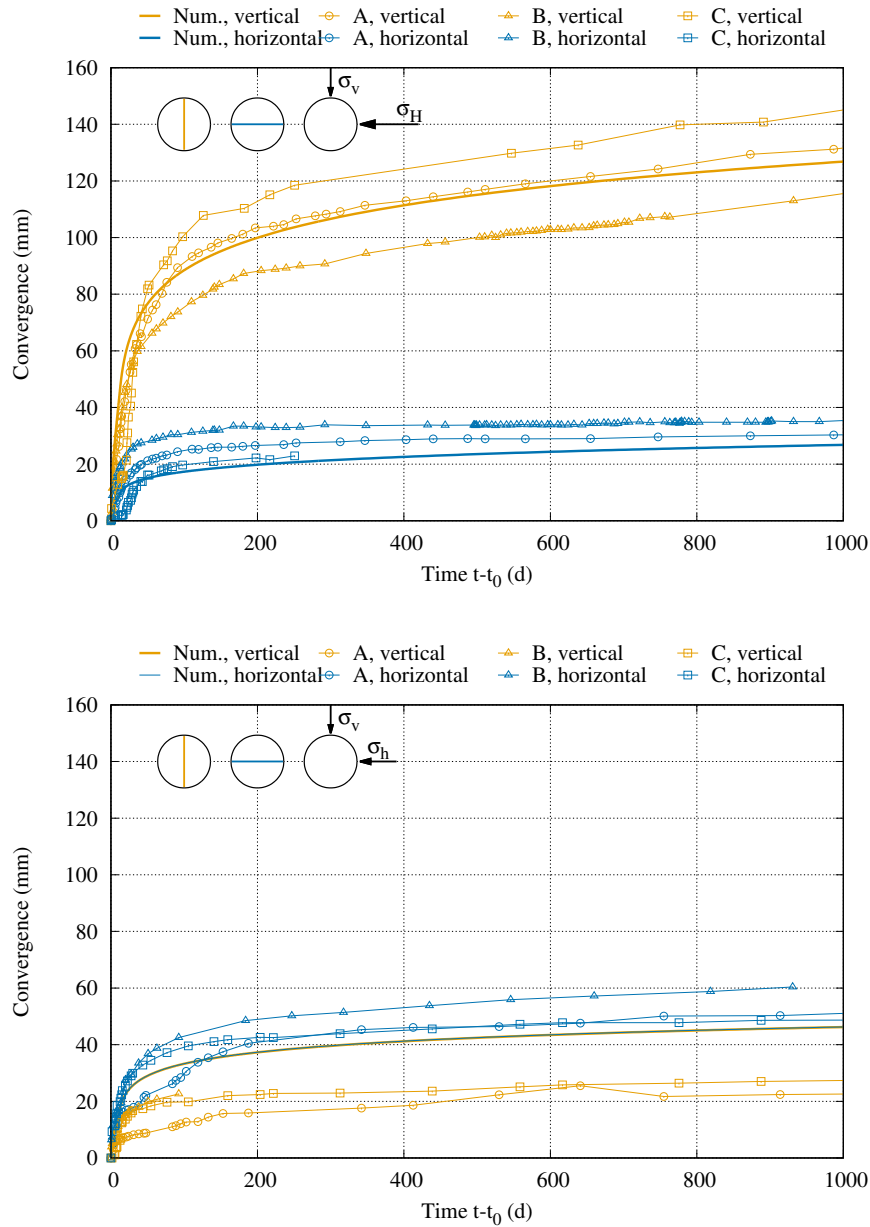


FIGURE 4.9 – Vertical and horizontal convergence measurements for two drifts parallel to σ_h (up) and σ_H (bottom) using an isotropic material compared to data from the three sections A, B and C of each drift.

were conducted after a modification to the utilized behavior law; instead of using a fictitious viscoplastic strain such that $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp} = f(\underline{\underline{\sigma}})$ and using the \tilde{L} -transformation, defining $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp} = \tilde{L} : \underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}$, this time, the real viscoplastic strain tensor is directly related to the real stress tensor such that $\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp} = f(\underline{\underline{\sigma}})$. This modification means that in these computations, only the elastic anisotropy was kept while the non-elastic anisotropy was omitted. This assumption significantly changed the results, particularly in the direction of σ_H , where the difference between the vertical and horizontal convergences was considerably reduced. To compensate for this issue, the elastic anisotropy was increased as shown in Table 4.6.

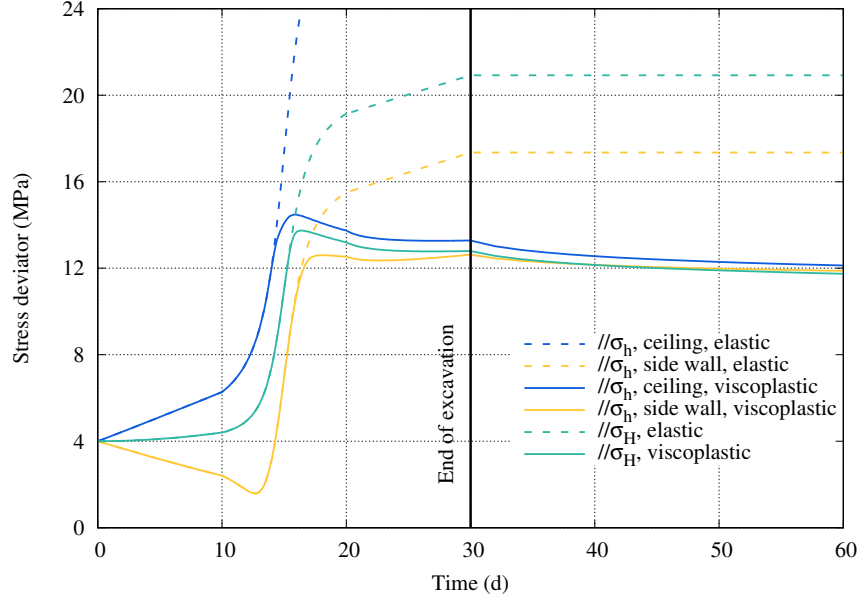


FIGURE 4.10 – Stress deviator at the ceiling and side wall of the drift parallel to σ_h and at the wall of the drift parallel to σ_H .

TABLE 4.5 – Comparison of the extents (fraction of drift radius) of the EFZ obtained by modeling and *in situ* data.

	along σ_h		along σ_H	
	wall	ceiling	wall	ceiling
Simulation	0.3	0.86	0.62	0.32
Data, extensional	0.2	0.5	0.4	0.15
Data, shear	0.2	1	1	0.15

As shown in Figure 4.14, even with an anisotropy factor of $E/E' = 2$, which is toward the upper band of values observed for the Callovo-Oxfordian claystone, the obtained results were less satisfactory than those obtained with the complete model. Thus, even if the anisotropy of the non-elastic parameters appears meaningless ($R_c(0^\circ)/R_c(90^\circ) \simeq 0.86$), its presence is indispensable for explaining the convergence measurements.

TABLE 4.6 – Elastic and viscoplastic model parameters when only the elastic anisotropy is considered.

E (MPa)	E' (MPa)	ν	ν'	G (MPa)	\bar{E} (MPa)	$\bar{\nu}$	A (d ⁻¹)	n	F_0 (MPa)	R (MPa)	β
6000	3000	0.2	0.2	1875	3000	0.2	2.10^{-13}	6	0.1	9.8	0.32

4.3.4 Study of the excavation scenario effect

In this section, the effect of the choice of the deconfining function λ on the convergence results is studied using the three different excavation scenarios presented in Figure 4.15 : (i)

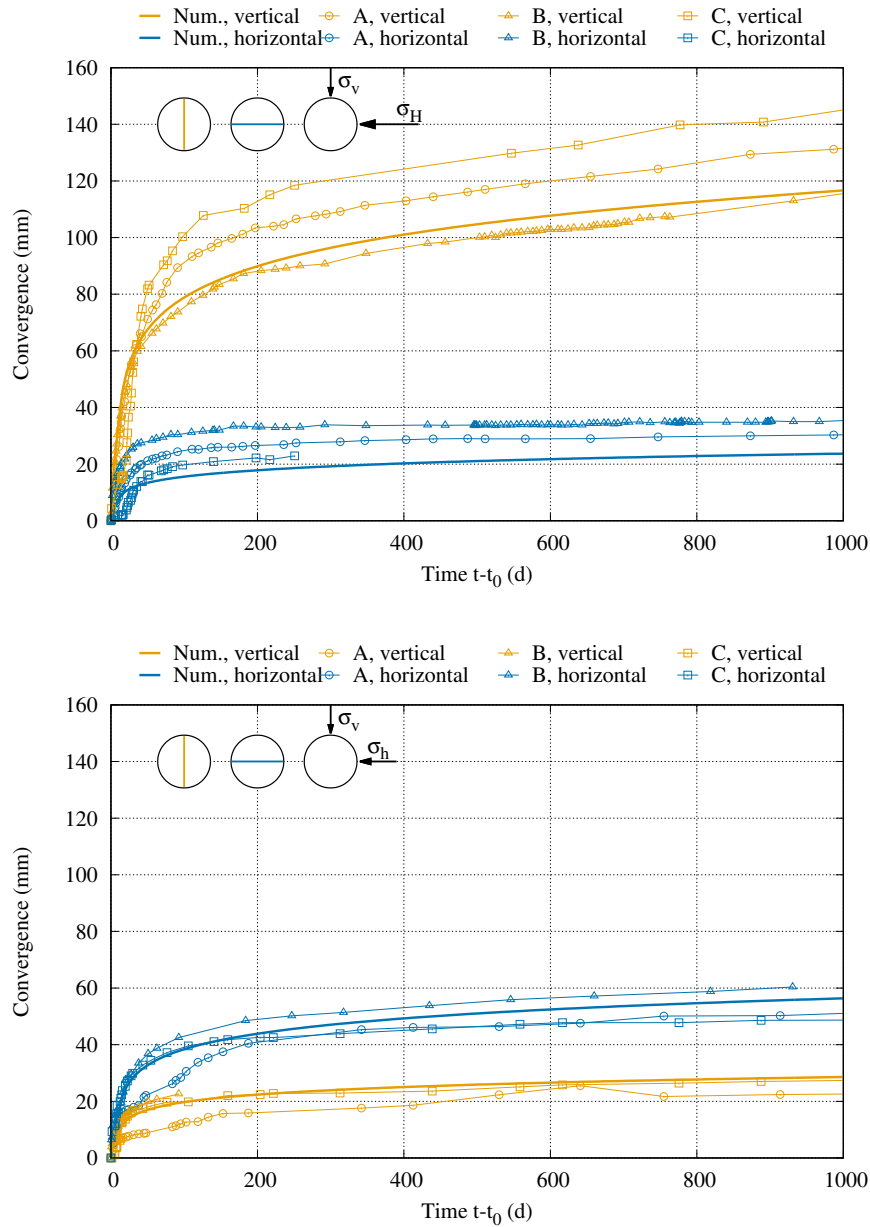


FIGURE 4.11 – Vertical and horizontal convergence measurements for two drifts parallel to σ_h (up) and σ_H (bottom) using the complete model (totally anisotropic) compared to data from the three sections A, B and C of each drift.

a realistic deconfining curve called scenario 1 (employed in the previous computations), (ii) a linear deconfining over the excavation time called scenario 2, and (iii) a sudden deconfining in 2 days from the 14th to the 16th day called scenario 3. Hereafter, only the results with an isotropic material (parameters from Table 4.3) and concerning the drift parallel to σ_h are presented; the obtained conclusions remain for the remaining configurations. Figure 4.16 shows the obtained vertical and horizontal convergences for the three scenarios. The variation in the excavation scenario had no significant effect on the long-term structure’s response, as the convergence measurements were nearly identical after 100 days. As for the short-term response, some differences were observed between

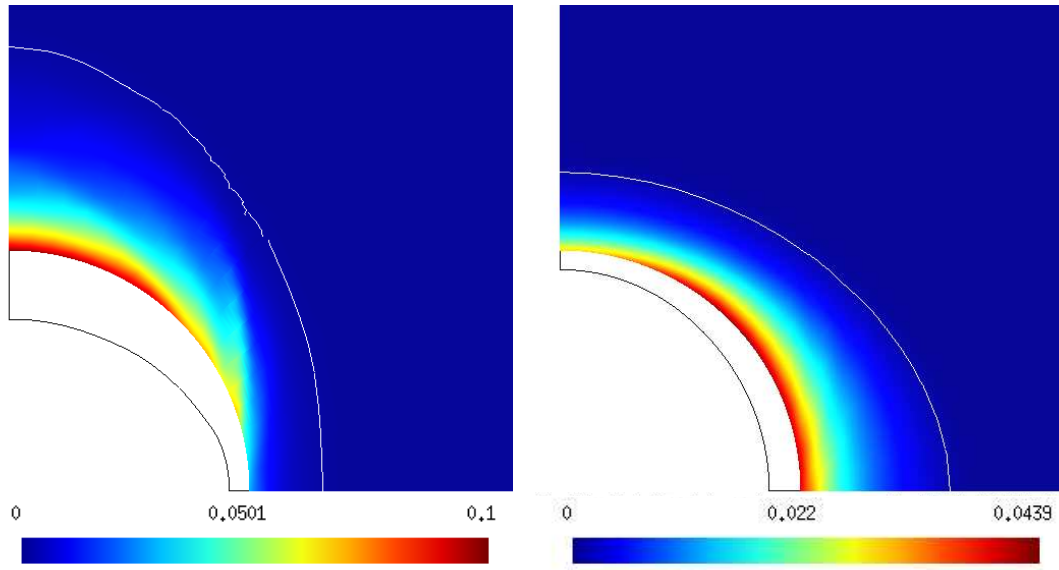


FIGURE 4.12 – Extent of the EFZ parallel to σ_h (left) and σ_H (right) as represented by the volumetric viscoplastic strain (limit at $\varepsilon_{vp} = 0.001$) and shape of the deformed drift (displacement $\times 10$) and using the complete model parameters (Table 4.4).

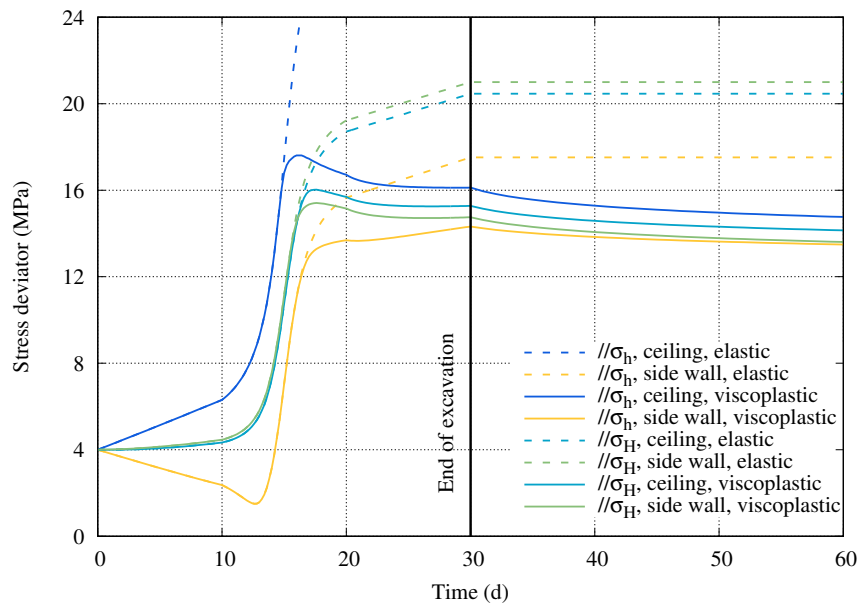


FIGURE 4.13 – Stress deviators at the ceilings and side walls of the two drifts.

the three scenarios but were still within the range of the measurements' discrepancy. Therefore, the adjusted parameters accurately represented the long-term behavior of the COx claystone.

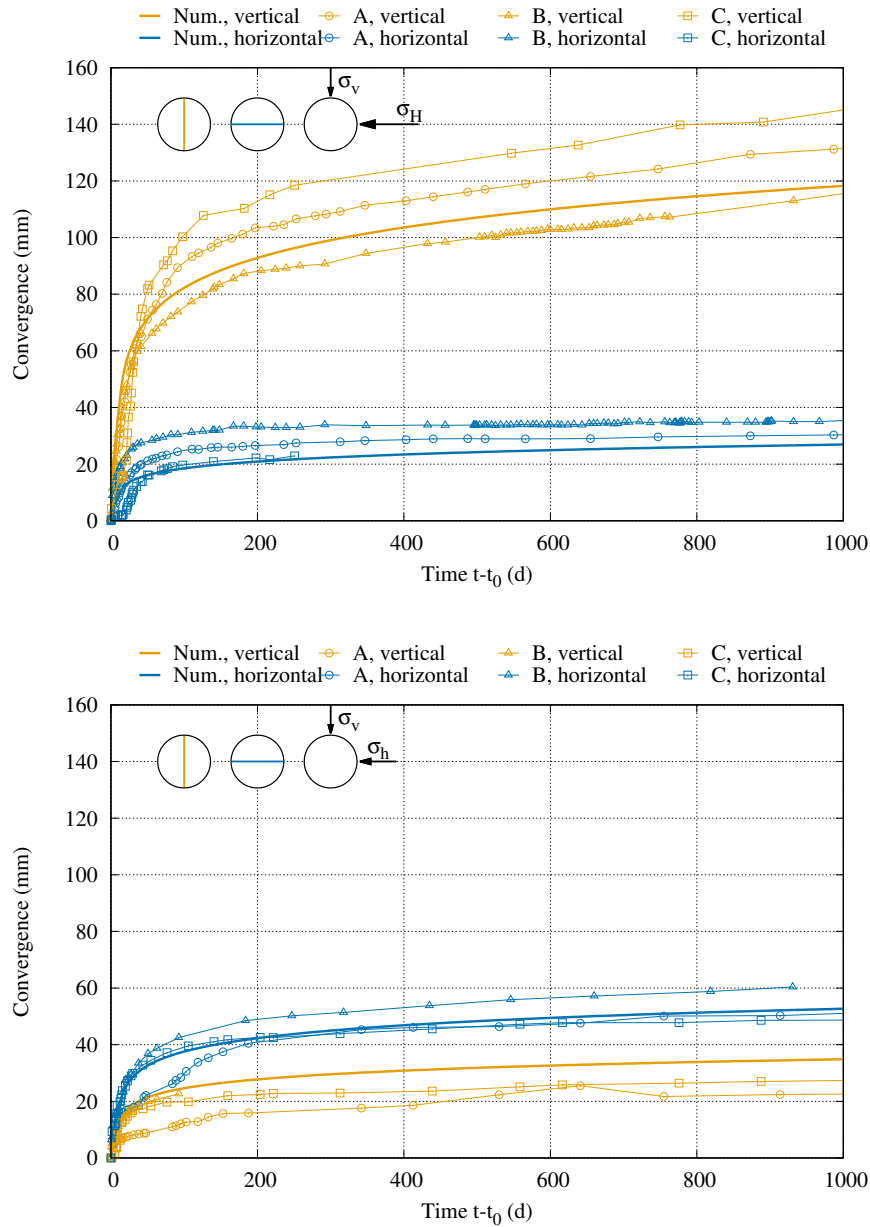


FIGURE 4.14 – Vertical and horizontal convergence measurements of two drifts parallel to σ_h (up) and to σ_H (bottom) when omitting the non-elastic anisotropy compared to data from the three sections A, B and C of each drift.

4.3.5 Study of the mesh size effect

To confirm that the presented results above were not mesh dependent, a new coarse mesh was introduced (see Figure 4.7(b)). This mesh has the exact same structure as the previous mesh (Figure 4.7(a)), but the mesh size in the radial direction was doubled. This space discretization was used to simulate the drift // σ_h with an isotropic material (parameters from Table 4.3) and the results were compared to the previous computations. As expected, the increase in the mesh size made the numerical convergence more difficult but that problem was avoided by decreasing the time discretization. Figure 4.17 presents

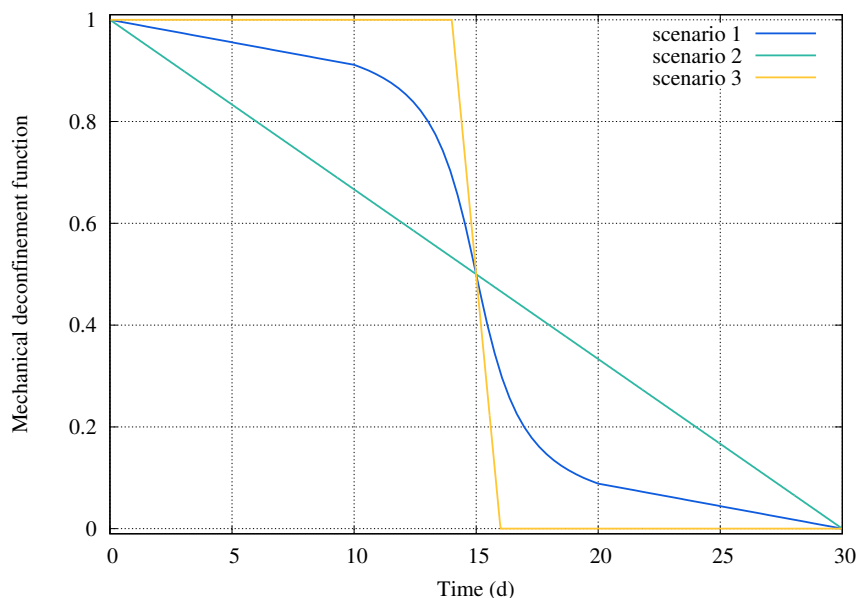


FIGURE 4.15 – Three deconfining scenarios : realistic (scenario 1), linear (scenario 2) and sudden (scenario 3).

the obtained convergence results using the two meshes and illustrates that they were rather insensitive to the mesh change utilized.

4.3.6 Discussions about the model parameters and loading regime

The viscoplastic parameters fitted to the *in situ* convergences measurements (Table 4.4) differed considerably from those adjusted to the laboratory triaxial compression tests (Table 4.1), which raises numerous questions about the model representation of the COx claystone. In this section, some explanations are presented, and further numerical and experimental studies are suggested to gain a better understanding of the problem.

- (i) In the compression regime and using the parameters in Table 4.1, once out of the elastic domain, the material behavior was initially contractant ($\beta = -0.1$) and became dilatant beyond failure (β from 0 to 0.35). Because the failure limit was not reached in the excavation problem when those parameters were used, the material tended to contract. Therefore, in the case of drifts parallel to σ_h , for example, these characteristics imply that the obtained vertical convergence was smaller than the horizontal one, contrary to measurements, even if the elastic yield was crossed at the ceiling before the side wall.
- (ii) In the extension regime, based on the parameters fitted to convergence measurements, the dilatancy began directly after the elastic limit was crossed ($\beta = 0.38$), which allowed for the drastic increase in the convergences.

In fact, the adjusted parameters for the triaxial compression tests are representative of short-term material behavior under a compression regime, whereas the excavation problem involves its long-term extensional behavior. To illustrate this statement, the loading regime around the studied drifts was examined as shown in Figures 4.18 and 4.19. Those

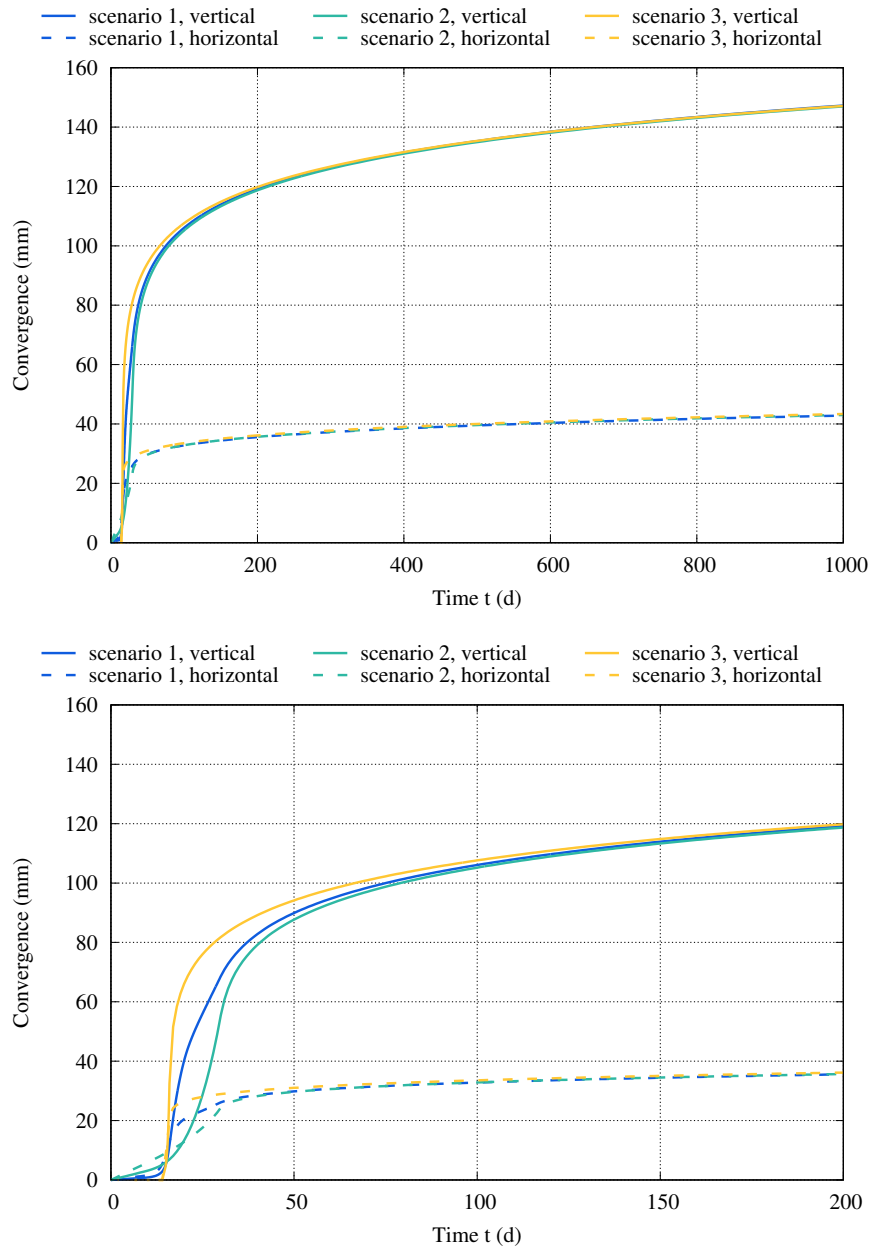


FIGURE 4.16 – Vertical and horizontal convergences of the drift $//\sigma_h$ using three different deconfining scenarios with an isotropic material (Table 4.3).

figures show that the Lode angle θ was close to 0 ($\cos(3\theta)$ close to 1) and that the stress deviator had an important value (approximately 12 MPa) next to the drift, which means that extension was the major loading regime in the excavation damaged zone.¹ These observations illustrate that the short- and long-term behaviors of the COx claystone represent two different processes that should be described by two separate mechanisms to obtain a more accurate behavior law for this material. However, this conclusion must be confirmed by other experimental data from different tests, particularly knowing the im-

1. The small extension zone observed in the horizontal direction of the drift $//\sigma_h$ (Figure 4.18 left), was due to the stress anisotropy and is not of great interest because the corresponding stress deviator (Figure 4.19 left) was far from the yield criterion ($q \simeq 1.33$ MPa).

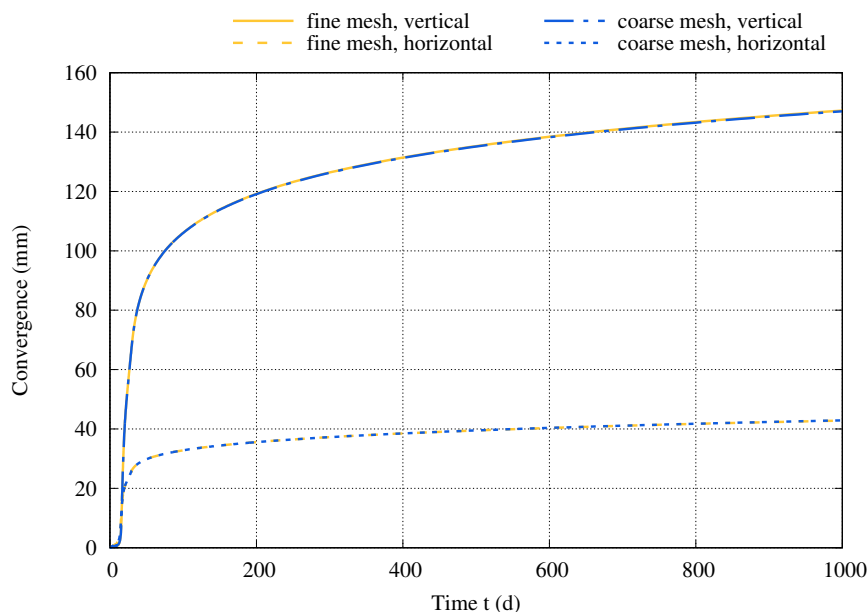


FIGURE 4.17 – Vertical and horizontal convergences of the drift $//\sigma_h$ using two different meshes (Figure 4.7).

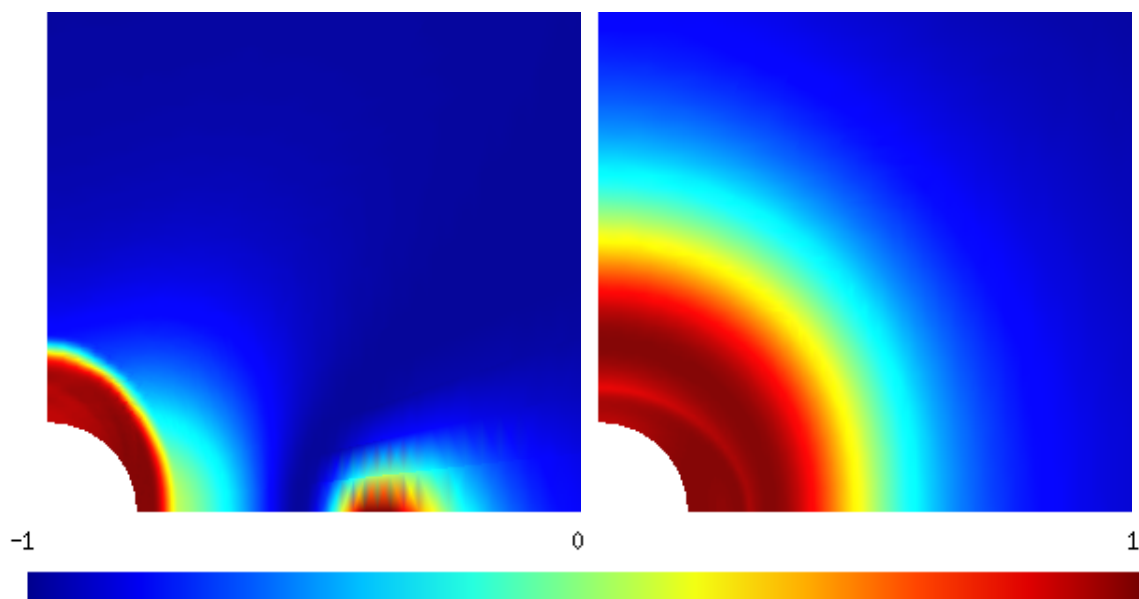


FIGURE 4.18 – $\cos(3\theta)$ at $t=1000$ d $//\sigma_h$ (left) and $//\sigma_H$ (right).

portant heterogeneity of the COx claystone and the discrepancies of the results among experimental setups. A series of triaxial extension tests are planned currently within the research program conducted by Andra to thoroughly investigate the volumetric behavior of COx under such a loading path. Moreover, a smaller compression strength ($R_c \simeq 10$ MPa) regarding to a typical experimental value ($10 \leq R_c \leq 24$ MPa) must be considered to obtain the *in situ* observed extent of the fractured zone. More investigations must be performed to provide additional insights regarding this difference.

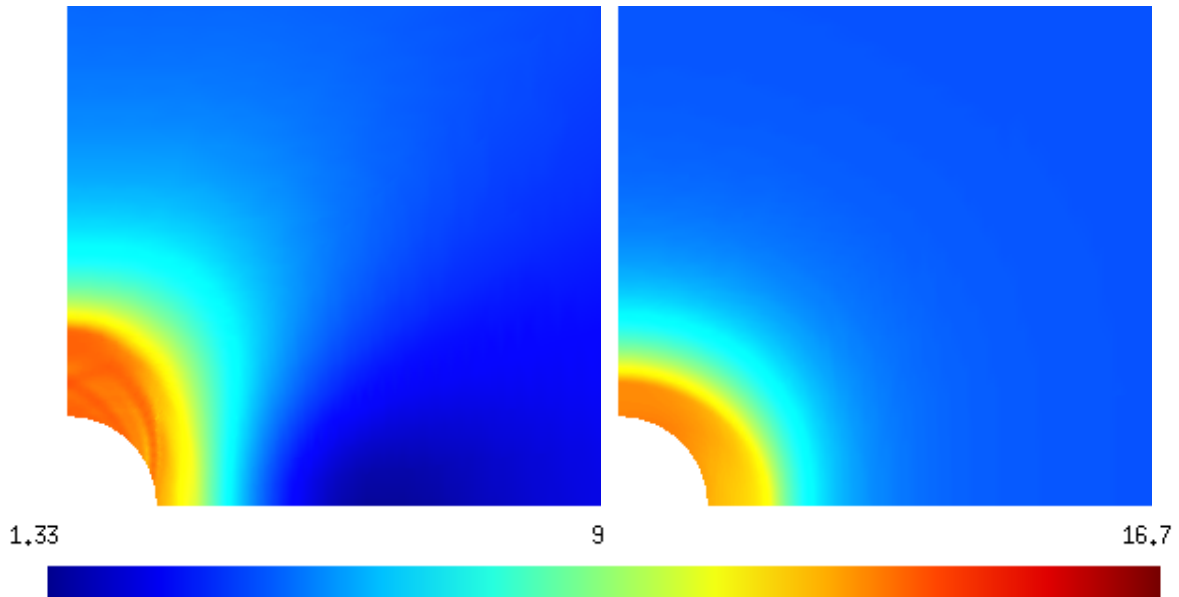


FIGURE 4.19 – Stress deviator at $t=1000$ d $//\sigma_h$ (left) and $//\sigma_H$ (right).

4.4 Conclusions

The present work introduced an elasto-viscoplastic constitutive model considering pre-peak hardening, post-peak softening, contractancy, dilatancy, time-dependent behavior and material anisotropy (elastic and non-elastic parameters) and validated this model using triaxial compression tests with displacement stabilization levels. The model produced satisfactory results compared to experimental data regarding stress-strain curves (axial, radial and volumetric) and time-dependent behavior, particularly for the relaxation phenomena at each displacement plateau. This behavior law was then applied to the drift excavation problem at the M/HM URL, where the model parameters were fitted using *in situ* convergence measurements.

First, the importance of the different anisotropies involved in this problem (stress, elastic and non-elastic parameters) was discussed via three different parameter adjustments. (i) The first computations were conducted using an isotropic material and accurately reproduced the convergence data for the drift parallel to σ_h (where the stress state was anisotropic in the plane of the drift cross section). In the perpendicular direction (where the stress was isotropic), the horizontal and vertical convergences were in the range of the measured data and were identical. These results prove the important role of the stress anisotropy in the direction parallel to σ_h and the necessity of considering the material anisotropy in the perpendicular direction to obtain different horizontal and vertical convergences. (ii) The second adjustment used the complete model (with elastic and non-elastic parameters anisotropies) and provided good agreement between the numerical results and the *in situ* measurements in the two drift directions. In particular, the employed Young's moduli and shear strength anisotropies were in accordance with the laboratory measurements. In addition, the obtained damaged zones were in an overall agreement with observations; the EFZ was extended vertically around the drift parallel to σ_h and horizontally in the perpendicular direction. (iii) In the third set of simulations, when the non-elastic parameters anisotropy was omitted from the model, the quality of the adjustment deteriorated, and

the fitted Young's moduli anisotropy was excessive for the COx claystone, which proves the importance of the non-elastic anisotropy.

Second, the importance of a realistic deconfining history was questioned by varying the deconfining type; a realistic, a linear function and a sudden function were tested on the same configuration and using the same material parameters. For the long-term drift behavior, all of the scenarios converged to the same results. Regarding the short-term response, some differences were observed from one scenario to the other, but the results were still within the range of the observed measurement scatters. Thus, the parameters fitted to convergence measurements accurately represented the long-term behavior of the material.

Third, the mesh size effect was studied by introducing a coarse mesh and comparing the convergence results for the two meshes. The obtained insensitivity with respect to mesh size confirms that the obtained conclusions were mesh independent.

Finally, comparisons between the model parameters fitted to triaxial compression tests and to the convergence measurements were conducted. The inability of the first parameters to reproduce the convergence measurements was outlined, and the difference between the two sets of material constants was discussed via the existence of two distinct mechanisms for the short- and long-term behaviors. However, this conclusion must be confirmed using a more complete model and more experimental data from, for example, creep and extension tests (ideally, creep tests under extension conditions), particularly given the heterogeneity of the COx claystone. In addition, the effect of hydromechanical coupling should be studied further in future works to understand the importance of the hydraulic phenomena (water and gas flows and desaturation) in the excavation problem. The anisotropy of the hydraulic parameters of the tested material, as observed, for example, by [Giot et al. \(2012\)](#) should also be considered.

4.A Appendix : Canonical and new writings of a fourth order transversely isotropic tensor

Let \mathcal{S} be the set of second order symmetric tensors and $B = (\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3 = \vec{e})$ an orthonormal basis of \mathbb{R}^3 where \vec{e} is a normal vector to the bedding plane. A transversely isotropic tensor $\underline{\underline{A}}$ could be written in different forms depending on the desired application and on the chosen basis of \mathcal{S} . The most common writing uses the canonical basis $(\underline{\underline{e}}_i, i = 1..6)$ such that :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{e}}_1 &= \vec{e}_1 \otimes \vec{e}_1, & \underline{\underline{e}}_2 &= \vec{e}_2 \otimes \vec{e}_2, & \underline{\underline{e}}_3 &= \vec{e}_3 \otimes \vec{e}_3, & \underline{\underline{e}}_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_1 \otimes \vec{e}_2 + \vec{e}_2 \otimes \vec{e}_1), \\ \underline{\underline{e}}_5 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_1 \otimes \vec{e}_3 + \vec{e}_3 \otimes \vec{e}_1), & \underline{\underline{e}}_6 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_2 \otimes \vec{e}_3 + \vec{e}_3 \otimes \vec{e}_2) \end{aligned} \quad (4.A.1)$$

It is generally represented by a 6x6 matrix where the relation $\underline{\underline{b}} = \underline{\underline{A}} : \underline{\underline{a}}$ is replaced by a matrix relation $\vec{b} = A\vec{a}$ in which a second order symmetric tensor is represented by the vector of its components in the canonical basis of \mathcal{S} *i.e.* $\vec{a} = (a_{11}, a_{22}, a_{33}, \sqrt{2}a_{12}, \sqrt{2}a_{13}, \sqrt{2}a_{23})^t$.

In this case, the matrix representation A of the tensor $\underset{\sim}{A}$ is :

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & 0 & 0 & 0 \\ A_{12} & A_{11} & A_{13} & 0 & 0 & 0 \\ A_{13} & A_{13} & A_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{11} - A_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{55} \end{pmatrix} \quad (4.A.2)$$

This writing is commonly used to express the elastic compliance tensor $\underset{\sim}{H}^{-1}$ (Obviously, one can easily find the elastic compliance tensor for an isotropic material by setting $E = E'$, $\nu = \nu'$ and $2G = E/(1 + \nu)$) :

$$\underset{\sim}{H}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu'}{E'} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & -\frac{\nu'}{E'} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu'}{E'} & -\frac{\nu'}{E'} & \frac{1}{E'} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1 + \nu}{E} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G} \end{pmatrix} \quad (4.A.3)$$

Another useful writing uses a new basis of \mathcal{S} ($\underline{I}, \underline{J}_1, \underline{J}_2, \underline{J}_3, \underline{J}_4, \underline{J}_5$) such that :

$$\begin{aligned} \underline{I} &= \underline{1}/\sqrt{3}, \quad \underline{J}_1 = (\underline{1} - 3\underline{e}_3)/\sqrt{6}, \quad \underline{J}_2 = (\underline{e}_1 - \underline{e}_2)/\sqrt{2}, \\ \underline{J}_3 &= \underline{e}_4, \quad \underline{J}_4 = \underline{e}_5, \quad \underline{J}_5 = \underline{e}_6 \end{aligned} \quad (4.A.4)$$

The decomposition of $\underset{\sim}{A}$ according to this basis leads to :

$$\begin{aligned} \underset{\sim}{A} &= a_1 \underline{I} \otimes \underline{I} + a_2 \left(\underline{I} \otimes \underline{J}_1 + \underline{J}_1 \otimes \underline{I} \right) + a_3 \underline{J}_1 \otimes \underline{J}_1 \\ &+ a_4 \left(\underline{J}_2 \otimes \underline{J}_2 + \underline{J}_3 \otimes \underline{J}_3 \right) + a_5 \left(\underline{J}_4 \otimes \underline{J}_4 + \underline{J}_5 \otimes \underline{J}_5 \right) \end{aligned} \quad (4.A.5)$$

which has the advantage of showing four eigenvectors of $\underset{\sim}{A}$: ($\underline{J}_2, \underline{J}_3, \underline{J}_4, \underline{J}_5$) to which are associated the eigenvalues (a_4, a_4, a_5, a_5). In this way, the fourth order tensor could be represented by two eigenvalues (a_4, a_5) and a 2x2 matrix $[A] = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_2 & a_3 \end{pmatrix}_{(\underline{I}, \underline{J}_1)}$. The

correspondence between these two writings is ensured by the following relations :

$$\begin{cases} 3a_1 = 2A_{11} + 2A_{12} + 4A_{13} + A_{33} \\ 3a_2 = \sqrt{2}(A_{11} + A_{12} - A_{13} - A_{33}) \\ 3a_3 = A_{11} + A_{12} - 4A_{13} + 2A_{33} \\ a_4 = A_{11} - A_{12} \\ a_5 = A_{55} \end{cases} \quad (4.A.6)$$

Chapitre 5

Modélisation de l'altération de la perméabilité due aux sollicitations mécaniques avec prise en compte de l'anisotropie du matériau. Application à l'excavation des tunnels et au transport d'hydrogène dans l'argilite Callovo-Oxfordien

Ce chapitre est consacré au développement d'un modèle de comportement hydromécanique complet. La partie mécanique est constituée de la loi de comportement d'endommagement en traction introduit dans le troisième chapitre et de la loi elasto-viscoplastique en compression utilisée dans le quatrième chapitre. En ce qui concerne le comportement hydraulique, la perméabilité intrinsèque du matériau est supposée fonction du tenseur d'endommagement et des déformations volumiques viscoplastiques. Ce modèle, tout d'abord appliqué au problème de creusement des tunnels, a permis de bien reproduire les mesures de convergences et les formes des zones endommagées ainsi que les données de perméabilité et de pression de pore autour des galeries. Il a été ensuite utilisé pour des calculs d'injection d'hydrogène sur les parois d'une galerie afin d'imiter le problème de production et de migration d'hydrogène dans la problématique de stockage des déchets. Même si ces calculs ont un caractère qualitatif plutôt que quantitatif, les simulations réalisées ont permis de montrer l'effet de la quantité d'hydrogène injectée sur l'intégrité de la roche.

Modeling of permeability alteration due to mechanical loading in anisotropic materials. Application to drift excavations and hydrogen migration in Callovo-Oxfordian claystone

Abstract

In this paper, a hydromechanical model accounting for the material elastic and non-elastic anisotropies and the permeability alteration in both compressive and tensile loading regimes is proposed. The mechanical model is composed of a damage law activated under tensile regime and an elasto-viscoplastic law activated under compressive regime. The impact of the mechanical loading on the hydraulic properties is described by a product law that allows the permeability increase due to crack opening in tension and dilatancy in compression. First, the proposed constitutive laws are validated on specific laboratory tests. Afterwards, the model is applied to real-scale problems concerning a radioactive waste repository project; the compressive part is employed to characterize the hydraulic behavior of the excavation damaged zones around two experimental drifts, and the tensile part is applied to the problem of pore pressure increase due to the produced hydrogen by metallic containers corrosion. The comparison between the numerical results and experimental data for the excavation problem provided satisfactory results for both mechanical and hydraulic measurements. Regarding the hydrogen migration problem, a parametric study on the quantity of produced hydrogen was performed to determine a flow rate threshold above which tensile damage is activated. In the present paper, the modeling approach is applied to an underground repository project, nevertheless, it can be used in other applications, where highly coupled hydromechanical processes in anisotropic media might be involved, such as unconventional oil and gas production, or enhanced geothermal systems.

Keywords : Permeability, Transverse isotropy, Mechanical Damage, Callovo-Oxfordian claystone, Excavation Damaged Zone, Hydrogen migration

5.1 Introduction

In a radioactive waste repository project in deep geological formation, the characterization of the permeability alteration due to disposal operations is crucial to prevent a radioactive contamination of the environment. The excavation operations lead to excavation damaged zones (EDZs), and the hydrogen production due to metallic container corrosion, after the site closure, may cause the extension of these zones due to overpressures. In the case of the French repository project (CIGEO), the Callovo-Oxfordian (COx) claystone, which is located at a depth between 420 and 520 m, is selected as a host formation. The French National Radioactive Waste Management Agency (Andra) built the Meuse/Haute Marne Underground Research Laboratory (M/HM URL) in this rock to better characterize its hydromechanical behavior using *in situ* measurements and laboratory experiments.

Several laboratory experiments were performed on the COx claystone to characterize the permeability change due to mechanical loadings. Different permeability measurements

were conducted on intact and damaged samples of this rock (ANDRA, 2012) and showed a permeability increase of several orders of magnitude. The effect of cracks on the permeability was studied under compression conditions using triaxial compression and hollow tests (Zhang et Rothfuchs, 2008; Zhang, 2011; Zhang et al., 2013; Zhang, 2016). The sealing capacity of the material was also studied by following the permeability evolution of fractured samples under an increasing confining pressure (Zhang et Rothfuchs, 2008; Zhang, 2011; Zhang et al., 2013; Zhang, 2016; M'JAHAD, 2012; Davy et al., 2007; Zhang et Rothfuchs, 2004). Unfortunately, none of these works studied the effect of the development of tensile cracks on the permeability of the COx claystone. For this reason, other materials are considered as a calibration basis to justify the modeling approach introduced in this work. However, one should be cautious about the fitted model parameters that may differ from one material to another. Since the study of the permeability alteration in concretes represents a long-standing research subject in which important experimental and modeling works were conducted, this material will be used in this paper to validate the developed model under tensile loading. In fact, compression (Tegguer et al., 2013; Picandet et al., 2001; Chen, 2011; Saito, 1995), Brazilian (Picandet et al., 2009; Wang et al., 1997; Aldea et al., 1999; Park et al., 2012), hollow (Choinska, 2006; Choinska et al., 2007), and direct tensile (Gérard et al., 1996) tests were performed on concretes and showed a correlation between the permeability and global measurements such as rigidity loss, crack opening, and residual strain. Several authors established phenomenological behavior laws to describe this effect; under compression, permeability decay was generally related to isotropic damage (Tegguer et al., 2013; Picandet et al., 2001; Gawin et al., 2002, 2003; Jason, 2004; Jason et al., 2007; Chen et al., 2014a; Souley et al., 2001), anisotropic damage (Bary et al., 2000; Chen et al., 2014b; Maleki et Pouya, 2010; Shao et al., 2005), and stress-strain levels (Zhang, 2016; Saito, 1995; Yang, 2011; Rahal, 2015), whereas, in tensile regime, crack opening was commonly used in a power law (Picandet et al., 2009; Rastiello, 2013; Olivella et Alonso, 2008). Furthermore, permeability change due to other phenomena such as confining pressure, temperature, and fluid pressure was generally accounted for by a product law as in Zhang (2016), Gawin et al. (2002), Gawin et al. (2003), and Chen et al. (2014a).

Numerous *in situ* experiments were also conducted and provided important insights about the hydromechanical behavior of the COx claystone. *In situ* permeability measurements were performed (Armand et al., 2014) and showed an important increase of the hydraulic conductivity around the drifts excavated in the M/HM URL. Furthermore, the permeability alteration was found to differ from one drift direction to another; the shape of the altered zones (EDZs) is extended vertically in the direction of the minor horizontal stress (σ_h) and horizontally in the direction of the major horizontal stress (σ_H) (Armand et al., 2013, 2014). Dissymetries were also observed for the pore pressure, whose evolution differed vertically and horizontally to a drift parallel to σ_H (Armand et al., 2006; Seyedi et al., 2016), and drift convergence, whose measurements were found to be directionally different (Armand et al., 2013; Guayacán-Carrillo et al., 2016). In 2012, based on the experimental data presented by Armand et al. (2016), Andra launched a model benchmark exercise (Seyedi et al., 2016) to provide a comparative study of the developed thermo-hydro-mechanical models for the COx claystone when considering the *in situ* excavation observations. A multitude of authors such as Cuvilliez et al. (2016), Mánica et al. (2016) and Pardoén et Collin (2016) conducted hydromechanical simulations and highlighted the importance of the material anisotropy to explain the different measurements around

excavated drifts. However, the permeability alteration proposed in those works does not account for the induced anisotropy.

Regarding the hydrogen production and migration problems, an important research effort was made recently to better understand these phenomena. Since hydrogen is intended to flow into an initially water saturated rock, several authors such as [Angelini et al. \(2011\)](#) and [Bourgeat et al. \(2013b\)](#) established numerical tools to simulate the transition between saturated and unsaturated states of a porous medium. [Bonin et al. \(2000\)](#) used a simplified model to estimate the hydrogen production flow rate and its pressure at the drift wall. [Dridi \(2005\)](#) studied the velocities of corrosion chemical reactions, and determined, using numerical simulations, the hydrogen flow rate crossing the engineered clay barriers and getting to the host rock. Furthermore, a multitude of experimental experiments (see, for example, [Boulin \(2008\)](#); [Harrington et al. \(2013a,b\)](#); [Cuss et al. \(2014\)](#)) were conducted using helium as a safe substitute of the hydrogen, and provided important information about the capillary curve (namely the entry pressure) and the relative permeabilities in the COx claystone.

To study both drift excavation problem, which involves compression, and hydrogen migration problem, which involves tension, a hydromechanical model is proposed in this paper. The model takes into account the material inherent and induced anisotropies and the permeability alteration due to crack developing under both tensile and compressive regimes. The mechanical model combines a damage law activated under tensile loading, as described by [Mahjoub et al. \(2016\)](#), and a new elaso-viscoplastic law activated under compressive loading and accounting for pre-peak hardening, post-peak softening, contractancy, and dilatancy phenomena. The permeability alteration is described by a product law that allows the permeability increase due to crack opening in tension and dilatancy in compression. First, the proposed constitutive law is validated on specific laboratory tests; the tensile part is applied to the interpretation of Brazilian tests with permeability measurements such as those conducted by [Picandet et al. \(2009\)](#) and [Wang et al. \(1997\)](#), whereas the compressive part is applied to triaxial compression tests with a gas injection performed by [Zhang \(2016\)](#). Afterwards, the hydromechanical model is employed to characterize the permeability alteration around two drifts in the M/HM URL. Finally, the problem of hydrogen migration in the COx claystone is considered, and several numerical simulations are performed in 1D axisymmetric conditions to determine a flow rate threshold above which tensile damage can be activated.

Notations Throughout this paper, first-order tensors (vectors) are represented by an arrow over a letter (\vec{a}), second-order tensors are denoted by two lines under a letter ($\underline{\underline{a}}$), and fourth-order tensors are designated by a tilde beneath a letter ($\tilde{\tilde{A}}$). A superscript t indicates the transpose operation, whereas 'tr' is the trace operator. The symbol ' $:$ ' denotes the product with double contraction, e.g., $\underline{\underline{a}} : \underline{\underline{b}} = a_{ij}b_{ji}$, where the index denotes the Cartesian components, and repeated subscripts imply summation unless otherwise noted. The product $\underline{\underline{a}} \underline{\underline{b}}$ denotes a single contraction, *i.e.*, $(\underline{\underline{a}} \underline{\underline{b}})_{ij} = a_{ik}b_{kj}$. In the same manner, the product $\tilde{\tilde{A}} \tilde{\tilde{B}}$ is defined as $(\tilde{\tilde{A}} \tilde{\tilde{B}})_{ijkl} = A_{ijmn}B_{nmkl}$. The dyadic or tensor products are $(\underline{\underline{a}} \otimes \underline{\underline{b}})_{ijkl} = a_{ij}b_{kl}$ and $(\vec{a} \otimes \vec{b})_{ij} = a_i b_j$. For any tensor $\underline{\underline{a}}$, its deviatoric part

is designated by a prime : $\underline{a}' = \underline{a} - (\text{tr}(\underline{a})/3)\underline{1}$, where $\underline{1}$ is the second-order identity tensor.

5.2 A hydromechanical model accounting for material anisotropy and permeability alteration

The hydromechanical model introduced in this paper is based on the theoretical framework of continuous porous media. Stress partition between solid matrix and fluid phases is applied such that the mechanical behavior of the solid matrix could be defined regardless of the flowing fluids in the porous space. To define that mechanical behavior for transversely isotropic materials, the modeling approach introduced in the work [Mahjoub et al. \(2016\)](#) is extended here to account for both tensile and compressive loading regimes. Concerning the impact of the mechanical behavior on the hydraulic properties, only the intrinsic permeability alteration is considered in the present model.

5.2.1 Isotropy-transverse isotropy transformation

[Mahjoub et al. \(2016\)](#) introduced a new isotropy-transverse isotropy transformation, based on an equivalent fictitious isotropic material approach, to adapt existing constitutive models from isotropic materials to transversely isotropic materials. The main features of this modeling procedure are recalled hereafter with the aim to use it to define a new behavior law for transversely isotropic materials.

Consider a real elastic transversely isotropic material whose stress, strain and Hooke's tensors are denoted by $\underline{\sigma}$, $\underline{\varepsilon}$ and $\underline{H}(E, E', \nu, \nu', G)$, respectively, and a fictitious elastic isotropic material whose corresponding tensors are denoted by $\underline{\bar{\sigma}}$, $\underline{\bar{\varepsilon}}$ and $\underline{\bar{H}}(\bar{E}, \bar{\nu})$, respectively. The definition of the real elastic parameters E , E' , ν , ν' , and G is clarified by providing the matrix form of the compliance tensor \underline{H}^{-1} as follows :

$$\underline{H}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{E} & -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu'}{E'} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\nu}{E} & \frac{1}{E} & -\frac{\nu'}{E'} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E} & -\frac{\nu'}{E'} & \frac{1}{E'} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1+\nu}{E} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G} \end{pmatrix} \quad (5.2.1)$$

in which the normal vector to the bedding plane \vec{e} coincides with \vec{e}_3 . The compliance tensor of the isotropic material $\underline{\bar{H}}^{-1}$ can be deduced by setting $E = E' = \bar{E}$, $\nu = \nu' = \bar{\nu}$ and $2G = \bar{E}/(1 + \bar{\nu})$.

The real and fictitious stress tensors can be related by a second-order tensorial transformation function $\underline{\ell}$ such that $\underline{\bar{\sigma}} = \underline{\ell}(\underline{\sigma})$. This function, which is assumed to be linear, may

be represented using a symmetric positive defined fourth-order tensor $\underline{\underline{L}}$:

$$\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\sigma}} \quad (5.2.2)$$

The equivalence of energy $\underline{\underline{\bar{\sigma}}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}} = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\varepsilon}}$ is employed to relate the real and fictitious strains and to ensure the symmetry of the equivalent stiffness tensor, leading to

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}} \quad (5.2.3)$$

Combining equations 5.2.2 and 5.2.3 and given that $\underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \underline{\underline{\bar{H}}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}$, it follows that

$$\underline{\underline{\bar{H}}} = \underline{\underline{L}} \underline{\underline{H}} \underline{\underline{L}} \quad (5.2.4)$$

Using this equation, the $\underline{\underline{L}}$ -transformation could be expressed as a function of $\underline{\underline{H}}$ and $\underline{\underline{\bar{H}}}$ as follows :

$$\underline{\underline{L}} = \underline{\underline{\bar{H}}}^{\frac{1}{2}} \left(\underline{\underline{\bar{H}}}^{-\frac{1}{2}} \underline{\underline{H}}^{-1} \underline{\underline{\bar{H}}}^{-\frac{1}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{\bar{H}}}^{\frac{1}{2}} \quad (5.2.5)$$

The details concerning the transition between equations (5.2.4) and (5.2.5) and the analytical expressions of the components of $\underline{\underline{L}}$, in terms of the real (E , E' , ν , ν' , and G) and fictitious (\bar{E} , and $\bar{\nu}$) elastic parameters, are given in Mahjoub et al. (2016).

5.2.2 Mechanical behavior law

To build a hydromechanical model that describes the behavior of a porous medium, the concept of the effective stress of the solid matrix is used as follows (see, for example, Coussy (1991)) :

$$\underline{\underline{\hat{\sigma}}} = \underline{\underline{\hat{\sigma}}} + p \underline{\underline{B}} \quad (5.2.6)$$

where $\underline{\underline{\sigma}}$ is the total stress tensor, $\underline{\underline{\hat{\sigma}}}$ is the effective stress tensor, p is the pore pressure (the actual fluid pressure in the case of saturated medium and an equivalent pressure in case of non saturated medium), and $\underline{\underline{B}}$ is the Biot tensor. In this work, to model the mechanical behavior of the solid matrix, a damage-elasto-viscoplastic model is proposed and could be written in the following form :

$$\underline{\underline{\hat{\sigma}}} = \underline{\underline{H}}(\underline{\underline{\omega}}) : \left(\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}_{vp} \right) \quad (5.2.7)$$

where $\underline{\underline{H}}$ is the Hooke's tensor introduced earlier and assumed to depend on a tensile damage second-order tensor $\underline{\underline{\omega}}$ in addition to its initial anisotropy, and $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}$ is the viscoplastic part of the total strain tensor $\underline{\underline{\varepsilon}}$ that is induced by compressive loadings. Figure 5.1 summarizes the main features of the model by showing an example of the model response to a uniaxial test while changing the loading regime. As it can be seen, the material rigidity (the slope in the elastic zone) remains the same in the compressive domain, whereas a loss of rigidity occurs each time the elastic yield is crossed in the tensile domain. Moreover, the rigidity is recovered at the transition from the tensile to the compressive domains, and the last damaged rigidity is remembered when returning to the tensile domain. Figure 5.1(right) shows a comparison between the predicted compressive strength

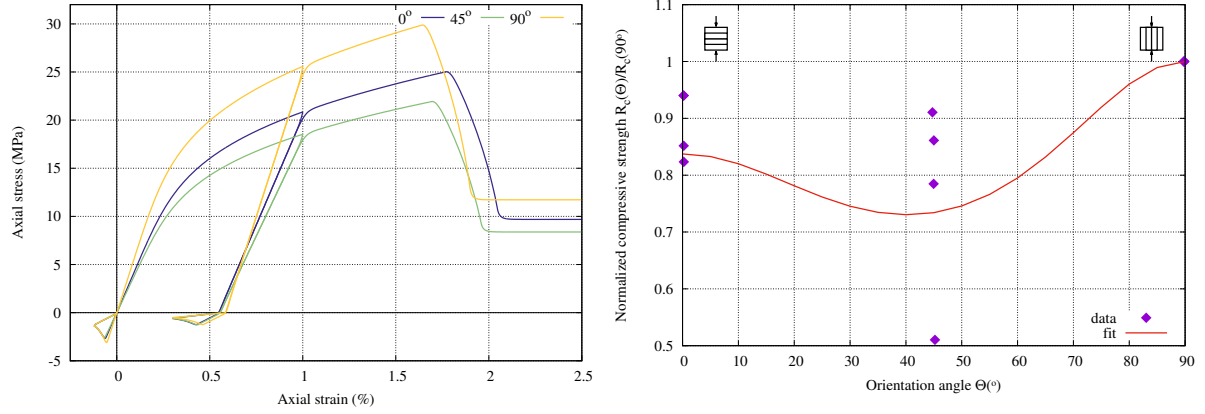


FIGURE 5.1 – Model response to a uniaxial test while changing the loading regime (tensile →compressive →tensile →compressive) for three orientation angles between the applied force and the normal to the bedding plane (left), and comparison between the predicted compressive strength and experimental data for COx claystone (right).

and experimental data for COx claystone. At this moment, those experimental measurements, which are obtained by Auvray C. 2004b (as cited in ANDRA (2012)), represent the only available compression tests with different orientation angles (0° , 45° , and 90°) in the literature.

The mechanical model is adapted to transversely isotropic materials using the modeling approach described above. Although the \tilde{L} -transformation is determined based on elasticity, it is also used for non-elastic behaviors such as for damage-elasto-viscoplastic models. The fictitious effective stress $\underline{\underline{\sigma}}_e$, elastic strain $\underline{\underline{\varepsilon}}_e$, viscoplastic strain $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}$ and Hooke's \tilde{H} tensors can be related to the real quantities $\underline{\underline{\hat{\sigma}}}$, $\underline{\underline{\varepsilon}}_e$, $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}$ and \tilde{H} , respectively, using the equivalence relations $\underline{\underline{\sigma}}_e = \tilde{L} : \underline{\underline{\hat{\sigma}}}$, $\underline{\underline{\varepsilon}}_e = \tilde{L} : \underline{\underline{\varepsilon}}_e$, $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp} = \tilde{L} : \underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}$ and $\tilde{H} = \tilde{L} \tilde{H} \tilde{L}$. Furthermore, the tensor \tilde{L} is hold constant at every stage of the damage which means that $\tilde{H}(\underline{\underline{\omega}}) = \tilde{L} \tilde{H}(\underline{\underline{\omega}}) \tilde{L}$. Using this approach, as illustrated in Mahjoub et al. (2016), the model accounts for the anisotropy of the non-elastic parameters (yield functions) in addition to the anisotropy of the elastic parameters (see, for example, Figure 5.1).

The use of the equivalence approach implies that the behavior law of the equivalent isotropic material could be written in the same form,

$$\underline{\underline{\sigma}}_e = \tilde{H}(\underline{\underline{\omega}}) : (\underline{\underline{\varepsilon}}_e - \underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}) \quad (5.2.8)$$

Hence, one has only to define the behavior law of the fictitious isotropic material and obtain a model for the real transversely isotropic material according to the equivalence relations.

5.2.2.a Damage behavior law

The damage behavior law used in the tensile regime is based on the model introduced by Rouabhi (2004) and Rouabhi et al. (2005), and extended by Mahjoub et al. (2016) and Mahjoub et al. (2015) to transversely isotropic materials. It is a rate-dependent behavior law where the anisotropic damage $\underline{\underline{\omega}}$ is activated only in tensile regime, whereas,

in compression regime, the material stiffness is recovered. The developed model is based on the so called, in damage mechanics, effective stress $\underline{\underline{\tilde{\sigma}}} = \underline{\underline{\omega}}^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{\bar{\sigma}}} \underline{\underline{\omega}}^{\frac{1}{2}}$ and strain $\underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}}_e = \underline{\underline{\omega}}^{-\frac{1}{2}} \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_e \underline{\underline{\omega}}^{-\frac{1}{2}}$ tensors (not to be confused with the effective stress in poromechanics $\underline{\underline{\hat{\sigma}}}$). The compliance tensor of the damaged material is given by the following expression :

$$\underline{\underline{\tilde{H}}}^{-1}(\underline{\underline{\omega}}) = -\frac{\bar{\nu}}{\underline{\underline{E}}}\underline{\underline{\omega}} \otimes \underline{\underline{\omega}} + \frac{1 + \bar{\nu}}{\underline{\underline{E}}}\underline{\underline{\omega}} \underline{\underline{\otimes}} \underline{\underline{\omega}} \quad (5.2.9)$$

which corresponds to the intact compliance tensor when $\underline{\underline{\omega}} = \underline{\underline{1}}$. The definition of the damage tensor allows the distinction between the tensile and compressive behaviors ; (i) under compressive regime, damage is deactivated (tensile cracks are assumed closed) which means that $\underline{\underline{\omega}} = \underline{\underline{1}}$, and (ii) under tensile regime, the damage continues to develop. In order to memorize the damage history when the loading regime is changing, a “permanent” damage tensor $\underline{\underline{\hat{\omega}}}$ is defined using the following equations :

$$\underline{\underline{\omega}} = \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{P}}(\underline{\underline{\hat{\omega}}} - \underline{\underline{1}})\underline{\underline{P}}, \quad \underline{\underline{P}} = \sum_{k=1}^3 \mathcal{H}(\bar{\varepsilon}_k) \bar{\vec{n}}_k \otimes \bar{\vec{n}}_k \quad (5.2.10)$$

where $\bar{\varepsilon}_k$ and $\bar{\vec{n}}_k$ are the eigenvalues and eigenvectors of $\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}$, respectively, and \mathcal{H} is the Heaviside function. Since $\underline{\underline{P}}$ is positive, the tensor $\underline{\underline{\omega}} - \underline{\underline{1}}$ is positive if and only if $\underline{\underline{\hat{\omega}}} - \underline{\underline{1}}$ is positive. This condition is satisfied when the following damage development law is employed :

$$\underline{\underline{\dot{\Lambda}}} = 2\underline{\underline{\hat{\omega}}}^{-\frac{1}{2}} \underline{\underline{\dot{\hat{\omega}}}} \underline{\underline{\hat{\omega}}}^{-\frac{1}{2}} = \sum_{k=1}^3 \dot{\lambda}(a_k) \bar{\vec{n}}_k \otimes \bar{\vec{n}}_k, \quad \dot{\lambda}(x) = v_d \left[1 - \exp \left(- \left\langle \frac{x}{R_d} - 1 \right\rangle^{n_d} \right) \right] \quad (5.2.11)$$

where a_k and $\bar{\vec{n}}_k$ are the eigenvalues and the eigenvectors of the tensor $\underline{\underline{a}} = \frac{1}{2} \langle \underline{\underline{\tilde{\sigma}}} \rangle \langle \underline{\underline{\tilde{\varepsilon}}} \rangle$, respectively, v_d , R_d , and n_d are material parameters, and $\langle x \rangle$ denotes the positive part of the tensor x , that is the only tensor having the same eigenvectors as x , and whose eigenvalues are deduced by the operator $\langle x_i \rangle = (x_i + |x_i|)/2$. One can easily prove that, in a uniaxial tensile test and for an isotropic material, the threshold value R_d could be expressed using the tensile strength R_t such that $R_d = R_t^2/(2E)$. The differentiation between $\underline{\underline{\omega}}$ and $\underline{\underline{\hat{\omega}}}$ is very important to memorize the damage history when the loading regime is changing. For instance, when moving from tensile to compressive regime, $\underline{\underline{\omega}}$ changes from $\underline{\underline{\hat{\omega}}}$ to $\underline{\underline{1}}$ but $\underline{\underline{\hat{\omega}}}$ keeps track of the last damaged state, and when going back to tensile regime, $\underline{\underline{\omega}}$ returns to $\underline{\underline{\hat{\omega}}}$.

5.2.2.b Viscoplastic behavior law

Following the line of thought explained above, the evolution of the viscoplastic strain is ensured by an evolution law of the fictitious viscoplastic strain such that :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp} = \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_{vp} \quad \text{with} \quad \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp} = \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp}(\bar{\underline{\underline{\sigma}}}, \xi) \quad (5.2.12)$$

where the internal variable ξ is a scalar variable characterizing the isotropic hardening/softening viscoplasticity defined such that $\dot{\xi} = \sqrt{\frac{2}{3}} \|\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}'_{vp}\|$. The evolution law of $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp}$

is based on the Perzyna non-associated model and can be written as follows :

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_{vp} = A \left\langle \frac{F(\underline{\underline{\sigma}}, \xi)}{F_0} \right\rangle^n \partial_{\underline{\underline{\sigma}}} G(\underline{\underline{\sigma}}, \xi) \quad (5.2.13)$$

where A , n , and F_0 are model parameters. The functions F and G are the yield and plastic potential surfaces, respectively. In this work, they are assumed to follow a modified Drucker-Prager model :

$$F(\underline{\underline{\sigma}}, \xi) = \bar{q}/\varrho(\bar{\theta}) - 3\alpha\bar{p} - R(\xi), \quad G(\underline{\underline{\sigma}}, \xi) = \bar{q} - 3\beta(\xi)\bar{p} \quad (5.2.14)$$

where

- $\bar{p} = -\text{tr}(\underline{\underline{\sigma}})/3$ is the mean stress value ;
- $\bar{q} = \sqrt{\frac{3}{2}\underline{\underline{\sigma}}' : \underline{\underline{\sigma}}'}$; $\underline{\underline{\sigma}}'$ is the stress deviator ;
- $\cos(3\bar{\theta}) = 3\sqrt{6} \det(\underline{\underline{\sigma}}' / \|\underline{\underline{\sigma}}'\|)$ where $\bar{\theta}$ is the Lode angle ; and
- $\varrho(\bar{\theta}) = I(-1)/I(\cos(3\bar{\theta}))$ defines the deviatoric section of the yield function in which $I(x) = \cos(\chi_2\pi/6 - \arccos(\chi_1 x)/3)$ and $(\chi_1, \chi_2) \in [0, 1] \times [0, 2]$ are model parameters (refer to [Bigoni et Piccolroaz \(2004\)](#)).

In expression 5.2.14, α is a constant parameter, whereas the following expressions are used for $\beta(\xi)$ and $R(\xi)$:

$$\begin{aligned} \text{for } \xi \leq \xi_p : \quad & \beta(\xi) = \beta_0 + (\beta_p - \beta_r)(\xi/\xi_p) \\ & R(\xi) = R_0 + (R_p - R_r)(\xi/\xi_p)^m \\ \text{for } \xi_p < \xi \leq \xi_r : \quad & \beta(\xi) = \beta_p + (\beta_r - \beta_p)(\xi - \xi_p)/(\xi_r - \xi_p) \\ & R(\xi) = R_p + (R_r - R_p)(\xi - \xi_p)/(\xi_r - \xi_p) \\ \text{for } \xi > \xi_r : \quad & \beta(\xi) = \beta_r \\ & R(\xi) = R_r \end{aligned} \quad (5.2.15)$$

where ξ_p , ξ_r , β_0 , β_p , β_r , R_0 , R_p , R_r , and m are material constants. In these definitions, the model parameters ξ_p and ξ_r are specific values of ξ that delimit the pre-peak hardening and post-peak softening phases, respectively.

5.2.3 Impact of the mechanical behavior on the permeability

In this study, flows are assumed to respect to the generalized Darcy's law : for a given fluid phase α , the filtration velocity \vec{w}^α may be written as

$$\vec{w}^\alpha = -\frac{\underline{\underline{K}}_\alpha}{\eta_\alpha} \left(\vec{\nabla} p_\alpha - \rho_\alpha \vec{g} \right); \quad \underline{\underline{K}}_\alpha = k_\alpha(S_\alpha) \underline{\underline{K}} \quad (5.2.16)$$

where \vec{g} is the gravitational field vector and p_α , η_α , ρ_α , and S_α are pressure, dynamic viscosity, mass density, and degree of saturation of the α -phase, respectively. Permeability $\underline{\underline{K}}_\alpha$ is composed of a relative permeability $k_\alpha(S_\alpha)$, which is a function only of the α -degree of saturation S_α , and an intrinsic permeability $\underline{\underline{K}}$, which describes the structure of the porous space regardless of the flowing phases.

The modification of the solid matrix structure has an important impact on the fluids flow through the porous network especially by modifying the material intrinsic permeability

$\underline{\underline{K}}$. In addition to the initial material anisotropy, the mechanical loading may induce an other anisotropy that should be properly considered. For simplicity, it is assumed, in this work, that only the tensile damage induces an anisotropy through the second-order tensor $\underline{\underline{\omega}}$, whereas the compressive contribution is represented by a scaling function $k_c(\varepsilon_{vp})$ through the volumetric viscoplastic strain $\varepsilon_{vp} = \text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp})$. In a transversely isotropic material characterized by the schistosity tensor $\underline{\underline{e}} = \vec{e} \otimes \vec{e}$ (where \vec{e} is a unit vector normal to the bedding planes), a proposed permeability function should respect the material symmetry, that is to be isotropic in regards to $\underline{\underline{e}}$ and $\underline{\underline{\omega}}$. The representation theorem of second order isotropic tensors (see, for example, (Truesdell et Noll, 2004, pp 27-35)) implies that $\underline{\underline{K}}$ may be represented in the following form :

$$\underline{\underline{K}}(\varepsilon_{vp}, \underline{\underline{\omega}}, \underline{\underline{e}}) = k_c(\varepsilon_{vp}) \left(\phi_0 \underline{\underline{1}} + \phi_1 \underline{\underline{e}} + \phi_2 \underline{\underline{\omega}} + \phi_3 (\underline{\underline{\omega}} \underline{\underline{e}} + \underline{\underline{e}} \underline{\underline{\omega}}) + \phi_4 \underline{\underline{\omega}}^2 + \phi_5 (\underline{\underline{\omega}}^2 \underline{\underline{e}} + \underline{\underline{e}} \underline{\underline{\omega}}^2) \right) \quad (5.2.17)$$

In this expression ϕ_i ($i = 0 \dots 5$) are functions of the invariants ($\text{tr}(\underline{\underline{\omega}})$, $\text{tr}(\underline{\underline{\omega}}^2)$, $\text{tr}(\underline{\underline{\omega}}^3)$, $\text{tr}(\underline{\underline{e}} \underline{\underline{\omega}})$, and $\text{tr}(\underline{\underline{e}} \underline{\underline{\omega}}^2)$) whose experimental identification is not straightforward. In this work, a more simple function, yet isotropic with respect to $\underline{\underline{e}}$ and $\underline{\underline{\omega}}$, is introduced. It is a multiplicative decomposition that separates the effect of each type of anisotropy as follows :

$$\underline{\underline{K}}(\varepsilon_{vp}, \underline{\underline{\omega}}, \underline{\underline{e}}) = k_c(\varepsilon_{vp}) \underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}})^{\frac{1}{2}} \underline{\underline{K}}_0(\underline{\underline{e}}) \underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}})^{\frac{1}{2}} \quad (5.2.18)$$

where $\underline{\underline{K}}_0(\underline{\underline{e}}) = \underline{\underline{K}}(0, \underline{\underline{1}}, \underline{\underline{e}})$ is the initial material permeability, and $\underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}})$ is the contribution induced by the tensile regime. Splitting $\underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}})$ into two parts (at left and right of $\underline{\underline{K}}_0$) is important to ensure the symmetry of $\underline{\underline{K}}$. When $\underline{\underline{K}}_0$ is isotropic ($= K_0 \underline{\underline{1}}$), the two parts can be combined such that $\underline{\underline{K}} = k_c(\varepsilon_{vp}) K_0 \underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}})$ which means that the only permeability anisotropy is induced by damage. However, in the general case, the permeability anisotropy is a combination between initial and induced anisotropies. The effects of other phenomena on the material permeability, such as confining pressure and self-healing mechanisms, are not considered in this work; but they may be easily accounted for by including each phenomenon contribution to the proposed product model.

In order to quantify the tensile part $\underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}})$, the same reasoning as in Bary et al. (2000), Chen et al. (2014b), and Shao et al. (2005) is used. As illustrated in Figure 5.2, when the damage increases in a given direction \vec{n} , meaning that cracks are propagated parallel to the plane having \vec{n} as normal vector, then the permeability will rise in that plane. Following this reasoning, $\underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}})$ can be written as follows :

$$\underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}}) = \underline{\underline{1}} + \phi(\omega_1) \underline{\underline{m}}_{23} + \phi(\omega_2) \underline{\underline{m}}_{13} + \phi(\omega_3) \underline{\underline{m}}_{12} \quad (5.2.19)$$

where $\phi(x) = \kappa_t(x-1)^{\gamma_t}$, κ_t , and $\gamma_t > 0$ are material parameters, $\omega_i \geq 1$ are the eigenvalues of $\underline{\underline{\omega}}$, $\underline{\underline{m}}_{ij} = \vec{m}_i \otimes \vec{m}_i + \vec{m}_j \otimes \vec{m}_j$, and \vec{m}_i ($i = 1, 2, 3$) are the eigenvectors of $\underline{\underline{\omega}}$. This equation could be restated in the following compact expression :

$$\underline{\underline{k}}_t(\underline{\underline{\omega}}) = \left(1 + \text{tr}(\underline{\underline{\Phi}}(\underline{\underline{\omega}})) \right) \underline{\underline{1}} - \underline{\underline{\Phi}}(\underline{\underline{\omega}}) \quad (5.2.20)$$

where $\underline{\underline{\Phi}}(\underline{\underline{\omega}})$ is the coaxial tensor to $\underline{\underline{\omega}}$ with eigenvalues given by $\phi(\omega_i)$. It is easy to prove that, since $\underline{\underline{\Phi}}(\underline{\underline{\omega}})$ is positive, the eigenvalues of $\underline{\underline{k}}_t$ are greater or equal to 1. Moreover, the

fact that \underline{k}_t is expressed in terms of $\underline{\omega}$ and not $\underline{\hat{\omega}}$ (the permanent damage) implies that the permeability decay due to tensile cracks is completely recovered once the material is under compressive regime. Although this total sealing property may be questionable, the focus of the current paper is set only on the permeability development, whereas the permeability recovery should be studied further in future works (for example, by expressing \underline{k}_t as a function of a combination between $\underline{\omega}$ and $\underline{\hat{\omega}}$).

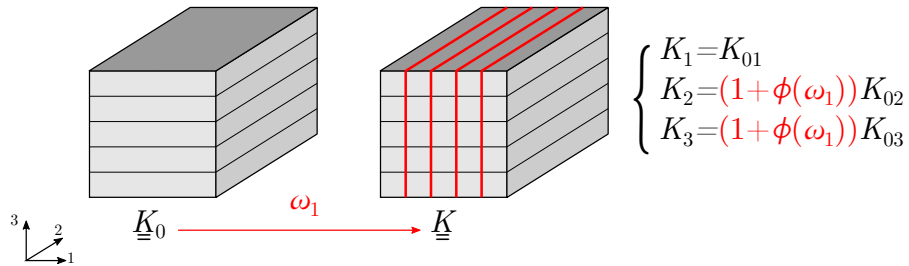


FIGURE 5.2 – Illustration of tensile damage impact on the material permeability : a damage in the direction 1 (ω_1) induces an increase of the components 2 and 3 of the permeability tensor. K_{0i} and K_i ($i = 1, 2, 3$) are the eigenvalues of the initial (\underline{K}_0) and final (\underline{K}) permeabilities, respectively.

Under compressive regime, the permeability is mainly related to the material volumetric behavior. In this work, it is assumed to increase with dilatancy and remain constant when the material is contractant. The following expression of the compressive part $k_c(\varepsilon_{vp})$ is employed :

$$k_c(\varepsilon_{vp}) = 1 + \kappa_c \langle \varepsilon_{vp} \rangle^{\gamma_c} \quad (5.2.21)$$

where only the positive part of ε_{vp} is considered, and κ_c and γ_c are material constants.

5.3 Model validation on laboratory experiments

5.3.1 Permeability change in tensile regime : simulation of Brazilian tests with permeability measurements

To validate the tensile behavior, the damage model is first isolated : the mechanical behavior is then restricted to $\hat{\sigma} = \underline{H}(\underline{\omega}) : \underline{\varepsilon}$, and the permeability relation is reduced to $\underline{K} = \underline{k}_t(\underline{\omega}) \underline{K}_0$ because $\underline{\varepsilon}_{vp} = \underline{0}$.

Data from Brazilian tests with permeability measurements are taken from literature and are analyzed using the proposed behavior law. Picandet et al. (2009) conducted this experiment using a gas to measure permeability, whereas Wang et al. (1997) and Aldea et al. (1999) used water for their measurements. Aside from this difference, the experimental procedure was the same for all these authors ; a cylindrical concrete sample, with diameter D and thickness L , was loaded diametrically, and both axial and lateral displacements, in addition to the applied load F were recorded. Once the lateral displacement reached a desired value, the sample was unloaded and its permeability was measured. These steps

were repeated for different desired lateral displacement values and each sample was used only once (the specimen was not used again after permeability measurement). Unlike the natural materials, this may not be problematic because the same procedure was used to manufacture quasi-identical concrete specimens. For the permeability measurements, an inlet pressure P_1 and an outlet pressure $P_2 < P_1$ (equal to the atmospheric P_0 in the case of gas measurements) were imposed on the end faces of the sample, while the outgoing fluid volumetric flow rate φ was measured. When the steady state was reached a global permeability K was deduced from the following equations :

$$\text{For an incompressible water : } \varphi = KS \frac{gh}{\rho_\lambda \eta_\lambda L}; \quad \text{For a perfect gas : } \varphi = KS \frac{P_1^2 - P_0^2}{2L \eta_\gamma P_0} \quad (5.3.1)$$

where $S = \pi D^2/4$ is the sample's cross section, $h = (P_1 - P_2)/(\rho_\lambda g) + L$ is the water head, g is the gravitational field intensity, ρ_λ is the water mass density, and η_λ and η_γ are water and gas dynamic viscosities, respectively.

For numerical simulations, only the results of [Picandet et al. \(2009\)](#) and [Wang et al. \(1997\)](#) are selected. The tested concretes are considered as initially isotropic and the samples are supposed perfectly slipping with respect to the press so that the problem can be simplified to a quarter circle with a 2D plane stress configuration. Unlike the experimental setup, in which the applied load was controlled via the lateral displacement measure, and for simplicity, the numerical computations are conducted by controlling the axial displacement. The finite element code of the Geosciences Center of Mines ParisTech, Viple3D, ([Tijani, 2000](#)) is used for these simulations and the mechanical parameters (see [Table 5.1](#)) are fitted to experimental data as shown in [Figure 5.3](#).

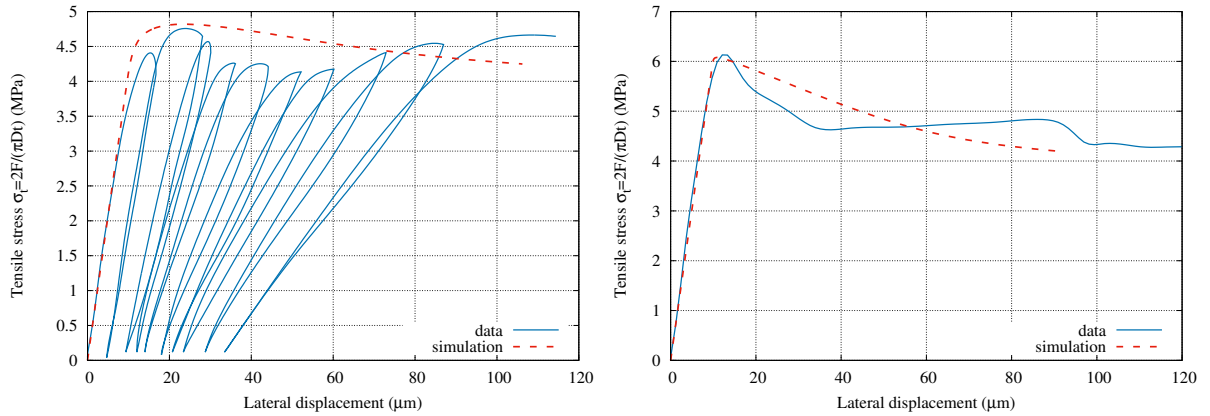


FIGURE 5.3 – Brazilian tensile stress ($\sigma_t = 2F/(\pi DL)$) as a function of the lateral displacement : experimental data from [Picandet et al. \(2009\)](#) (left) and [Wang et al. \(1997\)](#) (right) and numerical simulation results.

TABLE 5.1 – Hydromechanical model parameters used to simulate the Brazilian tests.

	$E(\text{GPa})$	ν	n_d	$v_d(\text{s}^{-1})$	$R_d(\text{MPa})$	κ_t	γ_t
Picandet et al. (2009)	16.8	0.2	1	2	$7.44 \cdot 10^{-4}$	0.07	1.2
Wang et al. (1997)	22.4	0.2	1	20	$1.25 \cdot 10^{-3}$	0.005	2

To interpret the permeability measurements, each point on this Figure corresponds to a map of the damage tensor $\underline{\underline{\omega}}$, which is used to compute a global permeability ($K = \int_S K_{zz}(\underline{\underline{\omega}}) dS$) that is compared to the experimental data. The damage-permeability relationship parameters κ_t and γ_t (see Table 5.1) are fitted to experimental results as shown in Figure 5.4. As can be seen, a good agreement between theoretical predictions

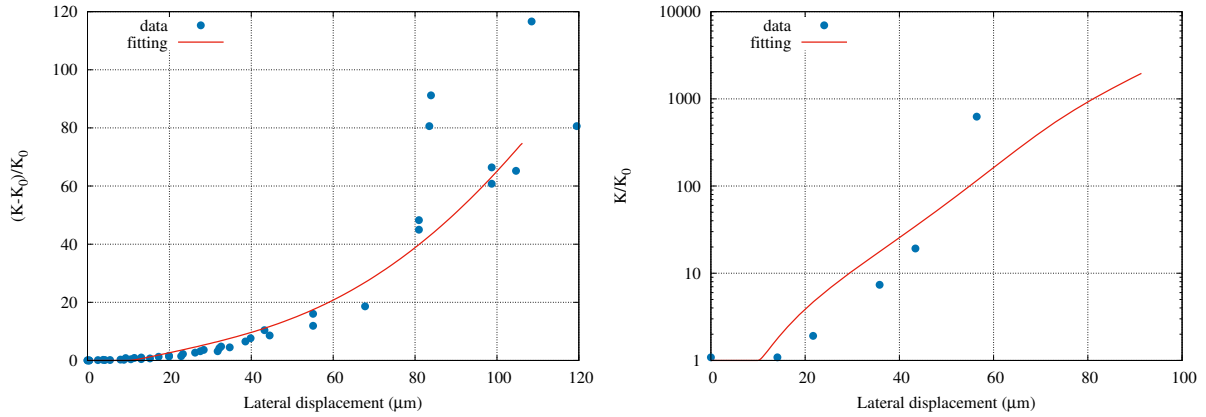


FIGURE 5.4 – Permeability change as a function of the lateral displacement in the gas (left) and water (right) measured permeability test.

and experimental data is observed for both the mechanical and hydraulic results. Therefore, the damage-permeability relationship presented in this paper explains well the increase of permeability due to material cracking and can be used to simulate more complex tests with complete hydromechanical coupling. Of course, only the analytic function is retained for the COx claystone; the parameters κ_t and γ_t should be adapted when needed.

5.3.2 Permeability change in compressive regime : simulation of triaxial compression tests with gas injection

Similar to the previous section, the viscoplastic model is isolated here to study the compressive loading regime. The mechanical behavior is restricted to $\underline{\underline{\hat{\sigma}}} = \underline{\underline{H}} : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}_{vp})$ with a constant Hooke's tensor $\underline{\underline{H}}$ ($\underline{\underline{\omega}} = \underline{\underline{1}}$), and the permeability alteration is reduced to $\underline{\underline{K}} = k_c(\varepsilon_{vp}) \underline{\underline{K}}_0$.

The triaxial compression tests with gas injection conducted by Zhang (2016) are considered. Since gas pressures in those experiments (an upstream pressure $P_1 = 0.2$ MPa and a downstream pressure $P_2 = P_0 \simeq 0.1$ MPa) were too small compared to confining pressures (P ranging from 1 to 10 MPa), the mechanical parameters (see Table 5.2) are directly fitted to the strain-stress data as shown in Figure 5.5. As it can be seen, the main features of the COx claystone behavior are successfully reproduced : the pre-peak hardening and contractancy and the post-peak softening and dilatancy.

The parameters of the strain-permeability relationship are fitted to the experimental data as presented in Figure 5.6. The proposed relationship can reproduce the main features of the permeability alteration especially for the low confining pressures. The permeability

TABLE 5.2 – Elastic and viscoplastic model parameters used for the triaxial compression tests (P : confining pressure in MPa).

E (MPa)	ν	A (d ⁻¹)	n	F_0 (MPa)	m	α	ξ_p	ξ_r
5600	0.2	10^{-11}	6	0.1	0.3	0.28	$0.001(P + 1)$	$\xi_p + 0.007$

β_0	β_p	β_r	R_0 (MPa)	R_p (MPa)	R_r (MPa)	χ_1	χ_2	κ_c	γ_c
-0.1	0	0.35	0	12.75	2.4	0	0	10^{13}	3

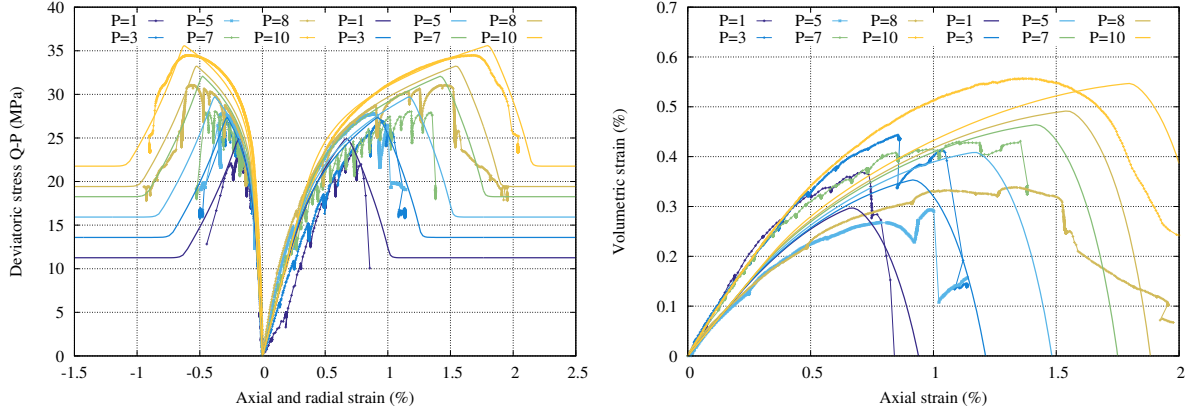


FIGURE 5.5 – Numerical simulation results (solid lines) compared to the experimental data (lines with points) of the mechanical response of six triaxial compression tests : deviatoric stress function of axial and radial strain (left) and volumetric strain function of axial strain (right).

is nearly insensitive when the material is contractant ($\beta \leq 0$ when $0 \leq \xi \leq \xi_p$), and increases drastically at failure as the material becomes dilatant ($\beta > 0$ when $\xi > \xi_p$).

5.4 Application 1 : drift excavations in Callovo Oxfordian claystone

As explained in the introduction, the field observations around drifts from the M/HM URL showed a significant increase of the permeability in the EDZs. Important dissymmetries were also noticed for permeabilities, EDZ shapes, pore pressures, and drift convergence measurements ; these observations were found to differ from one drift direction to another. For the drifts along the direction of the horizontal minor stress σ_h , which is nearly equal to the vertical stress σ_v ($\sigma_h \simeq \sigma_v \simeq 12$ MPa according to [Wileveau et al. \(2007\)](#)), the EDZs are extended vertically, and the vertical convergence is approximately 4 times larger than the horizontal convergence. Regarding the drifts along the direction of the horizontal major stress σ_H , which is approximately 30% larger than the two other components ($\sigma_H \simeq 16$ MPa according to [Wileveau et al. \(2007\)](#)), the EDZs are extended horizontally, and the horizontal convergence is approximately 2 times larger than the vertical convergence. In what follows, field data concern two particular drifts ; the first drift, named GCS, is parallel to σ_H and has a circular section with a radius of 2.6 m, and the second drift, named GED, is parallel to σ_h and has a horse-shoe section with an average radius of

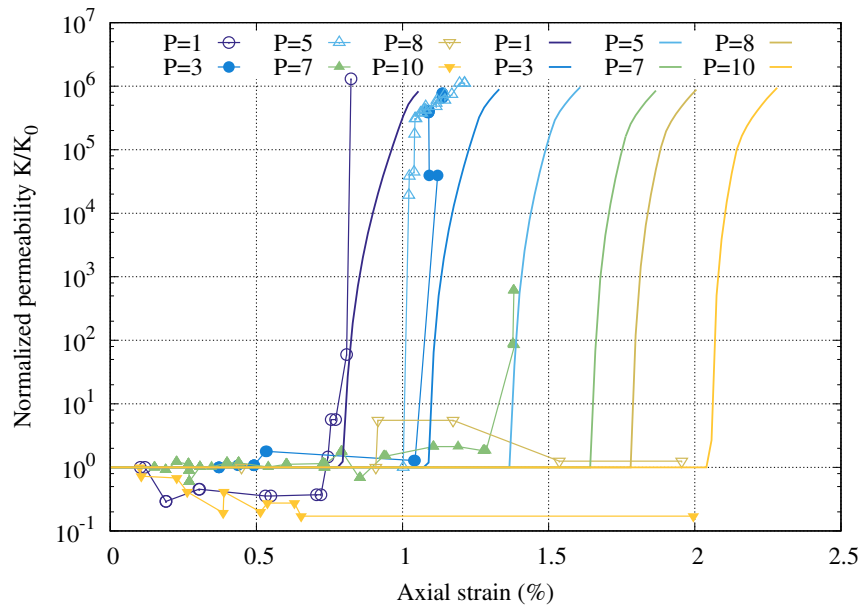


FIGURE 5.6 – Fitting of the strain-permeability relationship to the experimental data.

2.3 m.

Numerical simulations are conducted using a 2D plane strain configuration where, for simplicity, the cross section is supposed circular in the two drift directions, with radii of 2.6 m for GCS and 2.3 m for GED. The normal stress is set to $\underline{\sigma} \cdot \vec{n} = \lambda \underline{\sigma}_0 \cdot \vec{n}$, where $\underline{\sigma}_0 = -\text{diag}(\sigma_h, \sigma_H, \sigma_v)$ is the initial stress tensor, \vec{n} is the normal to the drift wall, and λ is a deconfining function that decreases in a non-linear manner from 1 to 0 over a period of 30 days and remains zero after the excavation period (see Figure 5.7). Similar to the *in situ* set up, the convergence measurements are supposed to start at a time t_0 fixed to 15 days in this work (which corresponds to the excavation front passage). Concerning the hydraulic part, the material is supposed to remain water-saturated during all the simulation time and the liquid pressure at the drift wall is reduced from the *in situ* pressure (4.7 MPa) to atmospheric pressure (0.1 MPa) as represented in Figure 5.7.

In these computations, the material constants are directly identified using the field measurements (convergence and permeability). The obtained model parameters are presented in Table 5.3, and the numerical simulation results of convergence measurements are compared to experimental data as shown in Figure 5.8. The predicted values of the convergence measurements are in good agreement with the experimental data for the two drift directions ($//\sigma_h$ and $//\sigma_H$). The difference between the parameters fitted to triaxial compression tests (Table 5.2) and adjusted to the convergence measurements can be explained by the different loading regimes involved in the two cases. For triaxial compression tests, the short-term behavior under compression conditions is involved, whereas, for drift excavations, it is rather the long-term extension behavior that is involved.

Regarding the hydraulic response, as represented in Figure 5.9, the parameters κ_c and γ_c are fitted to the field permeability measurements obtained by Armand et al. (2014). The difference between the laboratory experiment parameters (Table 5.2) and the *in situ*

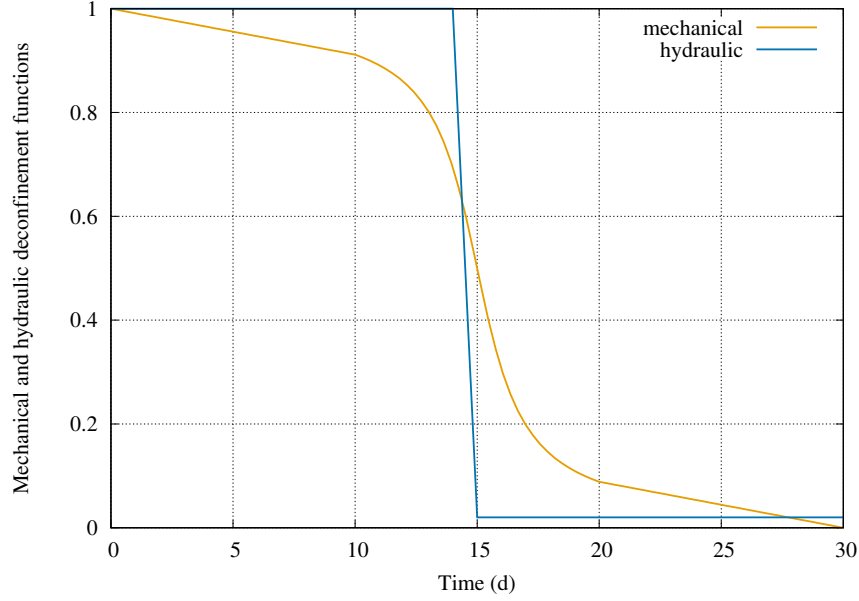


FIGURE 5.7 – Mechanical and hydraulic deconfining functions employed to simulate drifts excavations and based on *in situ* measurements (Seyedi et al., 2016).

TABLE 5.3 – Elastic and viscoplastic parameters of the complete model used in drifts excavations computations.

$E(\text{MPa})$	$E'(\text{MPa})$	ν	ν'	$G(\text{MPa})$	$\bar{E}(\text{MPa})$	$\bar{\nu}$	$A(\text{d}^{-1})$	n	$F_0(\text{MPa})$		
6000	4000	0.2	0.2	2083.33	4000	0.2	2.10^{-13}	6	0.1		
m	α	ξ_p	ξ_r	$R(\text{MPa})$	β	χ_1	χ_2	b	$K_0(\text{m}^2)$	κ_c	γ_c
1	0	0	0	8.5	0.39	0	0	0.6	2.10^{-20}	10^{11}	3
		$v_d(\text{d}^{-1})$	n_d	$R_d(\text{MPa})$	κ_t	γ_t					
		10^{-3}	1	$5.58 \cdot 10^{-4}$	10^{-2}	2					

fitting (κ_c is divided by 100) could be explained by two reasons. First, the drastic increase of the sample volume due to brittle failure in the compression tests makes it difficult to follow the evolution of the permeability, which increases by several orders of magnitude in a very short time. Second, the loading regime is different between the laboratory tests and drift excavations. More convenient experiments are needed to better characterize the relation between the permeability and the material dilatancy, particularly in the extension regime.

To study the time effect on the EDZ hydraulic properties, the permeability evolutions at the ceiling and side wall of the two drift are represented in Figure 5.10. The permeability increases dramatically during the excavation process and stabilizes rapidly afterwards. This aspect is clarified further in Figures 5.11, in which both evolution in time and space are presented. It is clear that the disturbed areas around the drifts have the same shape as the *in situ* observations (Armand et al., 2013, 2014) : the EDZ is extended vertically

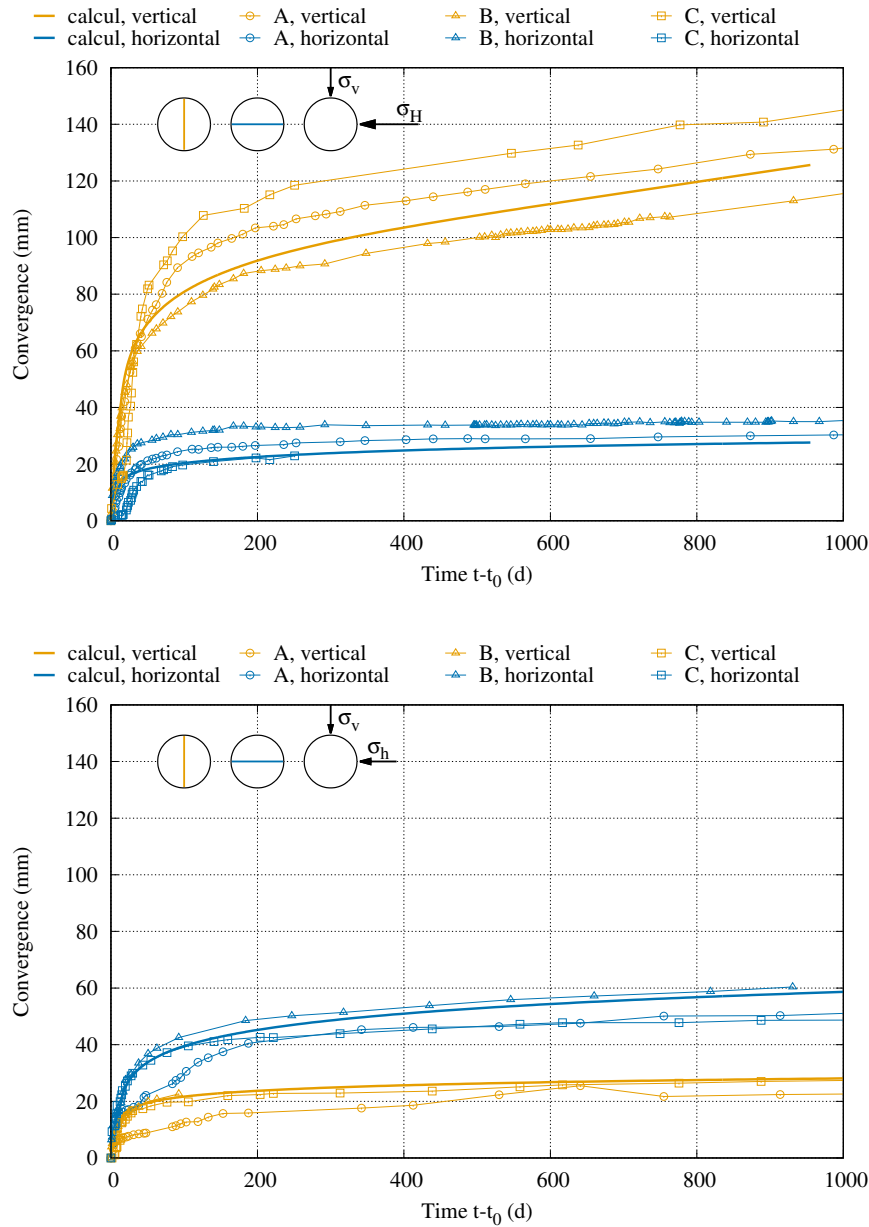


FIGURE 5.8 – Vertical and horizontal convergence measurements for the two drifts parallel to σ_h (top) and σ_H (bottom) compared to data from three sections A, B and C of each drift.

in the direction $//\sigma_h$ and horizontally in the direction $//\sigma_H$.

The change of the material properties in the EDZ has a direct impact on the pore pressure around the drifts, as illustrated in Figure 5.12 that shows the liquid pressure evolution horizontally and vertically for the case of the GCS drift. Figure 5.13 presents a comparison between numerical simulation and experimental data of pore pressure at different points around the drift. The numerical simulations provide a good representation of the overall change of this quantity when compared to the experimental measurements presented by Seyedi et al. (2016). Inside the EDZ, the pore pressure is nearly constant and equals

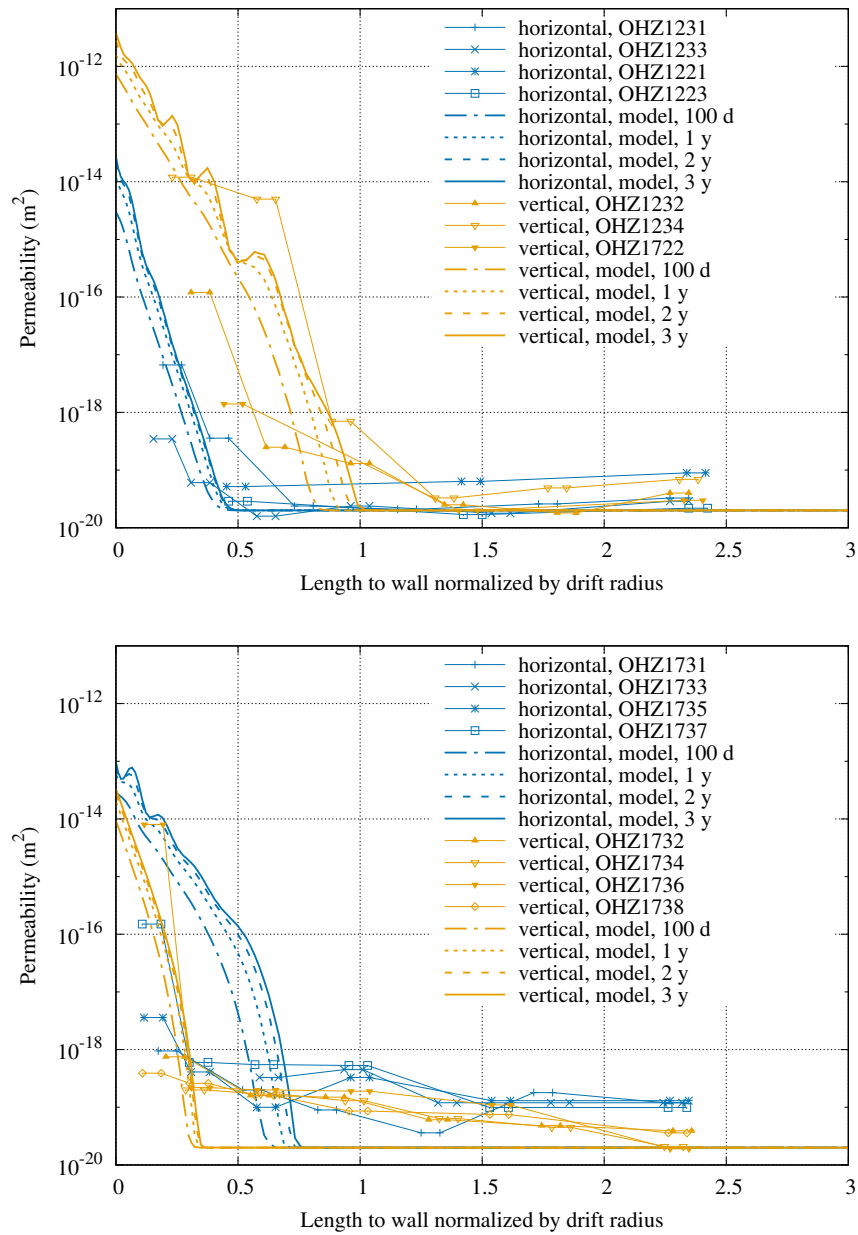


FIGURE 5.9 – Evolution of permeability parallel to σ_h (top) and to σ_H (bottom).

the atmospheric pressure ; and beyond the EDZ, an overpressure is observed horizontally, whereas pressure is decreased vertically. Moreover, a pressure decay with time is observed in both directions. In spite of these interesting insights, the numerical calculations failed, however, to provide a good representation of the extend of the damaged zone. It seems that the mechanical parameters fitted to the convergence data may involve some surface phenomena and thus are not representative of the EDZ behavior. Other simulations have to be conducted, in future works, using new parameter fittings on other experimental data such as the radial displacement measurements presented by [Armand et al. \(2013\)](#). Furthermore, an improvement of the results may be possible if the permeability increase is assumed to occur perpendicular to the shear direction (see, for example, [Rutqvist \(2015\)](#); [Vilarrasa et al. \(2011\)](#)) instead of an isotropic increase.

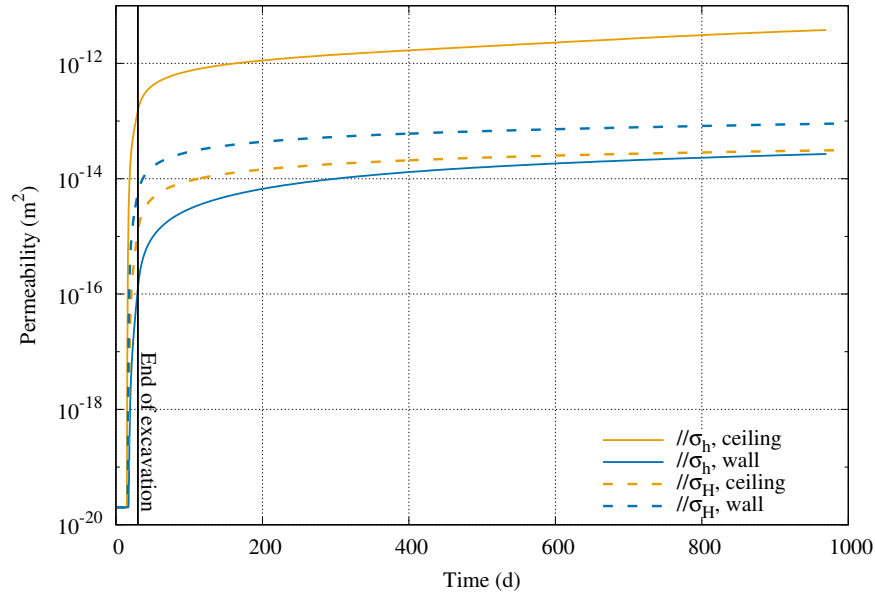


FIGURE 5.10 – Permeability at the ceiling and the side wall function of time.

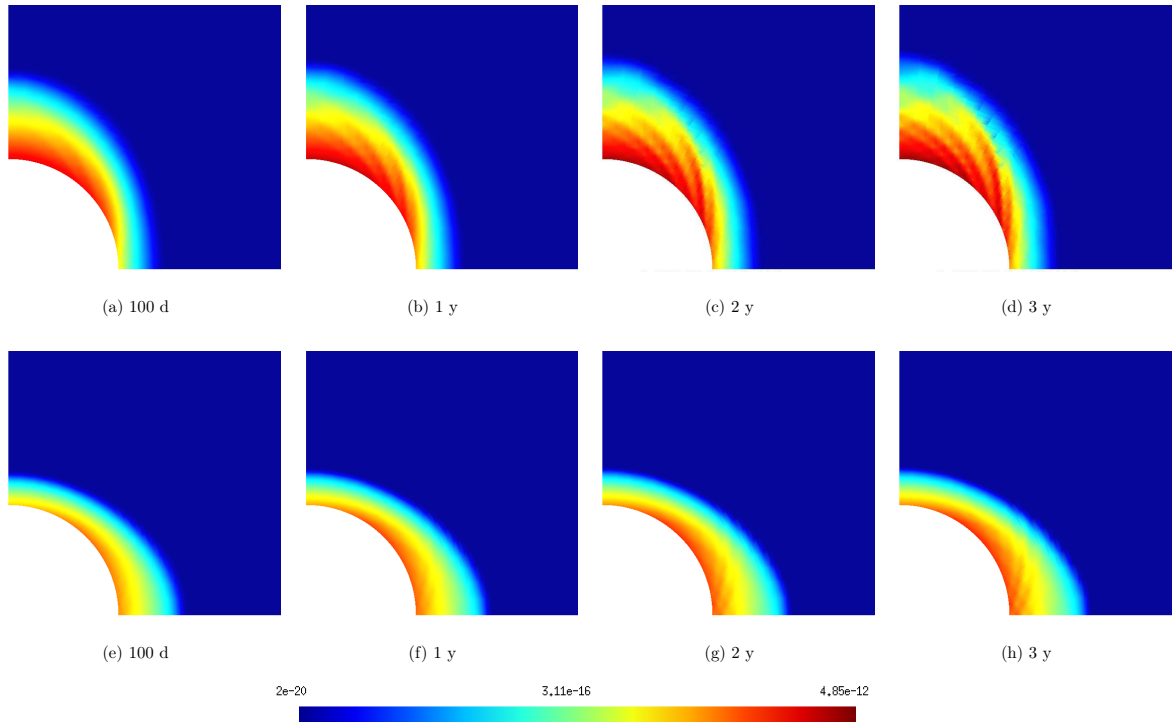


FIGURE 5.11 – Permeability $// \sigma_h$ (a to d) and $// \sigma_H$ (e to h).

Remark : The non-zero initial effective stress $\hat{\underline{\sigma}}_0 = \underline{\underline{\sigma}}_0 + b p_0$ is considered here by assuming the material to be initially elastic and undisturbed ($\underline{\underline{\omega}} = \underline{\underline{1}}$ and $\underline{\underline{\varepsilon}}_{vp} = \underline{\underline{0}}$). Thus, the mechanical behavior law (5.2.7) leads to an initial strain $\underline{\underline{\varepsilon}}_0 = \underline{\underline{H}}^{-1}(\underline{\underline{1}}) : \hat{\underline{\underline{\sigma}}}_0$.

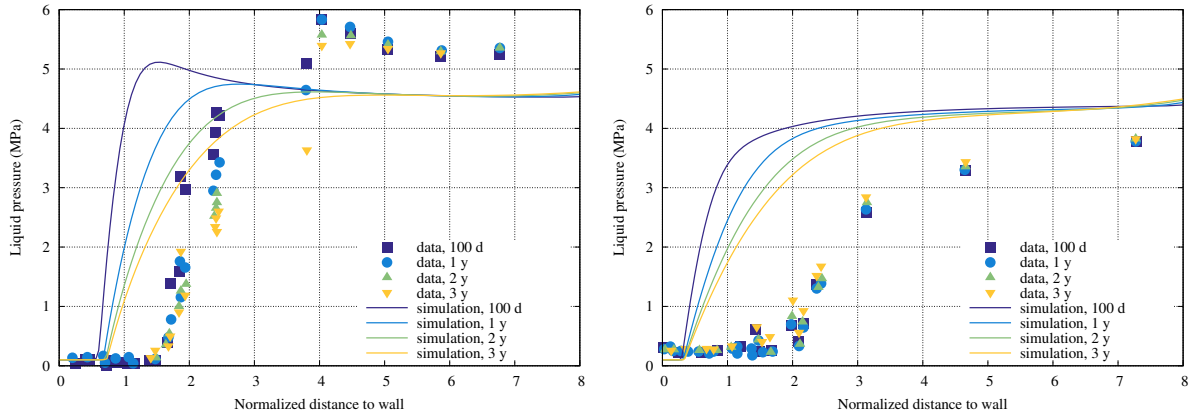


FIGURE 5.12 – Numerical results and experimental measurements of pore pressure around the GCS drift : horizontally (left) and vertically (right).

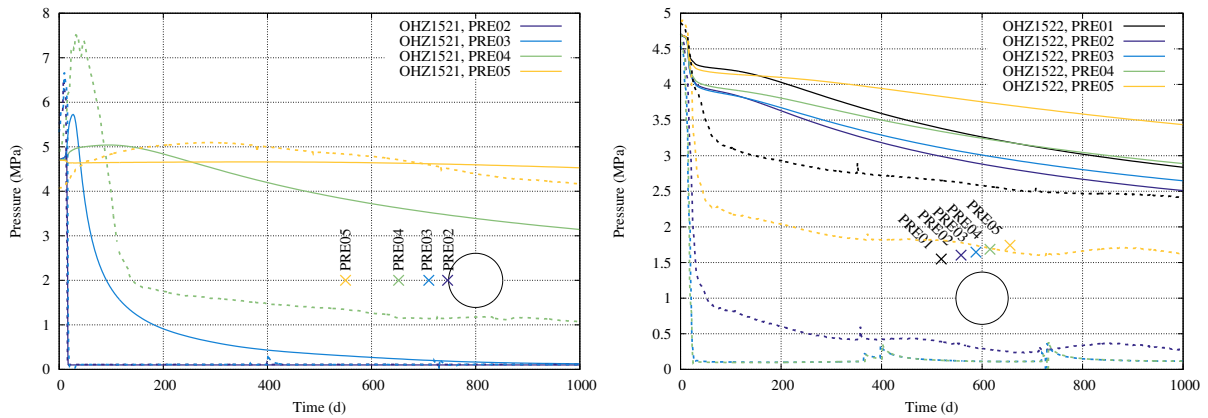


FIGURE 5.13 – Numerical results (solid lines) and experimental measurements (dashed lines) of pore pressure evolution at different points.

5.5 Application 2 : study of tensile damage due to hydrogen injection in COx claystone

To show the model capacities to describe the hydromechanical behavior under tensile regime, the problem of hydrogen production, due to radioactive waste containers corrosion or water radiolysis, and its migration through the host rock is considered (see, for example, the works [Bonin et al. \(2000\)](#); [Dridi \(2005\)](#); [Boulin \(2008\)](#); [de La Vaissière et al. \(2015\)](#)). Since the aim of this section is to study the impact of an increasing pore pressure on the mechanical tensile damage, several simplifications are assumed such that the hypothesis of a 1D problem applies.

The chemical kinetics of the corrosion reactions as well as the behavior of a hypothetical engineered clay barriers are not studied in this paper. For the considered repository project, hydrogen production may occur (with different rates) for both medium and high level radioactive wastes, which are intended to be stored in drifts with different dimensions. In this paper, for the sake of generality, hydrogen flow rate going into the natural barrier (COx claystone) is considered as an entry of the numerical simulations, and drift radius is kept the same as the previous section (2.6 m). Gas is injected at the wall of a

drift with an imposed flow rate that increases from zero to φ in a period of 1 year, and then remains constant. At the beginning of the hydrogen injection process, the host rock is assumed to be isotropic, undisturbed and water-saturated. The initial stress is assumed isotropic and homogeneous such that $\underline{\underline{\sigma}}_0 = \sigma_0 \underline{\underline{1}}$ and $\sigma_0 = -12$ MPa, and the liquid initial pressure p_0 is set to 4.7 MPa. During all the test, the total stress at the wall is maintained constant and equal to its initial value (a fixed displacement condition was also tested and results are found to be nearly insensitive). As a consequence of these hypotheses, this problem could be examined in 1D axisymmetric conditions. For the numerical simulations, the software Code-Aster (www.code-aster.com) is employed. It is needless to say that, due to the diverse simplifications, these computations have a qualitative aspect that should be refined further, in future works, with more realistic assumptions.

In these calculations, water is assumed to be present only in the liquid phase (λ) (no evaporation), and hydrogen (h), which is assumed to be the only component of the gaseous phase (γ), is allowed to dissolve and diffuse into the liquid phase according to the Henry's and Fick's laws, respectively, as defined in Code-Aster manual (Code-Aster, 2015). Henry's constant is denoted by K_H and hydrogen diffusivity in water is denoted by $F_{h\lambda}$. The capillary curve and the relative permeabilities are defined using the Mualem-Van Genuchten model (Van Genuchten, 1980; Mualem, 1978) as follows :

$$\tilde{S}_\lambda = \left(1 + \left(\frac{p_c}{P_r} \right)^{\frac{1}{1-\ell}} \right)^{-\ell} \quad (5.5.1)$$

$$k_\lambda = \sqrt{\tilde{S}_\lambda} \left(1 - (1 - \tilde{S}_\lambda^{(1/\ell)})^\ell \right)^2 ; \quad k_\gamma = \sqrt{1 - \tilde{S}_\lambda} \left(1 - \tilde{S}_\lambda^{(1/\ell)} \right)^{2\ell}$$

where $p_c = p_\gamma - p_\lambda$ is the capillary pressure, $\tilde{S}_\lambda = \frac{S_\lambda - S_{\lambda r}}{S_{\lambda s} - S_{\lambda r}}$ is an effective degree of saturation, the model parameters $S_{\lambda r}$ and $S_{\lambda s}$ represent a residual and maximum saturation values, respectively, ($S_\lambda \in [S_{\lambda r}, S_{\lambda s}]$), and ℓ and P_r are model parameters. Finally, pore pressure (used in equation 5.2.6) is defined with respect to Coussy's formulation (Coussy, 1991) such that $\dot{p} = \dot{p}_\gamma - S_\lambda \dot{p}_c$.

Table 5.4 summarizes the material constants used in these calculations in which η_λ and η_γ are the dynamic viscosities of liquid and gas phases, respectively. The chosen hydraulic parameters are rather pessimistic ; the initial intrinsic permeability is lower than the measurements obtained for this material (approximately 10^{-20} m² in Andra's report ANDRA (2012)) and the gas viscosity is the double of the measured hydrogen viscosity (which is equivalent to divide the relative permeability to gas by 2). This choice implies very small fluid velocities and by consequence cause a rapid increase in the pore pressure leading to tensile mechanical failure. Regarding the mechanical parameters, R_d is fixed based on a tensile strength $R_t = 2.5$ MPa which is a reasonable value for the COx (ANDRA, 2012, pp 145-147), whereas n_d and v_d are chosen in such a way to avoid brittle failure which may cause numerical convergence issues. Finally, permeability evolution parameters, κ_t and γ_t , are fixed within the range of the fitted parameters to concretes (Table 5.1).

Several computations were conducted using different values of the imposed flow rate φ ranging from 1 to 20 mg/d/m² with the aim of finding a yield value, which indicates the activation of the tensile damage within 10000 years. The numerical calculations showed that the elastic yield is exceeded only in the radial direction, whereas damage is not activated in the axial and tangential directions. Figure 5.14(left) shows the obtained

results of the radial effective stress evolution at the drift wall for different values of the imposed flow rate. The results of the damage model are superposed with those obtained using an elastic material to visualize the damage initiation time. As expected, the time to reach the tensile yield is inversely proportional to the applied flow rate which is more clear in Figure 5.14(right).

TABLE 5.4 – Hydromechanical model parameters used for the hydrogen injection problem, where the material is assumed isotropic.

$E(\text{MPa})$	ν	$v_d(\text{d}^{-1})$	n_d	$R_d(\text{MPa})$	b	$K_0(\text{m}^2)$	κ_t	γ_t	$P_r(\text{MPa})$
5600	0.2	10^{-3}	1	$5.58 \cdot 10^{-4}$	0.6	10^{-22}	10^{-2}	2	15
ℓ	$S_{\lambda r}$	$S_{\lambda s}$	$K_H(\text{MPa}\cdot\text{m}^3/\text{mol})$	$F_{h\lambda}(\text{m}^2/\text{s})$	$\eta_\lambda(\text{Pa}\cdot\text{s})$	$\eta_\gamma(\text{Pa}\cdot\text{s})$			
0.328	0.15	1	0.127	$4.5 \cdot 10^{-10}$	10^{-3}	$1.66 \cdot 10^{-5}$			

As only the radial damage is activated ($\omega_{rr} > 1$ and $\omega_{\theta\theta} = \omega_{zz} = 1$), the damage permeability relationship (5.2.19) implies an increase of the permeability in the axial and tangential directions, whereas K_{rr} remains constant. Figure 5.15 illustrates the evolution of the radial damage (left) and the corresponding increase of the axial and tangential permeabilities (right) for a given flow rate ($\varphi = 20 \text{ mg/d/m}^2$). It follows that the tensile damage induced by the increasing pore pressure does not contribute to the radial flow. This situation is different from the case where an increasing mechanical pressure is applied at a borehole wall (with blasting, for example, Rouabhi et al. (2005)). In that case, it is rather the tangential damage component that is activated leading to an increase of the permeability in the radial and axial directions.

It was observed from the computations results that the extent of the damaged zone reaches a constant value at the end of each simulation as illustrated in Figure 5.16(left) and that this extent is proportional to the applied flow rate. Figure 5.16(right) illustrates this proportionality and shows a clear threshold value of the flow rate (approximately 4 mg/d/m^2) below which the hosting rock is not damaged. This threshold is greater than the estimated values based on a constant corrosion velocity $\varphi \simeq 2 \text{ mg/d/m}^2$ (as calculated by Bonin et al. (2000)) and largely greater than the flow rate of the hydrogen that crosses the engineered clay barrier and enters the COx claystone as obtained by Dridi (2005) ($\varphi \simeq 0.1 \text{ mg/d/m}^2$). One should, however, be cautious about these conclusions that may change when the drift radius is modified or another pore pressure formulation is employed. Furthermore, the dependency of the capillary curve on the mechanical damage was not considered in this work which may also has an important impact on the obtained results. These aspects should be studied further in future works.

To explain the observations about the damage extent, an in-depth analysis of the hydraulic results should be conducted. Figure 5.17(left) presents an example of the saturation evolution around the drift for $\varphi = 20 \text{ mg/d/m}^2$ and shows the progress of the gas front with time. Figure 5.17(right) presents the gas front position normalized by drift radius as a function of time normalized by the damage initiation time and shows that, when damage starts, gas is more spread into the rock for the small flow rates. In fact, as the flow rate decreases, hydrogen has more time to diffuse into the rock and by consequence its impact on the material integrity is less important.

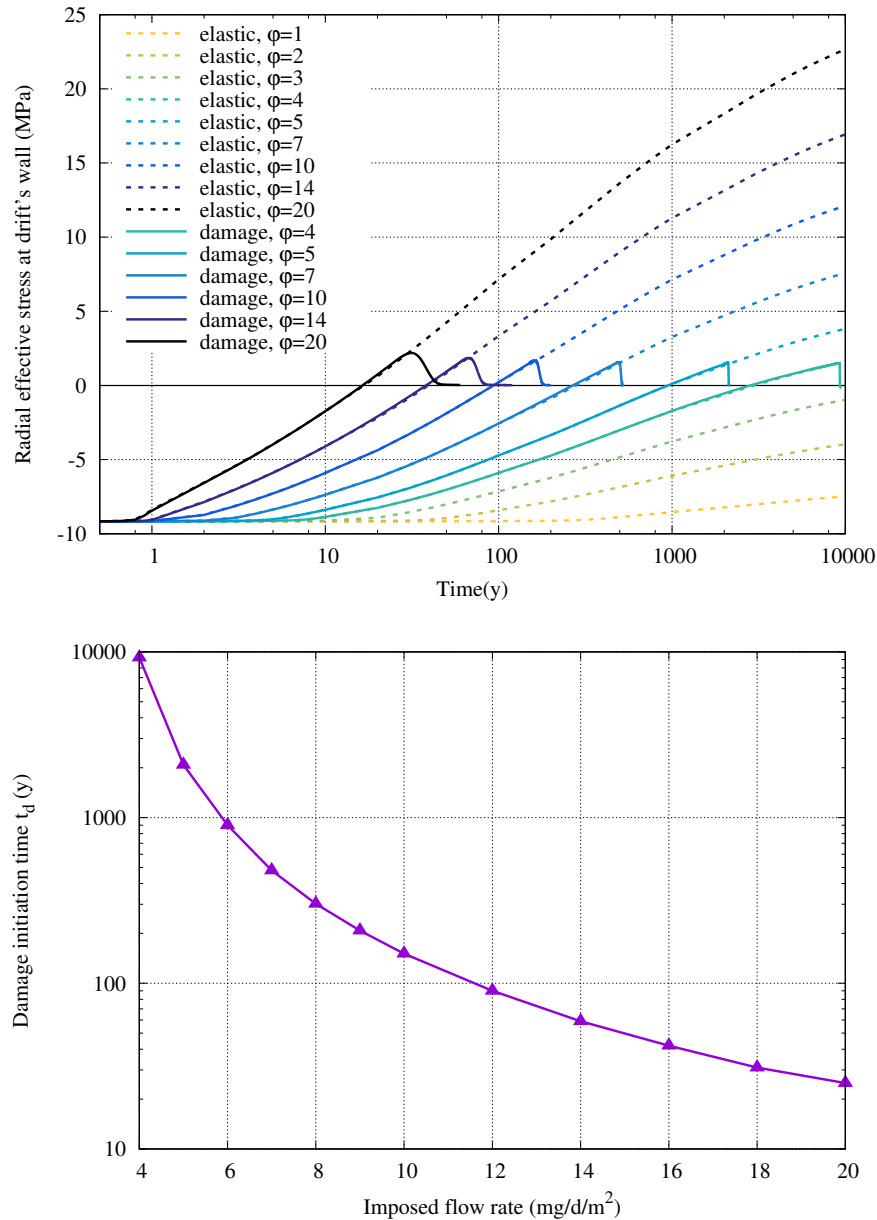


FIGURE 5.14 – (top) Evolution of the radial stress at the drift wall for different values of the imposed hydrogen flow rate using an elastic material (dashed lines) and the damage model (solid lines), and (bottom) damage initiation time function of the applied flow rate.

5.6 Conclusions

In this paper, a new hydromechanical model taking into consideration the material elastic and non-elastic anisotropies and the permeability alteration due to mechanical loadings was proposed to characterize the hydromechanical behavior of the Callovo-Oxfordian claystone. For the mechanical part, a damage model was considered in the tensile regime, and a viscoplastic model was considered in the compressive regime. As for the hydraulic part, a product law was proposed to describe the permeability increase due to crack opening in tension and dilatancy in compression.

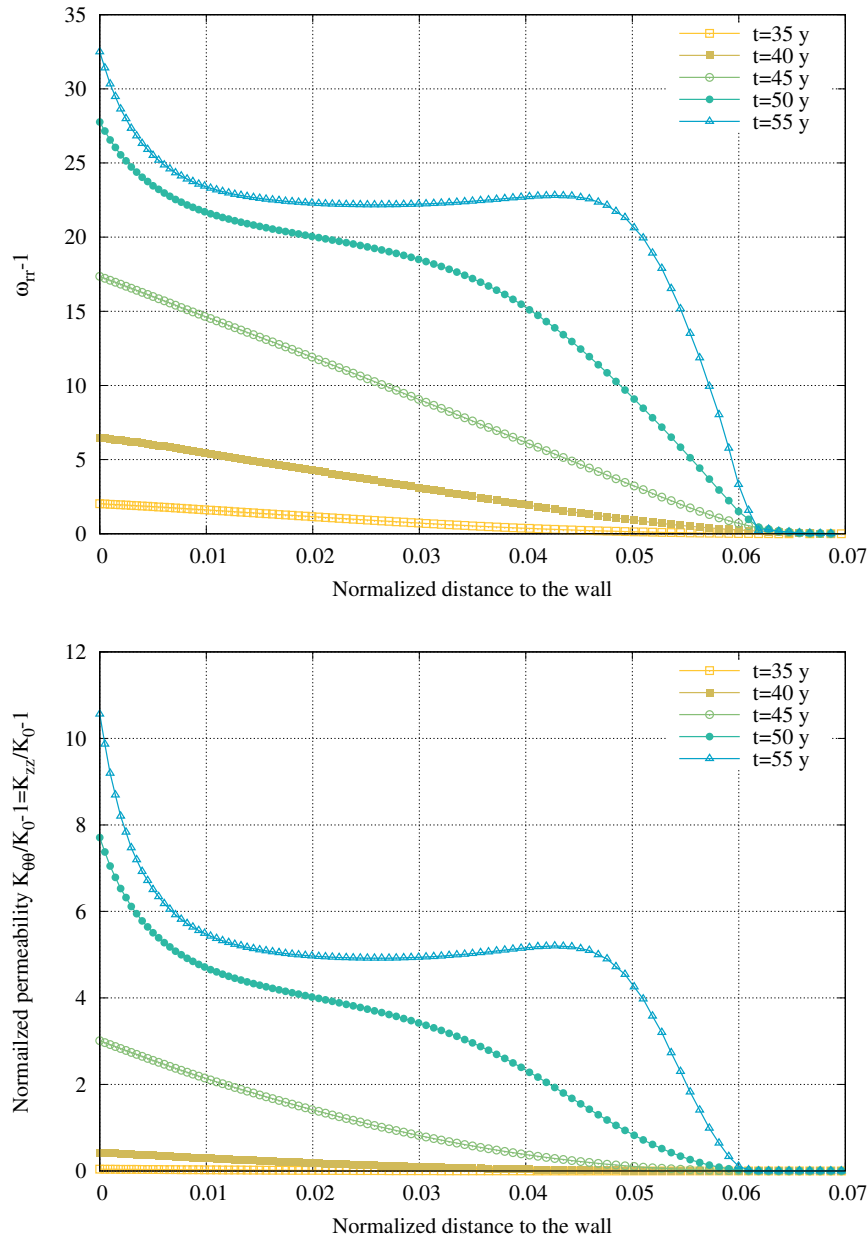


FIGURE 5.15 – Evolution of the radial damage $\omega_{rr} - 1$ (top), and the axial and tangential normalized permeabilities for $\varphi = 20 \text{ mg/d/m}^2$ (bottom).

This model was first validated on laboratory tests ; Brazilian tests with permeability measurements for the tensile behavior and triaxial compression tests with gas injection for the compressive behavior. The obtained results provided an estimation of the model parameters and showed a good agreement between the theoretical predictions and experimental data of the mechanical response and permeability evolution for both loading regimes.

Then, the proposed hydromechanical model was applied to an *in situ* problem which is the simulation of the drift excavations in the M/HM URL. The computed permeability alteration around the drifts was found to be in accordance with the *in situ* measurements. Its evolution in time is such that a dramatic increase occurs during the excavation opera-

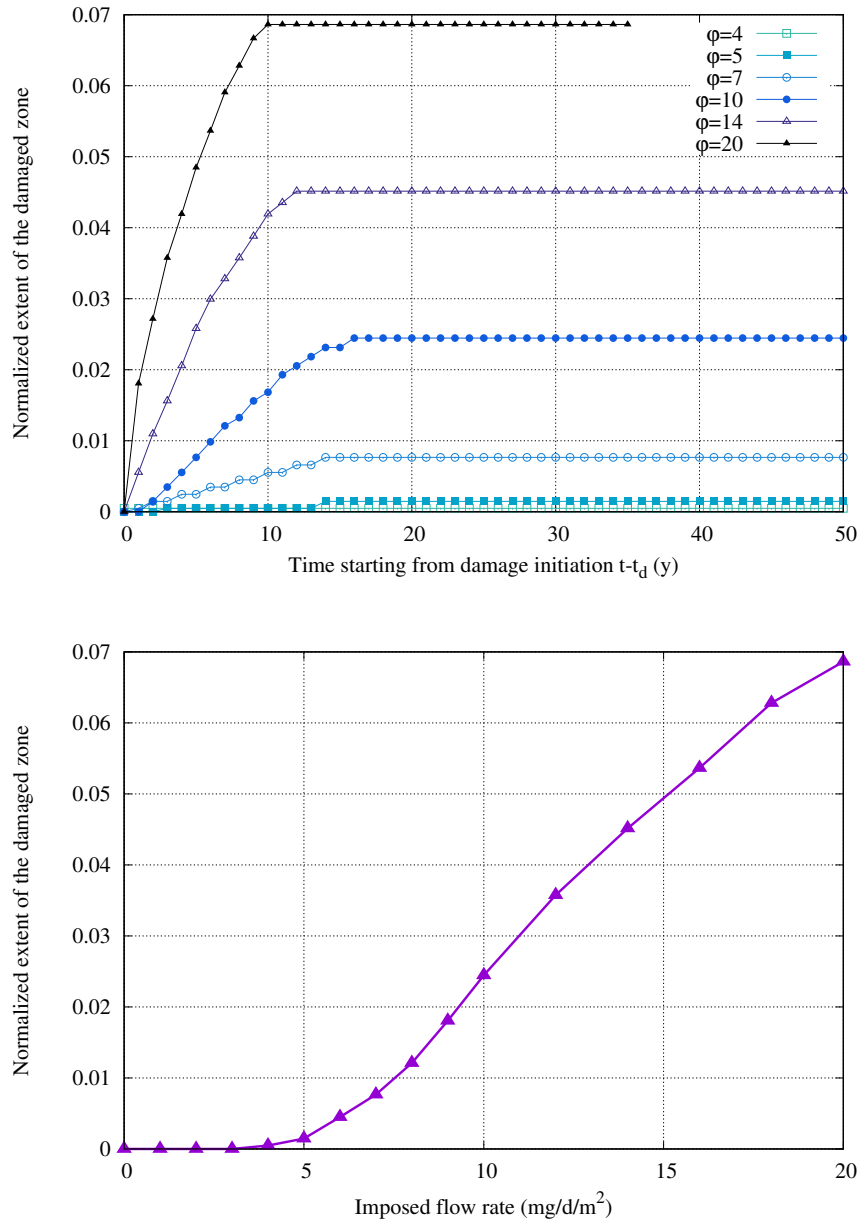


FIGURE 5.16 – Evolution of the extent of the damaged zone normalized by the drift radius starting from the damage initiation time for different values of the applied flow rate (top), and extent of the damaged zone at simulation end function of the applied flow rate (bottom).

tions while a quasi-stabilized level is rapidly reached afterwards. Moreover, the model was able to describe all the observed dissymmetries in the convergence measurements from two perpendicular drifts (σ_h and σ_H). Also, the main characteristics of the pore pressure around the drift parallel to σ_H were successfully reproduced, but these results still could be significantly improved.

Finally, the hydromechanical model was applied to the hydrogen migration problem in COx claystone. Numerical simulations were conducted in 1D axisymmetric conditions using

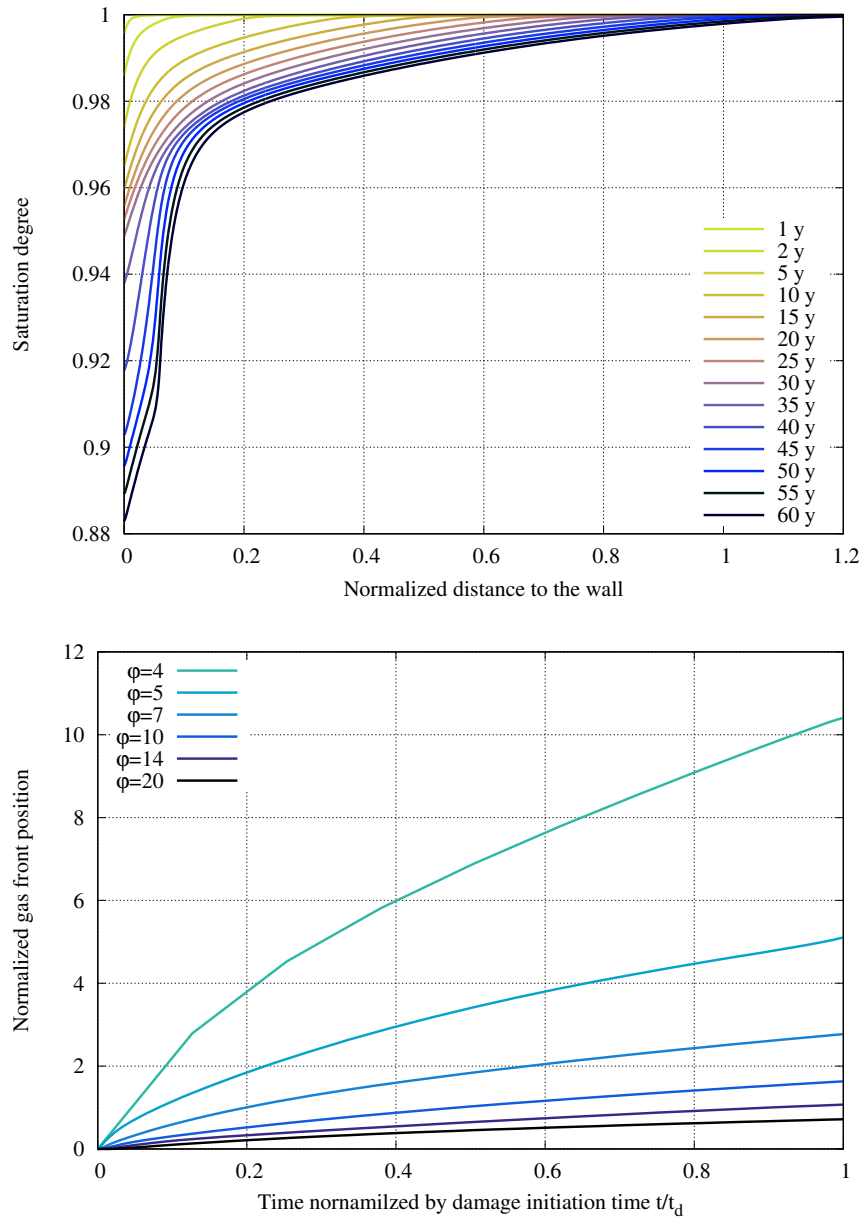


FIGURE 5.17 – Degree of saturation at different time steps for $\varphi = 20 \text{ mg/d/m}^2$ (top), and gas front position normalized by the drift radius function of time normalized by damage initiation time (bottom).

several imposed flow rates. These calculations showed the existence of a threshold flow rate beyond which no tensile damage occurs. Furthermore, it was found that the extent of the damaged zone is an increasing function of the applied flow rate; for small flow rates, the time to reach the elastic yield is too long which allows the gas to diffuse into the host rock and consequently reduce its impact on the material integrity. In the context of a nuclear waste repository, the estimated hydrogen production rates were found to be far below the threshold computed in this work. However, more numerical simulations using more realistic assumptions must be considered to confirm these conclusions.

In the future, further laboratory experiments have to be conducted to better calibrate the mechanical and hydraulic laws. Extension creep tests with different orientation angles may be used, for example, to characterize the long-term extension behavior in the drift excavation problem. Regarding the permeability alteration, more experiments are needed especially in the tensile regime.

Acknowledgement : The authors are grateful to Andra for providing the *in situ* data, convergence measurements and pore pressures, and for the interesting discussions.

Conclusions et perspectives

Dans cette thèse, un modèle de comportement hydromécanique a été développé et implémenté dans deux codes de calculs par éléments finis (Code-Aster et Viple3D). Il s'inscrit dans le cadre des milieux poreux continus et il prend en compte les anisotropies initiale et induite du matériau et l'altération de la perméabilité due à l'endommagement mécanique. Tout d'abord, le partitionnement des contraintes totales entre la matrice solide et les fluides interstitielles nous a permis de décrire la loi de comportement mécanique du solide indépendamment de l'écoulement hydraulique. Ensuite, pour pouvoir modéliser simultanément l'anisotropie initiale et l'anisotropie induite, une nouvelle approche de modélisation, qui consiste à transposer les lois de comportement des matériaux isotropes vers les matériaux isotropes transverses moyennant une équivalence énergétique, a été introduite. En particulier, cette approche a été utilisée pour construire une loi de comportement elasto-viscoplastique qui distingue les régimes de sollicitation de traction de ceux de compression. Cette loi de comportement mécanique a été ensuite complétée par une relation perméabilité-endommagement pour construire le modèle hydromécanique final. Cette relation traduit l'augmentation de la perméabilité par ouverture des fissures en traction et par dilatance en compression.

Le modèle a été appliqué pour l'étude des phénomènes hydromécaniques liés aux galeries souterraines dans l'argilite Callovo-Oxfordien de la région de Bure. Deux aspects ont été principalement étudiés : l'impact des surpressions dues à la production d'hydrogène gazeux par corrosion des parties métalliques des modules de déchets et l'altération des propriétés hydromécaniques autour des galeries et des alvéoles de stockage causée par les opérations de creusement. Afin de comprendre le processus de migration d'hydrogène dans l'argilite, des essais de laboratoire à l'échelle centimétrique ont été examinés et des simulations à l'échelle de l'ouvrage, qui consistent à injecter l'hydrogène sur les parois d'une galerie, ont été réalisées. La complexité des phénomènes hydromécaniques, en particulier celle de l'endommagement de la roche dû au passage du gaz, a été soulignée et les principales questions relatives à cette problématique ont été discutées. Pour expliquer les dissymétries dans les observations expérimentales autour des galeries souterraines de Bure, une série de simulations numériques, mécaniques et hydromécaniques, des opérations de creusement a été réalisée. L'approche de caractérisation des paramètres du matériau a consisté à partir du cas le plus simple d'un calcul mécanique avec un matériau isotrope vers le cas le plus complet d'un calcul hydromécanique avec un matériau anisotrope. Les capacités du modèle à reproduire les mesures de convergence, les formes des zones endommagées, l'évolution de la perméabilité et les pressions de pore ont été démontrées.

Même si ce travail a fourni d'importants renseignements sur le comportement hydromécanique des matériaux anisotropes, en général, et de l'argilite de Bure, en particulier, il reste

encore un certain nombre de questions à clarifier et de pistes d'amélioration à envisager.

En ce qui concerne l'implémentation dans des codes de calcul du modèle théorique construit dans le cadre de la présente thèse, il convient de signaler que :

(i) l'éventuelle "plasticité instantanée" n'est pas prise en compte car les résultats des essais de laboratoire dont nous disposons actuellement peuvent être interprétés correctement par un modèle rhéologique purement elasto-viscoplastique. Si on envisage l'introduction de la "plasticité instantanée", on aura, avant même l'aspect numérique, des difficultés théoriques concernant toutes les lois de comportement de décomposition additive (la loi de partition des déformations, la loi de partition des contraintes...) et multiplicatives (endommagement instantané et différé, influence de l'anisotropie et des endommagements sur les termes d'élasticité et de perméabilité...).

(ii) le modèle complet est formulé dans le cas des transformations infinitésimales de la phase solide : toutes les équations de bilan sont écrites dans la géométrie initiale et dans les lois de comportement on suppose que le gradient $\underline{\underline{F}}$ de la transformation est voisin de $\underline{\underline{1}}$ et donc, en particulier, les variables tensorielles qui caractérisent l'anisotropie matérielle (initiale et induite) ne sont pas actualisées en fonction de $\underline{\underline{F}}$ comme exigé par le principe de l'objectivité. Les modélisations que nous avons réalisées ne nous ont pas montré de forts gradients $\underline{\underline{F}}$ mais le cas échéant le modèle proposé peut parfaitement être généralisé au cas de transformations finies.

D'un point de vue expérimentation, quoique la base de données expérimentales dans la littérature soit assez riche, le besoin de plus d'expériences, que ce soit pour valider le modèle ou pour mieux caractériser le matériau étudié, a été relevé. En premier lieu, la caractérisation de l'anisotropie des paramètres élastiques et non élastiques pour l'argilite de Bure, via des essais de compression triaxiale et des essais brésiliens avec plusieurs orientations, est nécessaire. En deuxième lieu, sachant que le régime de sollicitation autour des galeries est principalement un régime d'extension, des essais de fluage en extension, idéalement avec différentes schistosités, peuvent donner d'importantes informations sur le comportement à long terme de l'argilite. Enfin, la description de l'évolution de la perméabilité en fonction de l'endommagement mécanique, surtout en traction, nécessite aussi un effort expérimental. Par exemple, des essais similaires à ceux des travaux de [Rastiello \(2013\)](#), qui mesure la perméabilité sur des essais brésiliens pour des bétons, peuvent être envisagés.

Du point de vue de l'application, trois points méritent de plus amples réflexions. Premièrement, en ce qui concerne l'interprétation des essais d'injection de gaz dans l'argilite, les conclusions des différentes simulations réalisées doivent être capitalisées pour construire un modèle de comportement qui prend en compte l'endommagement de la roche dû à l'injection du gaz et son effet sur les propriétés de transfert. Ce modèle doit servir à simuler la totalité des essais d'injection et la migration de l'hydrogène à l'échelle de l'ouvrage. Deuxièmement, pour les simulations mécaniques du problème de creusement des galeries, une question est restée en suspens : pourquoi ne trouve-t-on pas les mêmes paramètres du matériau par calage sur les essais de laboratoire ou sur les mesures *in-situ* ? Les explications fondées sur le type de sollicitation (compression/extension), le temps caractéristique des phénomènes (court terme/long terme) ou les effets d'échelle ne sont pas assez convaincantes. Finalement, par rapport aux simulations hydromécaniques du creusement des galeries, une importante marge d'amélioration des résultats des pressions de pore est

encore possible. La différence entre les résultats du modèle et les mesures peut être expliquée par une insuffisance dans la caractérisation des zones endommagées probablement due au fait que les paramètres mécaniques sont calés sur les mesures de convergence qui peuvent être influencées par des phénomènes de surface. L'ajout de mesures d'extensions (dans des petits forages avec diverses orientations) apporterait des informations utiles pour la validation de tout modèle.

Annexe A

Cohérence thermodynamique entre les lois d'état et les équations d'équilibre aux interfaces

Dans les problèmes d'écoulements multiphasiques dans un milieu poreux, la formulation théorique est souvent basée sur des écritures usuelles des lois d'état et des lois d'équilibre macroscopiques entre les différentes phases tandis que la validité de ces lois et leur inter-compatibilité ne sont pas forcément vérifiées. L'objectif de cette annexe est de présenter une formulation thermodynamique cohérente pour la définition et l'utilisation de ces lois. Tout d'abord, les lois thermodynamiques nécessaires sont définies dans le cadre d'une phase fluide homogène constituée de plusieurs espèces chimiques. En particulier, la construction d'une fonction thermodynamique à partir des lois d'état déterminées expérimentalement est expliquée pour le cas d'une phase pure (un seul constituant). Ensuite, les notions définies pour une phase monoconstituant sont étendues aux phases multiconstituants via une loi de mélange. Après, l'équilibre chimique au niveau de l'interface entre deux phases est défini. Enfin, le cas particulier d'un système liquide-gaz composé de deux constituants, hydrogène+eau, dans un milieu poreux est traité en guise d'application de la démarche décrite auparavant.

A.1 Définitions thermodynamiques

Afin de décrire l'état thermodynamique d'une phase fluide composée de plusieurs constituants k , la détermination, à tout instant, de toutes les variables d'état est nécessaire. Grâce aux principes de la thermodynamique, ce problème est réduit à la définition d'un nombre fini de variables d'état indépendantes dites variables primaires; les autres variables d'état (secondaires) pouvant être déterminées par des relations de dépendance (lois d'état). Par exemple, si la pression de la phase p , sa température T et les masses de chaque constituant m_k sont choisies comme variables primaires, les autres variables peuvent être retrouvées en définissant l'enthalpie libre G du système. Étant donnée la relation d'Euler : $G = \sum_k m_k \mu_k$ où μ_k représente le potentiel chimique du constituant k et la relation de Gibbs : $dG = V dp - S dT + \sum_k \mu_k dm_k$ où S est l'entropie du système, les lois d'état peuvent être définies par $V = \partial_p G$, $S = \partial_T G$ et $\mu_k = \partial_{m_k} G$ où V est le volume et S est l'entropie.

En pratique, puisqu'il est souvent plus aisé de travailler avec des quantités spécifiques (par unité de masse $m = \sum_k m_k$), on définit les concentrations $c_k = m_k/m$, l'enthalpie libre spécifique $g = G/m$, le volume massique $\nu = V/m$ et l'entropie spécifique $s = S/m$. Les relations définies précédemment prennent alors la forme suivante :

$$\begin{aligned} \text{Relation d'Euler : } & g = \sum_k c_k \mu_k \\ \text{Relation de Gibbs : } & dg = \nu dp - s dT + \sum_k \mu_k dc_k \\ \text{Lois d'état : } & \nu = \partial_p g, \quad s = \partial_T g \quad \text{et} \quad \mu_k = g + (1 - c_k) \partial_{c_k} g \end{aligned} \tag{A.1.1}$$

Les propriétés thermodynamiques nous montrent que toutes les propriétés thermodynamiques d'équilibre dérivent de la seule connaissance du potentiel thermodynamique g . Dans ce qui suit, une méthode de détermination de l'enthalpie libre spécifique g à partir des lois d'état est expliquée.

A.2 Construction de l'enthalpie libre spécifique pour le cas de référence d'un mélange de gaz parfait

Commençons tout d'abord par traiter le cas d'une phase fluide pure. Dans des conditions isothermes, la relation de Gibbs se réduit à $dg = \nu dp$, il suffit donc de déterminer l'expression de $\nu(p, T)$ pour remonter directement à la fonction g :

$$g(p, T) = g(p_0, T) + \int_{p_0}^p \nu(x, T) dx \tag{A.2.1}$$

où p_0 est une pression de référence. Dans le cas d'un gaz parfait, la loi d'état peut être écrite sous la forme suivante :

$$p\nu = A(T) \tag{A.2.2}$$

où $A(T) = RT/M$, R est la constante universelle des gaz parfaits, $M = m/n$ est la masse molaire du gaz et n est la quantité de matière (en mole) de ce gaz. En utilisant l'expression (A.2.1), on peut écrire l'enthalpie libre spécifique comme suit :

$$g(p, T) = \bar{g}(p_0, T) + A \ln p \tag{A.2.3}$$

avec $\bar{g}(p_0, T) = g(p_0, T) - A \ln p_0$.

Dans le cas général d'une phase à plusieurs constituants, la détermination de la fonction g ou, de façon équivalente, des potentiels chimiques μ_k n'est pas évidente. La définition d'un mélange de gaz parfaits, tout comme la définition du concept d'un gaz parfait, permet de simplifier les calculs afin de fournir une expression des potentiels chimiques qui servira d'un état de référence pour les mélanges de gaz réels et pour les solutions liquides. Dans ce mélange on suppose qu'aucune interaction n'est possible entre les différents constituants de telle sorte que chaque constituant se comporte comme un gaz parfait qui occupe à lui seul tout le volume du mélange (loi de Dalton). Si on note par p_k la pression, dite partielle, et $\nu_k = m_k/V$ le volume massique d'un constituant k sous les conditions conceptuelles où il occupe seul tout le volume V , on peut utiliser l'équation (A.2.2) pour écrire $p_k \nu_k = A_k(T)$ (avec $A_k = RT/M_k$ et M_k la masse molaire de k), ce qui donne $p_k V = n_k RT$. Si, en plus,

on suppose que le mélange de ces gaz parfaits se comporte lui aussi comme un gaz parfait tel que $pV = nRT$ avec $n = \sum_k n_k$, on peut facilement déduire que la pression partielle est $p_k = x_k p$ où $x_k = n_k/n$ est la fraction molaire du constituant k dans le mélange.

Notons par G_k l'enthalpie libre et g_k l'enthalpie libre spécifique du système (conceptuel) où le constituant k occupe seul le volume V . L'additivité de la fonction d'état G , sous les hypothèses de la loi de Dalton, implique que $G = \sum_k G_k$ soit $g = \sum_k c_k g_k$. L'identification de cette fonction avec la relation d'Euler et l'utilisation de l'équation (A.2.1) nous donne alors l'expression suivante pour les potentiels chimiques :

$$\mu_k(p, T, \vec{c}) = g_k(p_k, T) = \bar{g}_k(p_0, T) + A_k \ln p_k \quad (\text{A.2.4})$$

Il est facile de vérifier que cette équation représente une généralisation de celle d'un gaz parfait pur (eq. (A.2.3)) : il suffit de choisir $x_k = 1$. Même si cette équation est obtenue grâce à plusieurs d'hypothèses simplificatrices, ce modèle représente un modèle de référence sur lequel sont basés les développements pour les mélanges de gaz réels et les solutions liquides. Tout fluide peut, en effet, être considéré comme un gaz parfait pour des pressions assez faibles. Pour les pressions élevées, les lois d'état et les potentiels chimiques peuvent être définies en introduisant des corrections empiriques par rapport aux cas des gaz parfaits.

Lorsqu'il s'agit d'une phase fluide multiconstituant quelconque, les simplifications précédentes ne sont plus valables et les potentiels chimiques peuvent avoir n'importe quelle autre forme. Néanmoins, l'introduction de la notion de fugacité permet de généraliser l'équation (A.2.4) tout en gardant une forme similaire :

$$\mu_k(p, T, \vec{c}) = \mu_k^0(p, T) + A_k \ln \frac{f_k(p, T, \vec{c})}{f_k^0(p, T)} \quad (\text{A.2.5})$$

Dans cette équation, f_k est la fugacité du constituant k dans le mélange tandis que μ_k^0 et f_k^0 représentent le potentiel chimique et la fugacité à un état de référence donné. Tout comme le potentiel chimique, la fugacité n'est pas une quantité directement accessible par l'expérience et elle peut être vue comme une simple transformation du potentiel chimique. Cependant, du fait de ses propriétés (c'est une quantité homogène à une pression qui tend vers $p_k = x_k p$ lorsque le produit $x_k p$ tend vers 0 puisque dans ces conditions le fluide se comporte comme un mélange de gaz parfait), il est souvent préférable de travailler avec cette quantité.

Dans le cas particulier où la fugacité peut être écrite sous la forme $f_k(p, T, \vec{c}) = x_k \bar{f}_k(p, T)$ où \bar{f}_k est une fonction de la pression et de la température uniquement, alors la solution (ou le mélange) est dite idéale. Sous cette hypothèse, le potentiel chimique peut être écrit comme suit :

$$\mu_k(p, T, \vec{c}) = \bar{\mu}_k(p, T) + A_k \ln x_k \quad (\text{A.2.6})$$

A.3 Application : équilibre de l'hydrogène et de l'eau entre les deux phases liquide et gaz dans un milieu poreux

Prenons maintenant le cas de deux phases adjacentes λ et γ et supposons qu'elles sont formées des mêmes constituants (k, l, \dots). L'équilibre thermodynamique d'un constituant

k à l'interface entre ces deux phases est défini par l'égalité des potentiels chimiques :

$$\mu_{k\lambda}(p_\lambda, T, \vec{c}_\lambda) = \mu_{k\gamma}(p_\gamma, T, \vec{c}_\gamma) \quad (\text{A.3.1})$$

où p_α est la pression et $\vec{c}_\alpha = (c_{k\alpha})$ est la composition de la phase α .

Le problème d'injection d'hydrogène dans une argilite initialement saturée en eau peut être modélisé par un milieu poreux avec deux phases fluides, liquide (λ) et gazeuse (γ), contenant chacune deux constituants, hydrogène (h) et eau (w) (voir figure 1.1). Nous considérons ainsi le problème général pour lequel l'hydrogène peut se dissoudre dans la phase liquide et l'eau peut s'évaporer et donc faire partie de la phase gazeuse. Afin de simplifier les écritures, on note la concentration de l'hydrogène dans la phase α par $c_\alpha = c_{h\alpha}$, la concentration de l'eau est alors $c_{w\alpha} = 1 - c_\alpha$.

Pour caractériser l'équilibre de l'eau et de l'hydrogène entre les deux phases, on commence par déterminer les potentiels chimiques de chaque constituant dans chaque phase à partir des lois d'état qu'on suppose connues. On admet que l'hydrogène se comporte comme un gaz parfait que ce soit en phase gazeuse ou liquide ($\alpha = \lambda, \gamma$) et que l'eau se comporte comme un gaz parfait dans la phase gazeuse et linéairement dans la phase liquide :

$$p_{h\alpha} \nu_{h\alpha} = A_h(T), \quad p_{w\gamma} \nu_{w\gamma} = A_w(T), \quad p_{w\gamma} = p_0 + \frac{K_w}{\rho_0} (\rho_{w\gamma} - \rho_0) \quad (\text{A.3.2})$$

où K_w est la compressibilité de l'eau et (ρ_0, p_0) représente un état de référence. En supposant que les mélanges gaz et liquide sont idéaux, on peut utiliser les équations (A.2.4) et (A.2.6) pour écrire les potentiels chimiques des constituants $k = h, w$ comme suit :

$$\begin{aligned} \mu_{k\lambda}(p_\lambda, T, c_\lambda) &= \mu_{k\lambda}^0(p_\lambda, T) + A_k(T) \ln x_{k\lambda} \\ \mu_{k\gamma}(p_\gamma, T, c_\gamma) &= \bar{g}_{k\gamma}(p_0, T) + A_k(T) \ln p_{k\gamma} \end{aligned} \quad (\text{A.3.3})$$

Pour exprimer l'équilibre thermodynamique, on réécrit l'équation (A.3.1) pour chaque constituant :

$$\mu_{h\lambda}(p_\lambda, T, c_\lambda) = \mu_{h\gamma}(p_\gamma, T, c_\gamma) \quad \text{et} \quad \mu_{w\lambda}(p_\lambda, T, c_\lambda) = \mu_{w\gamma}(p_\gamma, T, c_\gamma) \quad (\text{A.3.4})$$

Vu que les états de référence $\mu_{k\lambda}^0(p_\lambda, T)$ et $\bar{g}_{k\gamma}(p_0, T)$ sont inconnus, on ne peut pas utiliser directement ces égalités des potentiels chimiques pour obtenir des relations entre les variables du problème $(p_\lambda, p_\gamma, c_\lambda, c_\gamma, T)$. C'est pour cette raison qu'on va procéder plutôt à des écritures exprimant des variations des potentiels chimiques pour éliminer les états de référence.

Les deux égalités des potentiels chimiques nous permettent de réduire le nombre de variables principales (donc indépendantes) du problème. Par conséquent, si on considère que T, c_λ et c_γ sont les variables primaires, alors les équations (A.3.4) peuvent être interprétées comme deux relations exprimant les pressions p_λ et p_γ . Examinons tout d'abord l'effet de la variation de c_γ sur la première égalité. La dérivée de cette équation par rapport à c_γ nous fournit la relation suivante :

$$\bar{v}_{h\lambda} \partial_{c_\gamma} p_\lambda = \bar{v}_{h\gamma} \partial_{c_\gamma} p_\gamma + \partial_{c_\gamma} \mu_{h\gamma}$$

où $\bar{v}_{k\alpha} = \partial_{p_\alpha} \mu_{k\alpha} = \partial_{m_{k\alpha}} V_\alpha$ exprime l'effet d'une variation de masse du constituant k sur le volume de la phase α . Cette relation étant valable pour toutes les valeurs de c_γ , en

l'intégrant entre l'état particulier où la phase gazeuse est composée de l'hydrogène pur ($c_\gamma = 1, p_\lambda = p_\lambda^h, p_\gamma = p_\gamma^h$) et l'état actuel ($p_\lambda, p_\gamma, c_\gamma$), c_λ et T étant constantes, il vient :

$$\int_{p_\lambda^h}^{p_\lambda} \bar{\nu}_{h\lambda} dp_\lambda = \int_{p_\gamma^h}^{p_\gamma} \bar{\nu}_{h\gamma} dp_\gamma + \int_1^{c_\gamma} \partial_{c_\gamma} \mu_{h\gamma} dc_\gamma \quad (\text{A.3.5})$$

En reproduisant la même démarche avec la deuxième équation de (A.3.4) mais au lieu de suivre les variations de c_γ , on suit celles de c_λ , la dérivée donne l'équation suivante :

$$\bar{\nu}_{w\lambda} \partial_{c_\lambda} p_\lambda + \partial_{c_\lambda} \mu_{w\gamma} = \bar{\nu}_{w\gamma} \partial_{c_\lambda} p_\gamma$$

Le calcul entre l'état particulier où la phase liquide est composée de l'eau pure ($c_\lambda = 0, p_\lambda = p_\lambda^w, p_\gamma = p_\gamma^w$) et l'état actuel ($p_\lambda, p_\gamma, c_\lambda$), c_γ et T étant constantes, donne :

$$\int_{p_\lambda^w}^{p_\lambda} \bar{\nu}_{w\lambda} dp_\lambda + \int_0^{c_\lambda} \partial_{c_\lambda} \mu_{w\lambda} dc_\lambda = \int_{p_\gamma^w}^{p_\gamma} \bar{\nu}_{w\gamma} dp_\gamma \quad (\text{A.3.6})$$

Par ailleurs, en utilisant les équations (A.3.2) et (A.3.4), et sachant que $\bar{\nu}_{h\alpha} = \partial_{p_\alpha} \mu_{h\alpha} = \nu_\alpha + (1 - c_\alpha) \partial_{c_\alpha} \nu_\alpha$ et $\bar{\nu}_{w\alpha} = \partial_{p_\alpha} \mu_{w\alpha} = \nu_\alpha - c_\alpha \partial_{c_\alpha} \nu_\alpha$, les relations suivantes peuvent être déduites :

$$\begin{aligned} \nu_\gamma &= \frac{A}{p_\gamma}, \quad \nu_\lambda = \frac{A_h c_\lambda + K_w \nu_0 (1 - c_\lambda)}{p_\lambda - p_0 + K_w}, \quad \bar{\nu}_{h\gamma} = \frac{A_h}{p_\gamma}, \quad \bar{\nu}_{w\gamma} = \frac{A_w}{p_\gamma}, \\ \bar{\nu}_{h\lambda} &= \frac{A_h}{p_\lambda - p_0 + K_w}, \quad \bar{\nu}_{w\lambda} = \frac{K_w \nu_0}{p_\lambda - p_0 + K_w}, \quad \partial_{c_\alpha} \mu_{k\alpha} = \frac{A_k}{x_{k\alpha}} \partial_{c_\alpha} x_{k\alpha} \end{aligned} \quad (\text{A.3.7})$$

En combinant ces relations avec les équations (A.3.5) et (A.3.6), on obtient :

$$\frac{p_{h\gamma}}{p_\gamma^h} = \frac{p_\lambda - p_0 + K_w}{p_\lambda^h - p_0 + K_w} \quad \text{et} \quad \frac{p_\gamma}{p_\gamma^w} = x_{w\lambda} \left(\frac{p_\lambda - p_0 + K_w}{p_\lambda^w - p_0 + K_w} \right)^{\frac{K_w \nu_0}{A_w}} \quad (\text{A.3.8})$$

Sachant que dans la pratique $K_w \gg p$, ces équations peuvent être simplifiées comme suit :

$$p_{h\gamma} = p_\gamma^h \quad \text{et} \quad p_\gamma = x_{w\lambda} p_\gamma^w \quad (\text{A.3.9})$$

Il nous reste maintenant à déterminer l'expression de $p_\gamma^h(T, c_\lambda)$ et $p_\gamma^w(T, c_\gamma)$.

Système $\gamma\{\mathbf{h}\} - \lambda\{\mathbf{h} + \mathbf{w}\}$: Commençons par traiter le problème ($p_\lambda = p_\lambda^h, p_\gamma = p_\gamma^h, c_\gamma = 1$). L'hydrogène se trouve donc seul dans la phase gazeuse et l'équilibre entre les deux phases s'écrit :

$$g_\gamma^h(p_\gamma, T) = \mu_{h\lambda}(p_\lambda, T, c_\lambda) \quad (\text{A.3.10})$$

Cette équation peut être vue comme une relation donnant c_λ en fonction de (p_λ, p_γ, T) . En dérivant cette équation par rapport à p_γ , il vient :

$$\nu_\gamma^h(p_\gamma, T) = \partial_{c_\lambda} \mu_{h\lambda} \partial_{p_\gamma} c_\lambda$$

Intégrons cette équation entre un état de référence ($p_1, c_{\lambda 1}$) et l'état actuel (p_γ^h, c_λ) :

$$\int_{p_1}^{p_\gamma^h} \nu_\gamma^h dp_\gamma = \int_{c_{\lambda 1}}^{c_\lambda} \partial_{c_\lambda} \mu_{h\lambda} dc_\lambda$$

Soit, en utilisant les relations (A.3.7) :

$$p_\gamma^h = \frac{p_1}{x_{\lambda 1}} x_\lambda = H x_\lambda \quad (\text{A.3.11})$$

où $H = \frac{p_1}{x_{\lambda 1}}$ est une constante à déterminer expérimentalement connue sous le nom de la constante d'Henry.

Système $\gamma\{\mathbf{h} + \mathbf{w}\} - \lambda\{\mathbf{w}\}$: Considérons maintenant le problème ($p_\lambda = p_\lambda^w, p_\gamma = p_\gamma^w, c_\lambda = 0$) où la phase liquide est composée de l'eau uniquement. L'équilibre de l'eau entre les deux phases s'écrit dans ce cas :

$$\mu_{w\gamma}(p_\gamma, T, c_\gamma) = g_\lambda^w(p_\lambda, T) \quad (\text{A.3.12})$$

En considérant cette équation comme une relation donnant c_γ en fonction de (p_λ, p_γ, T) et en faisant varier p_γ , on trouve :

$$\bar{v}_{w\gamma}(p_\gamma, T, c_\gamma) + \partial_{c_\gamma} \mu_{w\gamma} \partial_{p_\gamma} c_\gamma = 0$$

En intégrant cette relation entre l'état actuel et celui pour lequel l'eau est en équilibre avec sa vapeur uniquement ($c_\gamma = 0$ et $p_\gamma = p_w^{sat}(T)$), il vient :

$$\int_{p_w^{sat}}^{p_\gamma} \bar{v}_{w\gamma}(p_\gamma, T, c_\gamma) dp_\gamma + \int_0^{c_\gamma} \partial_{c_\gamma} \mu_{w\gamma} dc_\gamma = 0$$

soit, en utilisant les relations (A.3.7) :

$$(1 - x_\gamma) p_\gamma^w = p_w^{sat} \quad (\text{A.3.13})$$

Cette équation n'est autre que la loi de Raoult qui postule que la pression de la vapeur d'eau est la même s'il était seul dans la phase gazeuse. Cette pression appelée pression de vapeur saturante de l'eau pure est une fonction de la température seulement et elle est donnée par la formule de Clapeyron.

Conclusion : Maintenant qu'on a déterminé l'expression de $p_\gamma^h(T, c_\lambda)$ et $p_\gamma^w(T, c_\gamma)$ (équations (A.3.11) et (A.3.13)), nous pouvons tirer des équations (A.3.9) des relations simples qui régissent l'équilibre chimique de l'hydrogène et de l'eau entre les deux phases liquide et gaz :

$$p_{h\gamma} = H x_\lambda \quad \text{et} \quad p_{w\gamma} = x_{w\lambda} p_w^{sat} \quad (\text{A.3.14})$$

La première est l'équation gérant la dissolution de l'hydrogène dans la phase liquide tandis que la deuxième s'intéresse au phénomène de vaporisation de l'eau vers la phase gazeuse. On remarque qu'en faisant l'approximation $K_w \gg p$, l'effet de la capillarité sur l'équilibre chimique devient négligeable puisqu'on retrouve les mêmes équations que lorsque la surface de séparation des deux phases est plane ($p_\lambda = p_\gamma$). Les deux équations (A.3.14) nous permettent de réduire le nombre d'inconnues du problème. Par exemple, si on choisit les pressions p_γ et p_λ et la température T comme variables primaires, les fractions molaires des deux phases seront calculées directement comme suit :

$$x_\lambda = \frac{p_\gamma - p_w^{sat}}{H - p_w^{sat}} \quad \text{et} \quad x_\gamma = \frac{H x_\lambda}{p_\gamma} \quad (\text{A.3.15})$$

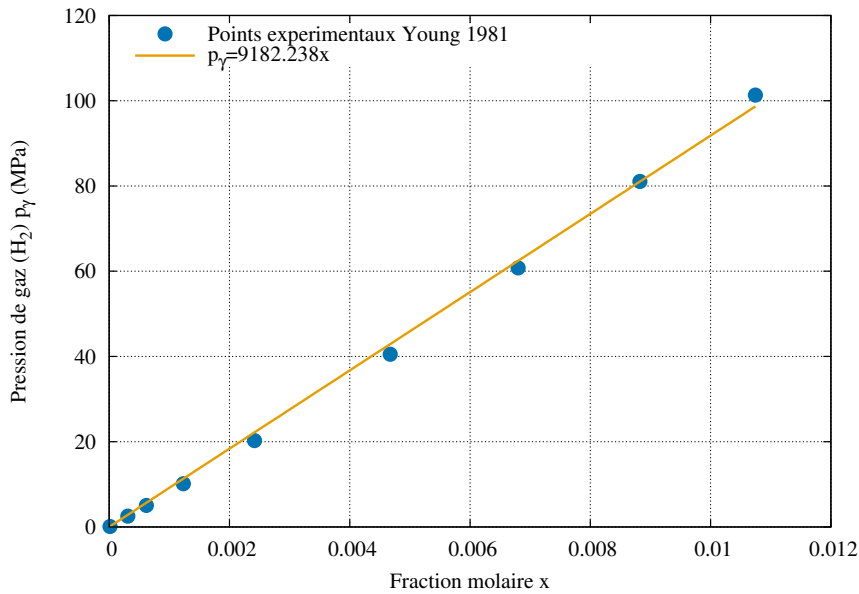


FIGURE A.1 – Détermination de la constante d’Henry pour le couple hydrogène-eau (Young, 1981, pp298-310)

Ordre de grandeur : Afin de déterminer lequel des deux phénomènes est prépondérant dans le cas de la problématique de stockage des déchets radioactifs dans l’argilite, faisons un calcul d’ordre de grandeur en utilisant les valeurs numériques suivantes : $R = 8.317\text{J/K}$, $M_h = 2.0159\text{g/mol}$, $M_w = 18.0153\text{g/mol}$, $\rho_0 = 1000\text{kg/m}^3$, $p_1 = p_0 = 10^5\text{Pa}$, $T = 298\text{K}$, $p_w^{sat} = 3.2\text{kPa}$, $H = 9182.238\text{MPa}$ (voir figure A.1), $p_\lambda = 5\text{MPa}$ et $p_\gamma = 10\text{MPa}$. En utilisant les équations (A.3.15), on détermine les fractions molaires de chaque phase $x_\lambda = 0.001$ et $x_\gamma = 0.999$, il vient alors $p_{h\gamma} = 9.99\text{MPa}$ et $p_{w\gamma} = 3.19\text{kPa}$. Il est clair que le phénomène de vaporisation de l’eau est marginal si on compare la pression de la vapeur d’eau par rapport à celle de l’hydrogène. Il est alors raisonnable de considérer le système étudié tel que la phase gazeuse soit composée uniquement de l’hydrogène et que la phase liquide soit composée de l’eau et de l’hydrogène dissous.

Bibliographie

- Aldea, C. M., Shah, S. P., et Karr, A. (1999). Permeability of cracked concrete. *Materials and Structures/ Matériaux et Constructions*, 32 :370–376.
- Alonso, E. E., Gens, A., et Josa, A. (1990). A constitutive model for partially saturated soils. *Géotechnique*, 40(3) :405–430.
- Amadei, B. (1996). Importance of anisotropy when estimating and measuring in situ stress in rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts*, 33(3) :293–325.
- Ambrose, J., Zimmerman, R., Suarez-Rivera, R., et al. (2014). Failure of shales under triaxial compressive stress. In *48th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium*. American Rock Mechanics Association.
- ANDRA (2005a). *Dossier 2005 : Argile. Evaluation de la faisabilité du stockage géologique en formation argileuse*.
- ANDRA (2005b). *Dossier 2005 : Argile. Tome : Evolution phénoménologique du stockage géologique*.
- ANDRA (2005c). Référentiel du site de Meuse / Haute-Marne. Tome 2. Andra Report n°C.RP.ADS.04.0022.
- ANDRA (2012). Référentiel du comportement THM des formations sur le site de Meuse / Haute-Marne. Andra Report n°D.RP.AMFS.12.0024.
- Angeli, M., Soldal, M., Skurtveit, E., et Aker, E. (2009). Experimental percolation of supercritical CO₂ through a caprock. *Energy Procedia*, 1(1) :3351 – 3358.
- Angelini, O. (2010). *Étude de schémas numériques pour les écoulements diphasiques en milieu poreux déformable pour des maillages quelconques : application au stockage de déchets radioactifs*. PhD thesis, Université Paris-Est.
- Angelini, O., Chavant, C., Chénier, E., Eymard, R., et Granet, S. (2011). Finite volume approximation of a diffusion–dissolution model and application to nuclear waste storage. *Mathematics and Computers in Simulation*, 81(10) :2001–2017.
- Armand, G., Conil, N., Talandier, J., et Seyedi, D. (2016). Fundamental aspects of the hydromechanical behavior of the Callovo-Oxfordian claystone—from experimental investigations toward a modeling perspective. *Comput Geotech*. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compgeo>.
- Armand, G., Leveau, F., Nussbaum, C., de La Vaissiere, R., Noiret, A., Jaeggi, D., Lan-

- drein, P., et Righini, C. (2014). Geometry and properties of the excavation-induced fractures at the meuse/haute-marne url drifts. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 47(1) :21–41.
- Armand, G., Noiret, A., Zghondi, J., et Seyedi, D. (2013). Short-and long-term behaviors of drifts in the callovo-oxfordian claystone at the meuse/haute-marne underground research laboratory. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 5(3) :221–230.
- Armand, G., Souley, M., Su, K., Renaud, V., et Wileveau, Y. (2006). Hydromechanical response to a mine by test experiment in a deep claystone. In *Conference " Geotechnique sea to sky 2006"*, pages 488–495.
- Badel, P., Godard, V., et Leblond, J.-B. (2007). Application of some anisotropic damage model to the prediction of the failure of some complex industrial concrete structure. *International Journal of Solids and Structures*, 44 :5848–5874.
- Barla, G. et Innaurato, N. (1973). Indirect tensile testing of anisotropic rocks. *Rock Mechanics*, 5 :215–230.
- Barpi, F., Valente, S., Cravero, M., Iabichino, G., et Fidelibus, C. (2012). Fracture mechanics characterization of an anisotropic geomaterial. *Engineering Fracture Mechanics*, 84 :111–122.
- Barron, K. (1971). Brittle fracture initiation in and ultimate failure of rocks, part III : anisotropic rocks : experimental results. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 8 :565–575.
- Bary, B., Bournazel, J.-P., et Bourdarot, E. (2000). Poro-damage approach applied to hydro-fracture analysis of concrete. *Journal of Engineering Mechanics*, 126(9) :937–943.
- Bastian, P. (2014). A fully-coupled discontinuous galerkin method for two-phase flow in porous media with discontinuous capillary pressure. *Computational Geosciences*, 18(5) :779–796.
- Bigoni, D. et Piccolroaz, A. (2004). Yield criteria for quasibrittle and frictional materials. *International journal of solids and structures*, 41(11) :2855–2878.
- Biot, M. A. (1941). General theory of three-dimensional consolidation. *Journal of applied physics*, 12(2) :155–164.
- Bishop, A. (1959). The principle of effective stress. *Teknik Ukeblad*, 39 :859–863.
- Boehler, J. P. (1986). Anisotropie et comportement rhéologique des matériaux. Anisotropy and rheological behavior of materials. In Huet, C., Bourgoïn, D., et Richemond, S., editors, *Rhéologie des matériaux anisotropes. Rheology of anisotropic materials*, pages 19–50. CEPADUES.
- Bonin, B., Colin, M., et Dutfoy, A. (2000). Pressure building during the early stages of gas production in a radioactive waste repository. *Journal of Nuclear Materials*, 281(1) :1–14.
- Boulin, P. (2008). *Expérimentation et modélisation du transfert d'hydrogène à travers des argiles de centre de stockage de déchets radioactifs*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble-INPG.

- Bourgeat, A., Jurak, M., et Smai, F. (2010). Modelling and numerical simulation of gas migration in a nuclear waste repository. *arXiv preprint arXiv :1006.2914*.
- Bourgeat, A., Jurak, M., et Smaï, F. (2013a). On persistent primary variables for numerical modeling of gas migration in a nuclear waste repository. *Computational geosciences*, 17(2) :287–305.
- Bourgeat, A., Smaï, F., et Granet, S. (2013b). Compositional Two-Phase Flow in Saturated-Unsaturated Porous Media : Benchmarks for Phase Appearance/Disappearance. In *Simulation of Flow in Porous Media*, pages 81–106. De Gruyter.
- Car, E., Oller, S., et Onate, E. (2001). A large strain plasticity model for anisotropic materials - composite material application. *International Journal of Plasticity*, 17(11) :1437 – 1463.
- Carol, I., Rizzi, E., et Willam, K. (2001a). On the formulation of anisotropic elastic degradation. I. Theory on a pseudo-logarithmic damage tensor rate. *International Journal of Solids and Structures*, 38 :491–518.
- Carol, I., Rizzi, E., et Willam, K. (2001b). On the formulation of anisotropic elastic degradation. II. Generalized pseudo-Rankine model for tensile damage. *International Journal of Solids and Structures*, 38 :519–546.
- Charlier, R., Collin, F., Pardoën, B., Talandier, J., Radu, J.-P., et Gerard, P. (2013). An unsaturated hydro-mechanical modelling of two in-situ experiments in callovo-oxfordian argillite. *Engineering geology*, 165 :46–63.
- Chen, C. S. et Hsu, S. C. (2001). Measurement of indirect tensile strength of anisotropic rocks by the ring test. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 34 (4) :293–321.
- Chen, C. S., Pan, E., et Amadei, B. (1998). Determination of deformability and tensile strength of anisotropic rock using brazilian tests. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 35(1) :43–61.
- Chen, L., Liu, J., Wang, C., Liu, J., Su, R., et Wang, J. (2014a). Characterization of damage evolution in granite under compressive stress condition and its effect on permeability. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 71 :340–349.
- Chen, L., Shao, J., et Huang, H. (2010). Coupled elastoplastic damage modeling of anisotropic rocks. *Computers and Geotechnics*, 37 :187–194.
- Chen, W. (2011). *Etude expérimentale de la perméabilité du béton sous conditions thermiques et hydriques variables*. PhD thesis, Ecole Centrale de Lille.
- Chen, W., La Borderie, C., Maurel, O., Pijaudier-Cabot, G., et Rey-Bethbeder, F. (2014b). Simulation of damage–permeability coupling for mortar under dynamic loads. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 38(5) :457–474.
- Chiarelli, A., Shao, J., et Hoteit, N. (2003). Modeling of elastoplastic damage behavior of a claystone. *International Journal of Plasticity*, 19 :23–45.
- Cho, J.-W., Kim, H., Jeon, S., et Min, K.-B. (2012). Deformation and strength anisotropy

- of Asan gneiss, Boryeong shale, and Yeoncheon schist. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 50 :158–169.
- Choinska, M. (2006). *Effets de la température, du chargement mécanique et de leurs interactions sur la perméabilité du béton de structure*. PhD thesis, Ecole Centrale de Nantes et Université de Nantes.
- Choinska, M., Khelidj, A., Chatzigeorgiou, G., et Pijaudier-Cabot, G. (2007). Effects and interactions of temperature and stress-level related damage on permeability of concrete. *Cement and Concrete Research*, 37 :79–88.
- Claesson, J. et Bohloli, B. (2002). Brazilian test : stress field and tensile strength of anisotropic rocks using an analytical solution. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 39 :991–1004.
- Code-Aster (2013). *Loi de comportement viscoplastique VISC_DRUC_PRAG*. Clé : R7.01.22.
- Code-Aster (2015). *[R7.01.11] Modèles de comportement THHM*.
- Cordebois, J. et Sidoroff, F. (1982). Damage induced elastic anisotropy. In *Mechanical Behavior of Anisotropic Solids/Comportement Mécanique des Solides Anisotropes*, pages 761–774. Springer.
- Coussy, O. (1991). *Mécanique des milieux poreux*. Editions Technip.
- Crawford, B., DeDontey, N., Alramahi, B., et Ottesen, S. (2012). Shear strength anisotropy in fine-grained rocks. *American rock mechanics association*, 12-290.
- Cuss, R., Harrington, J., Giot, R., et Auvray, C. (2014). Experimental observations of mechanical dilation at the onset of gas flow in callovo-oxfordian claystone. *Geological Society, London, Special Publications*, 400(1) :507–519.
- Cuvilliez, S., Djouadi, I., Raude, S., et Fernandes, R. (2016). An elastoviscoplastic constitutive model for geomaterials : Application to hydromechanical modelling of claystone response to drift excavation. *Computers and Geotechnics*.
- Dan, D. Q. (2011). *Brazilian Test on Anisotropic Rocks - Laboratory Experiment, Numerical Simulation and Interpretation*. PhD thesis, Veröffentlichungen des Instituts für Geotechnik der TU Bergakademie Freiberg.
- Dan, D. Q. et Konietzky, H. (2014). Numerical simulations and interpretations of Brazilian tensile tests on transversely isotropic rocks. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 71 :53–63.
- Dan, D. Q., Konietzky, H., et Herbest, M. (2013). Brazilian tensile strength tests on some anisotropic rocks. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 58 :1–7.
- Davy, C. A., Skoczylas, F., Barnichon, J.-D., et Lebon, P. (2007). Permeability of macro-cracked argillite under confinement : Gaz and water testing. *Physics and Chemistry of the Earth*, 32 :667–680.
- de La Vaissière, R., Armand, G., et Talandier, J. (2015). Gas and water flow in an excavation-induced fracture network around an underground drift : A case study for a radioactive waste repository in clay rock. *Journal of Hydrology*, 521 :141–156.

- Desmorat, R. (2000). Dissymétrie de comportement élastique anisotrope couplé ou non à l'endommagement. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences-Series IIB-Mechanics*, 328(6) :445–450.
- Dridi, W. (2005). *Couplage entre corrosion et comportement diphasique dans un milieu poreux : Application à l'évolution d'un stockage des déchets radioactifs*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- Ern, A. et Mozolevski, I. (2012). Discontinuous galerkin method for two-component liquid–gas porous media flows. *Computational Geosciences*, 16(3) :677–690.
- Exadaktylos, G. et Kaklis, K. (2001). Application of an explicit solution for transversely isotropic circular disc compressed diametrically. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 38 :227–243.
- Fine, J. et Vouille, G. (1969/1970). L'anisotropie des roches, son influence sur l'essai brésilien. *Revue de l'industrie minière - Cahier 2 Comité Français de Mécanique des Roches*.
- Fjær, E., Nes, O.-M., et al. (2013). Strength anisotropy of mancos shale. In *47th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium*. American Rock Mechanics Association.
- Gatelier, N. (2001). *Etude expérimentale et théorique de l'endommagement des roches anisotropes*. PhD thesis, Université Joseph Fourier - Grenoble I.
- Gawin, D., Pesavento, F., et Schrefler, B. (2002). Simulation of damage–permeability coupling in hygro-thermo-mechanical analysis of concrete at high temperature. *Communications in numerical methods in engineering*, 18(2) :113–119.
- Gawin, D., Pesavento, F., et Schrefler, B. (2003). Modelling of hygro-thermal behaviour of concrete at high temperature with thermo-chemical and mechanical material degradation. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 192(13) :1731–1771.
- Gérard, B., Breysse, D., Ammouche, A., Houdousse, O., et Didry, O. (1996). Cracking and permeability of concrete under tension. *Materials and Structures/ Matériaux et Constructions*, 29 :141–151.
- Gerard, P., Harrington, J., Charlier, R., et Collin, F. (2014). Modelling of localised gas preferential pathways in claystone. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 67 :104 – 114.
- Giot, R., Giraud, A., et Guillon, T. (2012). Three-dimensionnal poromechanical back analysis of the pulse test accounting for transverse isotropy. *Acta Geotechnica*, 7 :151–165.
- Grathwohl, P. (cop. 1998). *Diffusion in natural porous media*. Topics in environmental fluid mechanics. Kluwer Academic Publishers, Boston.
- Guayacán-Carrillo, L.-M., Sulem, J., Seyedi, D. M., Ghabezloo, S., Noiret, A., et Armand, G. (2016). Analysis of long-term anisotropic convergence in drifts excavated in callovo-oxfordian claystone. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 49(1) :97–114.
- Harrington, J. et Horseman, S. (1999). Gas transport properties of clays and mudrocks. *Geological Society, London, Special Publications*, 158(1) :107–124.

- Harrington, J. F., de la Vaissière, R., Noy, D. J., Cuss, R. J., et Talandier, J. (2013a). Gas flow in callovo-oxfordian claystone (cox) : results from laboratory and field-scale measurements. *Mineralogical Magazine*, 76(8) :3303–3318.
- Harrington, J. F., Noy, D. J., et Cuss, R. C. (2013b). The stress-path permeameter experiment conducted on callovo-oxfordian claystone. Commissioned Report D5.16, British Geological Survey.
- Hassanizadeh, M. et Gray, W. G. (1979). General conservation equations for multi-phase systems : 1. averaging procedure. *Advances in water resources*, 2 :131–144.
- Hauseux, P., Roubin, E., Seyedi, D., et Colliat, J. (2016). Fe modelling with strong discontinuities for 3d tensile and shear fractures : Application to underground excavation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*.
- Hobbs, D. W. (1964). The tensile strength of rocks. *International journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 1 :385–396.
- Hobbs, D. W. (1965). An assessment of a technique for determining the tensile strength of rock. *British Journal of Applied Physics*, 16.
- Hobbs, D. W. (1967). Rock tensile strength and its relationship to a number of alternative measures of rock strength. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 4 :115–127.
- Horseman, S., Harrington, J., et Sellin, P. (1999). Gas migration in clay barriers. *Engineering geology*, 54(1) :139–149.
- Hudson, J. A. (1969). Tensile strength and the ring test. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*.
- Jaffré, J. et Sboui, A. (2010). Henry’s law and gas phase disappearance. *Transport in Porous Media*, 82(3) :521–526.
- Jason, L. (2004). *Relation endommagement perméabilité pour les bétons : application aux calculs de structures*. PhD thesis, Nantes.
- Jason, L., Pijaudier-Cabot, G., Ghavamian, S., et Huerta, A. (2007). Hydraulic behaviour of a representative structural volume for containment buildings. *Nuclear engineering and design*, 237(12) :1259–1274.
- Kolari, K. (2007). *Damage mechanics model for brittle failure of transversely isotropic solids*. PhD thesis, VTT Technical Research Centre of Finland.
- Lemaitre, J. et Desmorat, R. (2005). *Engineering damage mechanics : ductile, creep, fatigue and brittle failures*. Springer Science & Business Media.
- Lemaitre, J., Desmorat, R., et Sauzay, M. (2000). Anisotropic damage law of evolution. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 19(2) :187 – 208.
- Leverett, M. et al. (1941). Capillary behavior in porous solids. *Transactions of the AIME*, 142(01) :152–169.
- Mahjoub, M., Rouabhi, A., Tijani, M., et Granet, S. (2015). A damage model for transversely isotropic materials. In *PETRUS 2015*, pages 46–53.

- Mahjoub, M., Rouabhi, A., Tijani, M., et Granet, S. (2016). An approach to model the mechanical behavior of transversely isotropic materials. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 40 :942–961.
- Maleki, K. et Pouya, A. (2010). Numerical simulation of damage-permeability relationship in brittle geomaterials. *Computers and Geotechnics*, 37 :619–628.
- Mánica, M., Gens, A., Vaunat, J., et Ruiz, D. (2016). A cross-anisotropic formulation for elasto-plastic models. *Géotechnique Letters*, pages 1–7.
- Marschall, P., Distinguin, M., Shao, H., Bossart, P., Enachescu, C., Trick, T., et al. (2006). Creation and evolution of damage zones around a microtunnel in a claystone formation of the swiss jura mountains. In *SPE International Symposium and Exhibition on Formation Damage Control*. Society of Petroleum Engineers.
- Martín, L. B., Hadj-Hassen, F., Tijani, M., et Armand, G. (2011). New numerical modelling of the mechanical long-term behaviour of the GMR gallery in ANDRA’s Underground Research Laboratory. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 36(17) :1872–1877.
- M’JAHAD, S. (2012). *Etude de l’impact de la fissuration sur les propriétés de rétention d’eau et de transport de gaz des bétons, de l’argilite et des interfaces argilite/béton. Application au stockage géologique des déchets radioactifs*. PhD thesis, Ecole Centrale de Lille.
- Mualem, Y. (1978). Hydraulic conductivity of unsaturated porous media : generalized macroscopic approach. *Water Resources Research*, 14(2) :325–334.
- Murakami, S. et Kamiya, K. (1997). Constitutive and damage evolution equations of elastic-brittle materials based on irreversible thermodynamics. *International Journal of Mechanical Sciences*, 39(4) :473 – 486.
- Neumann, R., Bastian, P., et Ippisch, O. (2013). Modeling and simulation of two-phase two-component flow with disappearing nonwetting phase. *Computational geosciences*, 17(1) :139–149.
- Noiret, A., Giot, R., Bemmerl, E., Giraud, A., et Homand, F. (2011). Hydromechanical behavior of tournemire argillites : measurement of the poroelastic parameters and estimation of the intrinsic permeability by oedometric tests. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 35(4) :496–518.
- Nova, R. et Zaninetti, A. (1990). An investigation into the tensile behaviour of a schistose rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts*.
- Olivella, S. et Alonso, E. E. (2008). Gas flow through clay barriers. *Géotechnique*, 58(3) :157–176.
- Pardoën, B. et Collin, F. (2016). Modelling the influence of strain localisation and viscosity on the behaviour of underground drifts drilled in claystone. *Computers and Geotechnics*.
- Pardoën, B., Levasseur, S., et Collin, F. (2015). Using local second gradient model and shear strain localisation to model the excavation damaged zone in unsaturated claystone. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 48(2) :691–714.

- Park, S.-S., Kwon, S.-J., et Jung, S. H. (2012). Analysis technique for chloride penetration in cracked concrete using equivalent diffusion and permeation. *Construction and Building Materials*, 29 :183–192.
- Pereira, J.-M., Coussy, O., Alonso, E. E., Vaunat, J., et Olivella, S. (2010). Is the degree of saturation a good candidate for Bishop's X parameter? In Alonso, E. E. et Gens, A., editors, *Unsaturated Soils - Proc. Fifth Int. Conf. on Unsaturated Soils*, volume 2, pages 913–919, Barcelona, Spain. CRC Press.
- Pham, Q. T. (2006). *Effets de la désaturation et de la resaturation sur l'argilite dans les ouvrages souterrains*. PhD thesis, Ecole Polytechnique X.
- Picandet, V., Khelidj, A., et Bastian, G. (2001). Effect of axial compressive damage on gas permeability of ordinary and high-performance concrete. *Cement and Concrete Research*, 31 :1525–1532.
- Picandet, V., Khelidj, A., et Bellegou, H. (2009). Crack effects on gas and water permeability of concretes. *Cement and Concrete Research*, 39 :537–547.
- Plassart, R., Fernandes, R., Giraud, A., Hoxha, D., et Laigle, F. (2013). Hydromechanical modelling of an excavation in an underground research laboratory with an elastovisco-plastic behaviour law and regularization by second gradient of dilation. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 58 :23–33.
- Pruess, K., Oldenburg, C., et Moridis, G. (1999). Tough2 user's guide version 2. *Lawrence Berkeley National Laboratory*.
- Rahal, S. (2015). *Influence de l'anisotropie induite par la fissuration sur le comportement poromécanique de géomatériaux*. PhD thesis, INSA de Toulouse.
- Rastiello, G. (2013). *Fluid transfers in cracking concrete structures : numerical probabilistic modeling strategies and experimental investigations*. Theses, Université Paris-Est.
- Rebour, V., Billiotte, J., Deveughele, M., Jambon, A., et Le Guen, C. (1997). Molecular diffusion in water-saturated rocks : A new experimental method. *Journal of contaminant hydrology*, 28(1) :71–93.
- Rejeb, A. (1999). *Projet Tournemire, programme mécanique, caractérisation du comportement mécanique au laboratoire*. Technical report, Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire, Département de Protection de l'Environnement.
- Rouabhi, A. (2004). *Comportement et fragmentation dynamiques des matériaux quasi-fragiles*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Rouabhi, A., Tijani, M., Moser, P., et Goetz, D. (2005). Continuum modelling of dynamic behaviour and fragmentation of quasi-brittle materials : application to rock fragmentation by blasting. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 29(7) :729–749.
- Rouabhi, A., Tijani, M., et Rejeb, A. (2007). Triaxial behaviour of transversely isotropic materials : Application to sedimentary rocks. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 31 :1517–1535.
- Rutqvist, J. (2015). Fractured rock stress-permeability relationships from in situ data and effects of temperature and chemical-mechanical couplings. *Geofluids*, 15(1-2) :48–66.

- Saito, M. (1995). Chloride permeability of concrete under static and repeated compressive loading. *Cement and Concrete Research*, 25(4) :803–808.
- Schrefler, B. et Pesavento, F. (2004). Multiphase flow in deforming porous material. *Computers and geotechnics*, 31(3) :237–250.
- Schrefler, B. A. et Gawin, D. (1996). The effective stress principle : incremental or finite form? *International journal for numerical and analytical methods in geomechanics*, 20(11) :785–814.
- Seyedi, D. M., Armand, G., et Noiret, A. (2016). “Transverse Action” – A model benchmark exercise for numerical analysis of the callovo-oxfordian claystone hydromechanical response to excavation operations. *Computers and Geotechnics*.
- Shao, J.-F., Zhou, H., et Chau, K. (2005). Coupling between anisotropic damage and permeability variation in brittle rocks. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 29(12) :1231–1247.
- Souley, M., Armand, G., Su, K., et Ghoreychi, M. (2011). Modeling the viscoplastic and damage behavior in deep argillaceous rocks. *Physics and Chemistry of the Earth*, 36 :1949–1959.
- Souley, M., Homand, F., Pepa, S., et Hoxha, D. (2001). Damage-induced permeability changes in granite : a case example at the url in canada. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 38(2) :297–310.
- Tavallali, A. et Vervoort, A. (2010). Effect of layer orientation on the failure of layered sandstone under Brazilian test conditions. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 47 :313–322.
- Tavallali, A. et Vervoort, A. (2013). Behaviour of layered sandstone under Brazilian test conditions : Layer orientation and shape effects. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 5 :366–377.
- Tegguer, A. D., Bonnet, S., Khelidj, A., et Baroghel-Bouny, V. (2013). Effect of uniaxial compressive loading on gas permeability and chloride diffusion coefficient of concrete and their relationship. *Cement and concrete research*, 52 :131–139.
- Terzaghi, K. v. (1923). Die berechnung der durchlassigkeitsziffer des tones aus dem verlauf der hydrodynamischen spannungserscheinungen. *Sitzungsberichte der Akademie der Wissenschaften in Wien, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Klasse, Abteilung IIa*, 132 :125–138.
- Tien, Y. M. et Kuo, M. C. (2001). A failure criterion for transversely isotropic rocks. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 38 :399–412.
- Tijani, M. (2000). *VIPLEF3D User’s Manual, Version 001204*. Ecole des Mines de Paris, France.
- Truesdell, C. et Noll, W. (2004). *The Non-Linear Field Theories of Mechanics*. Springer, 3rd edition.
- Van den Eijnden, A. P., Bésuelle, P., Collin, F., Chambon, R., et Desrues, J. (2016). Modeling the strain localization around an underground gallery with a hydro-mechanical double scale model ; effect of anisotropy. *Computers and Geotechnics*.

- Van Genuchten, M. T. (1980). A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil science society of America journal*, 44(5) :892–898.
- Vervoort, A., Min, K.-B., Konietzky, H., Cho, J.-W., Debecker, B., Dinh, Q.-D., Frühwirt, T., et Tavallali, A. (2014). Failure of transversely isotropic rock under Brazilian test conditions. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 70 :343–352.
- Vilarrasa, V., Koyama, T., Neretnieks, I., et Jing, L. (2011). Shear-induced flow channels in a single rock fracture and their effect on solute transport. *Transport in porous media*, 87(2) :503–523.
- Wang, K., Jansen, D. C., et Shah, S. P. (1997). Permeability study of cracked concrete. *Cement and Concrete Research*, 27(3) :381–393.
- Wileveau, Y., Cornet, F., Desroches, J., et Blumling, P. (2007). Complete in situ stress determination in an argillite sedimentary formation. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 32(8) :866–878.
- Yang, H. (2011). *Comportement hydromécanique des bétons sous pressions de confinement faible et élevé*. PhD thesis, Lille 1.
- Young, C. L., editor (1981). *Solubility data series. Hydrogen and Deuterium*, volume 5/6. Pergamon.
- Zhang, C.-L. (2011). Experimental evidence for self-sealing of fractures in claystone. *Physics and Chemistry of the Earth*, 36 :1972–1980.
- Zhang, C.-L. (2016). The stress–strain–permeability behaviour of clay rock during damage and recompaction. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 8(1) :16–26.
- Zhang, C.-L., Czaikowski, O., et Rothfuchs, T. (2010). Thermo-hydro-mechanical behaviour of the Callovo-Oxfordian clay rock. GRS - 266.
- Zhang, C.-L. et Rodriguez-Dono, A. (2016). Modelling of the hydro-mechanical behaviour of clay rock. In *8th Workshop of CODE_BRIGHT*.
- Zhang, C.-L. et Rothfuchs, T. (2004). Experimental study of the hydro-mechanical behaviour of the callovo-oxfordian argillite. *Applied Clay Science*, 26 :325–336.
- Zhang, C.-L. et Rothfuchs, T. (2008). Damage and sealing of clay rocks detected by measurements of gas permeability. *Physics and Chemistry of the Earth*, 33 :S363–S373.
- Zhang, J., Zhou, S., XU, X., et Fang, L. (2013). Evolution of the plastic properties of a bedded argillite damaged in cyclic triaxial tests. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 58 :103–110.
- Zhou, J., Shao, J.-F., et Xu, W. (2006). Coupled modeling of damage growth and permeability variation in brittle rocks. *Mechanics Research Communications*, 33(4) :450–459.

Résumé

Le but de cette thèse est de mettre en place un nouveau modèle de comportement hydromécanique permettant de prendre en compte les anisotropies initiale et induite et l'impact de l'endommagement mécanique sur la perméabilité. Afin de construire ce modèle, une nouvelle approche de modélisation permettant d'étendre les lois de comportement mécaniques des matériaux isotropes aux matériaux anisotropes est développée. Cette approche, employée dans le cadre des milieux continus à variables internes, est utilisée pour construire une loi de comportement elasto-viscoplastique qui distingue entre les régimes de sollicitation en compression et en traction. Un tenseur de second ordre est introduit pour décrire l'anisotropie induite suite à des sollicitations de traction et une variable interne scalaire est utilisée pour traduire le durcissement/adoucissement du matériau suite à des sollicitations de compression. Sous des sollicitations complexes, ces deux mécanismes sont couplés et l'effet de fermeture/réouverture des fissures est traité. Le couplage endommagement-perméabilité est ensuite modélisé par l'introduction d'une loi phénoménologique reliant la perméabilité intrinsèque du matériau aux variables internes de la mécanique.

Ce modèle a été appliqué dans le cas des ouvrages souterrains du site de Bure afin de comprendre les mécanismes d'altération des propriétés hydromécaniques autour des galeries et des alvéoles de stockage causée non seulement par les opérations de creusement mais également par les surpressions dues à la production d'hydrogène gazeux suite à la corrosion des parties métalliques des modules de déchets.

Mots Clés

Anisotropie, endommagement, viscoplasticité, couplage hydromécanique, perméabilité, argilite Callovo-Oxfordien

Abstract

This thesis aims to introduce a new hydromechanical constitutive model taking into account both initial and induced anisotropies and the impact of the mechanical damage on the permeability. To build this model, a new modeling approach is developed allowing the extension of mechanical behavior laws from isotropic materials to transversely isotropic materials. This approach is used, within the framework of continuous media with internal variables, to propose an elasto-viscoplastic behavior law that distinguishes between compressive and tensile loading regimes. A second order tensor is introduced to describe the induced anisotropy due to tensile loadings, and a scalar internal variable is employed to account for hardening and softening of the material due to compressive loadings. Under complex loadings, these two mechanisms are coupled, and the effect of cracks closing/reopening is taken into consideration. The damage-permeability coupling is modeled by the introduction of a phenomenological law linking the material intrinsic permeability to the mechanical internal variables.

The developed model is applied to the case of the underground drifts of Bure site in order to better understand the mechanisms of hydromechanical properties alteration, around drifts and storing cells. Not only the impact of the excavation operations is considered but also the consequences of the overpressures caused by the produced hydrogen due to the corrosion of the metallic parts of nuclear waste containers.

Keywords

Anisotropy, damage, viscoplasticity, hydro-mechanical coupling, permeability, Callovo-Oxfordian claystone