
Table des matières

Résumé	13
Abstract	15
Introduction Générale	16
I Étude bibliographique - Etat des connaissances	21
1. Introduction	21
2. Les observations naturelles	22
2.1 Les marqueurs naturels - Le transfert en solution en tant que mécanisme de déformation	22
2.2 Applications géologiques de l'étude du transfert en solution	28
2.3 Les facteurs influençant le transfert en solution	29
2.4 Conclusion	30
3. Les travaux expérimentaux	31
3.1 Reproduction en laboratoire du transfert en solution	31
3.2 Essais de poinçonnement de monocristaux	31
3.3 Essais de compaction d'agrégat	36
3.4 L'influence des différents paramètres	37
3.5 L'association des déformations par transfert en solution et des déformations cataclastiques	38
3.6 La mise en évidence des structures des joints de grains	39
3.7 Conclusion	39
4. Les différents modèles du transfert en solution	41
4.1 Modèle micropysique	41
4.2 Thermodynamique d'une interface solide/fluide	45
4.3 La force thermodynamique	45
4.4 Le potentiel chimique du soluté	47
4.5 Loi de fluage phénoménologique	47

4.6	Conclusion	51
II	Étude de la compaction d'un agrégat de grains	53
1.	Introduction	53
2.	Le modèle d'étude	54
2.1	Le problème aux limites	54
2.1.1	La géométrie et les conditions aux limites	54
2.1.2	Analyse de perturbation géométrique - double linéarisation	56
2.1.2.1	Hypothèses	57
2.1.2.2	Conséquences	59
2.1.3	Formulation faible du problème	59
2.1.3.1	Le principe des travaux virtuels sur la configuration courante Ω_t	59
2.1.3.2	La double linéarisation de l'équation du principe des travaux virtuels	59
2.2	Un calcul purement élastique	60
2.2.1	La géométrie et les conditions aux limites	61
2.2.2	Approche analytique	62
2.2.3	Résolution par éléments finis	66
2.2.3.1	Sphère tronquée soumise à un chargement uniforme	68
2.2.3.2	Le talus uniformément chargé	73
2.2.3.3	La sphère tronquée avec un chargement linéairement réparti	73
2.2.3.4	Etude poussée de la sphère tronquée chargée uniformément	74
2.2.4	Conclusion	84
3.	Le transfert en solution dans le contact intergranulaire	86
3.1	Équations préliminaires	86
3.1.1	Les flux de masse	86
3.1.2	Les potentiels chimiques et les forces responsables du transfert en solution	87
3.1.3	Loi cinétique	88
3.1.4	La contrainte normale intergranulaire, condition aux limites	89
3.2	Un modèle de transfert en solution intergranulaire	89
3.2.1	Loi de fluage - Un modèle «exact»	89
3.2.2	Le modèle «approché»	90
3.2.3	Validation numérique du modèle approché	90
3.2.3.1	Les quantités et leurs valeurs	92

3.2.3.2	Analyse dimensionnelle	93
3.2.3.3	Résultats	93
3.2.3.4	Influence des paramètres sur la validité de l'approximation	99
3.3	Étude de la compaction d'un agrégat de grain par transfert en solution .	100
3.3.1	Le taux de convergence des grains	100
3.3.2	Actualisation du facteur de racourcissement du grain	100
3.3.3	Algorithme	101
3.3.4	Résultats	101
3.4	Conclusions	109
III Analyse de stabilité linéaire en 3D d'une interface solide-fluide soumise au transfert en solution		111
1.	Stabilité linéaire	112
1.1	Perturbation de la géométrie	112
1.2	Représentation d'une surface en 3D	113
1.3	Perturbation des autres champs	114
1.4	Linéarisation des conditions aux limites et des états initiaux de contraintes	115
1.5	Solution du problème élastique 3D de premier ordre	116
2.	Analyse de stabilité linéaire pour la prediction de l'évolution de la morphologie par transfert en solution	117
2.1	Les équations du transfert en solution	117
2.2	L'exposant de stabilité	118
2.3	Résultats de l'analyse de stabilité	119
3.	Application aux expérimentations de den Brok et Morel	121
3.1	Les essais de den Brok et Morel	121
3.2	Les prédictions d'instabilité	122
4.	Conclusion	126
Conclusion générale et perspectives		127
A Double linéarisation		131
B Les méthodes de lissage des contraintes en éléments finis		135
C Élément de calcul de l'approximation de la force thermodynamique		137
D Contrainte macroscopique - Moyennage des contraintes		139
E Les vecteurs de Galerkin		143

Table des figures

I.1	Microphotographies de grains de quartz avec des contacts concavo-convexes (A) et de grains suturés (B). Natal Group ordovicien, Afrique du Sud. Source : Liu, 2003 [44]	23
I.2	Microtextures de grès de la zone sub-andine du Sud de la Bolivie. Tiré de Labaume et Moretti 2001 [35]	23
I.3	Grain de Quartz poinçonné par un autre par transfert en solution. Grès miocène de la zone sub-andine du Sud de la Bolivie. Tiré de Gratier et al 1999 [20]	24
I.4	Stylolites à deux échelles différentes. Source : Liu, 2003[44]	25
I.5	Représentation schématique (a) et photographie (b) de la coupe d'un galet de calcaire du Miocène près de Grenoble. Source : Gratier et al 1999 [20]	25
I.6	Galet présentant des puits de dissolution. Source : Liu, 2003 [44]	25
I.7	Microtextures de grès de la zone sub-andine du Sud de la Bolivie. Variation de la porosité avec la profondeur. Source : de Labaume et Moretti (2001)[35]	26
I.8	Microstructures dans les zones de failles (sans cicatrisation). Étude des fractures. Source : Labaume et Moretti 2001 [35]	27
I.9	Zones de failles, groupe de bandes de glissement (Cataclastic Slip Band). Source : Labaume et Moretti, 2001 [35]	28
I.10	Bandes de glissement (Cataclastic Slip Band) dans un grès poreux d'une zone de faille. Source : Labaume et Moretti, 2001 [35]	28
I.11	Zone de cisaillement de type Riedel, résultant de fractures transgranulaires. Source : La- baume et Moretti, 2001 [35]	29
I.12	Représentation schématique des processus du transfert en solution et des essais de poin- çonnement. Source : Gratier et al. 2004 [22]	32
I.13	Diagramme schematique du dispositif expérimental de compaction d'agrégat. Source : Nei- meijer et al. [50]	33
I.14	Poinçonnement de monocristaux. Dissolution aux bords du contact. Source : Gratier et al. 1993b [19]	35

I.15	Poinçonnement de monocristaux. Deux types de dissolution. Source : Gratier et al. 1993b [19]	35
I.16	Dissolution sur les faces libres d'un cristal et rugosité. Source : Den Brok et Morel, 2001 [9]	36
I.17	Microstructure de halite après essai de compaction. Source : Schutjens 1991 [59]	40
I.18	Modèle de deux grains en contact, soumis à une contrainte de compression macroscopique effective, avec transfert en solution intergranulaire	42
I.19	Le modèle de Bathurst [4]. Dissolution marginale.	43
I.20	Le modèle de Weyl [71]. Dissolution et diffusion dans un film fluide intergranulaire.	43
I.21	Le modèle en îles et chenaux. Dissolution et diffusion dans un contact en îles et chenaux. .	43
I.22	(a) Modèle de Weyl : le film fluide visqueux assure la continuité des contraintes normales et de cisaillement. (b) Modèle en îles et chenaux : la contrainte est transmise par les «îles». Le fluide contenu dans les chenaux a les mêmes propriétés que le fluide du pore. Source : Shimizu, 1995 [62].	44
I.23	Le modèle de à l'échelle du grain : le contact constitué d'un réseau d'îles et chenaux est représenté par une zone limitée par deux interfaces planes entre les grains et le fluide du contact. La troncature des grains équivaut à un raccourcissement d'un facteur λ	48
I.24	Schématisation d'un élément de la zone de contact par un anneau de rayon r et de largeur dr	50
II.1	Compaction par transfert en solution de deux grains identiques en contact. La zone de contact d'épaisseur δ contient du fluide qui varie selon la position r ($\mu(r)$). Le pression de fluide du pore agit sur la surface libre du grain (le potentiel chimique du fluide du pore est noté μ). Les grains sont soumis à une contrainte macroscopique de compression et le long du contact, à la contrainte normale σ_n	55
II.2	Le grain dans sa configuration courante.	56
II.3	Les différentes configurations de l'analyse de perturbation géométrique.	57
II.4	Les problèmes aux limites en calcul élastique. (a) Sphère tronquée soumise à un chargement uniformément réparti q . (b) La même géométrie avec un chargement linéaire. (c) Talus soumis à un chargement uniformément réparti.	61
II.5	Problèmes de demi-espace supportant deux types de chargement : (a) uniformément réparti et (b) linéairement réparti.	63
II.6	Problème d'un demi-espace limité par un talus. La charge s'étend à l'infini à droite.	64
II.7	Problème d'un coin soumis à un chargement sur ses faces.	65
II.8	La contrainte de cisaillement de surface dans le cas du talus semi-infini.	65
II.9	La contrainte de cisaillement à la surface dans le cas d'un chargement uniforme. Représentation des isovaleurs en constant par élément. La contrainte représentée dans les éléments de la dernière rangée est celle calculée au points de Gauss de surface.	69

II.10 La contrainte de cisaillement de surface dans le cas d'un chargement uniforme. (a) Contrainte sur la surface, déterminée en trois points de Gauss, (b) en un point de Gauss.	70
II.11 Cas de la sphère tronquée sous chargement uniformément réparti. Contrainte de cisaillement de surface calculée sur 1 et 3 points d'intégration.	73
II.12 La contrainte de cisaillement de surface sur un talus.	74
II.13 La contrainte de cisaillement de surface dans le cas d'une sphère tronquée et un chargement linéairement réparti.	74
II.14 Distribution de la contrainte intergranulaire - Cas d'une sphère tronquée. (a) Dans le cas d'un maillage à 73×110 éléments. (b) Dans le cas d'un maillage à 90×110 éléments.	76
II.15 Distribution de la contrainte intergranulaire - Cas d'un talus. (a) Maillage à 70×70 éléments serrés dans le coin (fig.II.17). (b) Maillage à 8100 éléments répartis dans 4 blocs générés différemment (fig.II.18)	77
II.16 Maillage de sphère tronquée à 73×110 éléments.	78
II.17 Maillage du talus à 70×70 éléments. Les éléments sont concentrés dans la zone de singularité en déplaçant les macro-noeuds intermédiaires.	78
II.18 Maillage du talus à 8100 éléments. Le maillage est généré à partir de 4 sous-domaines pour permettre de raffiner une partie seulement du maillage, en l'occurrence ici la zone de singularité.	79
II.19 Maillage radial avec des éléments triangulaires, 9638 éléments.	79
II.20 Distribution de la contrainte de cisaillement dans le cas où on applique en plus de la charge répartie, une pression de pore (cas de la sphère tronquée). (a) Un maillage constitué d'éléments rectangulaires (73×110). (b) Un maillage constitué d'élément triangulaires (9758 éléments).	81
II.21 Contrainte de cisaillement (chargement uniforme sur la face supérieure et pression de fluide sur le côté). Maillage constitué 73×110 éléments rectangulaires.	82
II.22 Contrainte normale (chargement uniforme sur la face supérieure et pression de fluide sur le côté). Maillage constitué 73×110 éléments rectangulaires.	82
II.23 Contrainte de cisaillement (chargement uniforme sur la face supérieure et pression de fluide sur le côté). Maillage radial constitué d'éléments triangulaires.	83
II.24 Contrainte normale (chargement uniforme sur la face supérieure et pression de fludie sur le côté). Maillage radial constitué d'éléments triangulaires.	83
II.25 Agrandissement de la zone de contact. Vitesses non-matérielles à travers les deux interfaces grain/fluide.	87
II.26 Distribution de la contrainte intergranulaire à chaque itération	96
II.27 La différence $\sigma_n^{i+1} - \sigma_n^i$ entre deux itérations.	96
II.28 Distribution de la contrainte intergranulaire à chaque itération (maillage avec des éléments triangulaires.	97

II.29 Isovaleurs de la contrainte normale correspondant à la condition aux limites «approchée». Maillage radial avec éléments triangulaires.	97
II.30 Isovalue de la contrainte de cisaillement correspondant à la condition aux limites «approchée». Maillage radial avec éléments triangulaires.	98
II.31 Le déplacement de l'interface correspondant à la condition aux limites «approchée». Les flèches représentent le déplacement aux noeuds. Les valeurs sont adimensionnelles et sont à multiplier par le diamètre du grain pour avoir le déplacement en m	98
II.32 Évolution du taux de convergence dans le temps pour différentes tailles de grain. Profondeur 4km, $T=400K$	104
II.33 Évolution des temps caractéristiques et de leur différence en fonction de la profondeur et de la taille de grain.	105
II.34 Différentes distributions de la contrainte intergranulaire en fonction du diamètre du grain d . 106	106
II.35 Courbes de compaction, ou variation de la quantité de compaction dans le temps, pour différentes tailles de grain.	106
II.36 Évolution de l'état de contrainte à mesure que le grain s'aplatit. Modification du gradient le long de l'interface à mesure que la compaction avance. $d = 1 \cdot 10^{-3}m$	107
II.37 Évolution de l'état de contrainte à mesure que le grain s'aplatit. Modification du gradient le long de l'interface à mesure que la compaction avance. $d = 1 \cdot 10^{-2}m$	108
II.38 Différentes distributions de la contrainte intergranulaire à des temps différents, et donc à des facteurs de racourcissement λ différents. $d = 1 \cdot 10^{-2}m$	109
III.1 La géométrie de l'interface perturbée entre la phase solide et la phase fluide.	113
III.2 Isocontours des contraintes verticales $\bar{\sigma}_{22}$, en adimensionnel.	124
III.3 Angle de la direction de la contrainte de compression maximale.	124
III.4 Distribution des longueurs d'ondes sur la surface.	125
III.5 Distribution du taux de croissance dominant $\Lambda \times 10^{12}$	125
D.1 La cellule unitaire	140

Notations

- L'indice S est associé au soluté, s au solide.
- En règle générale, sauf mention contraire, les indices en N majuscule ou en X majuscule sont relatifs à la configuration de référence, les lettres minuscules correspondantes sont relatives à la configuration courante.
- Les termes entre crochets tel que $[[v_n]]$ sont des sauts à travers l'interface solide/fluide.
- Les vecteurs et les tenseurs sont représentés par des caractères gras.

Notations	Définition
a	Largeur de la surface de contact
$C(a)$ ou $C_S(a)$	Concentration de soluté dans le fluide du pore
C_0	Concentration d'équilibre
$C(r)$ ou $C_S(r)$	Concentration de soluté le long du joint de grain
d	Diamètre du grain
D	Diffusivité moléculaire
E	Module d'Young
f^s	Énergie libre d'Helmhotz
g	Accélération de la pesanteur
h	Profondeur dans la croûte terrestre
H	Hauteur du solide dans les problèmes aux limites
J_n^{gb}	Flux de masse de dissolution dans le joint de grain
J_r^{gb}	Flux de masse de diffusion dans le joint de grain
k	Constante de Boltzmann
K^{gb}	Coefficient phénoménologique de dissolution
M_s	Masse molaire du quartz
N_A	Nombre d'Avogadro
p_f	Pression de fluide
r	Rayon
T	Température absolue

$v_{n/N}$	Vitesse non-matérielle dans la configuration courante/de référence
\bar{V}^s	Volume molaire du quartz
δ	Épaisseur du joint de grain
λ	Facteur de raccourcissement du grain
$\dot{\lambda}$	Taux de raccourcissement du grain
μ ou μ_s	Potentiel chimique du soluté dans le fluide du contact
$\mu(a)$ ou $\mu_s(a)$	Potentiel chimique du soluté dans le fluide du pore
μ_n^s	Composante normale du tenseur de potentiel chimique du solide
$\bar{\mu}, \bar{\mu}_n^s$	Moyenne des potentiels chimiques sur l'aire de la zone de contact
ψ^s	Densité d'énergie d'Helmholtz
ρ^s	Densité de masse du solide
ρ_0^s	Densité de masse de référence du solide
ρ^f	Densité de masse du fluide
σ	Tenseur de contraintes de Cauchy
Ω^s	Volume moléculaire du quartz

Résumé

Le transfert en solution est un mécanisme de déformation des roches sédimentaires, qui se traduit par une réduction de porosité et une compaction de la roche. A de grandes profondeurs d'enfouissement (environ 3km), les minéraux des grains se dissolvent dans le fluide du contact intergranulaire, sont transportés par diffusion dans le contact vers le pore, et se déposent sur les surfaces libres des grains. Notre étude est basée sur un modèle de deux grains en contact ayant subi un début de dissolution, et modélisés par deux sphères tronquées. Le contact entre deux grains est simplement représenté par une zone limitée par deux interfaces planes, bien que cette zone soit en réalité constituée de contacts solides et de fluide libre interconnecté, structure connue sous le nom d'îles et chenaux. A cette échelle, une loi de contact phénoménologique permet de relier la vitesse de raccourcissement du grain à la force thermodynamique du transfert en solution, qui est fonction de l'énergie libre d'Helmholtz, de la contrainte normale intergranulaire, et d'un terme relatif à la diffusion. La contrainte normale intergranulaire peut être ainsi exprimée en fonction des quantités relatives à la dissolution et à la diffusion, et en fonction du taux de raccourcissement des grains. Cette contrainte intergranulaire constitue la condition aux limites sur l'interface solide/solide, du problème mécanique. La pression de fluide est la condition de chargement appliquée sur l'interface solide/pore.

Une approche analytique de la résolution de ce problème permet de comprendre que la singularité en contrainte au point de jonction entre la zone de contact et le pore, a pour origine la discontinuité du chargement, entre le chargement sur l'interface solide/solide (la contrainte normale intergranulaire), et la pression de fluide sur l'interface solide/pore. Cette singularité est retrouvée par les calculs éléments finis.

La méthode numérique permet de constater que l'approximation qui consiste à négliger l'énergie libre d'Helmholtz dans la force thermodynamique est valable pour les différentes tailles de grains considérées dans ce travail (entre 0.1mm et 2mm). On montre également que la distribution de la contrainte intergranulaire est de moins en moins parabolique lorsque le grain s'aplatit. Il en est de même lorsque la taille de grain est plus faible, donc lorsque la diffusion est le processus dominant.

La loi de fluage (approchée) qui donne la vitesse de raccourcissement du grain en fonction de la force thermodynamique (sans l'énergie d'Helmholtz) permet de constater que plus la taille de grain diminue, plus le processus de diffusion est rapide : la dissolution est dans ce cas le mécanisme qui gouverne le transfert en solution.

A une échelle plus petite, on s'intéresse à la stabilité d'une interface solide/fluide en faisant une analyse de stabilité en 3D. Le mode d'instabilité dominant est une onde dont le front est perpendiculaire à la direction de la contrainte effective de compression maximale. Les résultats de cette analyse sont cohérents avec les observations expérimentales en ce qui concerne l'orientation et la longueur d'onde de l'instabilité. La non-conformité concernant les gradients des

longueurs d'ondes et le taux de croissance sont discutés.

Abstract

The intergranular pressure solution is a mechanism of deformation of sedimentary rocks, which results in a reduction of porosity and a compaction of the rock. With great depths of bury (approximately 3km), the minerals of the grains dissolve in the fluid of the intergranular contact, are transported by diffusion in the contact towards the pore, and redeposed on the free faces of the grains. Our study is based on a model of two grains in contact having undergone a beginning of dissolution, and modelled by two truncated spheres. The contact between two grains is simply represented by a zone limited by two plane interfaces, although this zone actually consists of solid contacts and inter-connected free fluid, known as “island and channel” structure.

At this scale, a phenomenologic law of contact links the rate of shortening of the grain to the thermodynamic force of intergranular pressure solution, which is a function of the Helmholtz free energy, the intergranular normal stress, and a term corresponding to the diffusion. The intergranular normal stress can be thus expressed as a function of the quantities relative to the dissolution and the diffusion, and the rate of shortening of the grains. This intergranular stress constitutes the boundary condition on the solid/solid interface of the mechanical problem. The load applied at the solid/pore interface is the fluid pressure.

An analytical approach of the resolution of this problem makes it possible to understand that the singularity in stress at the intersection point of the contact zone and the pore, is due to the discontinuity of loading condition between the intergranular normal stress, the loading on the solid/solid interface, and the fluid pressure on the interface solid/pore fluid. This singularity is found by finite element calculation.

The numerical method allows to note that the approximation which consists in neglecting the Helmholtz free energy term in the thermodynamic force is valid for the various sizes of grains considered in this work (between 0.1mm and 2mm). It is also shown that the distribution of the intergranular normal stress is less parabolic when the grain is flattened. It is the same when the size of grain is smaller, therefore when the diffusion is the dominant process.

The (approximate) creep law which gives the shortening rate of the grain as a function of the thermodynamic force (without the Helmholtz free energy term) makes us note that the more the grain size decreases, the more the process of diffusion is fast : dissolution is in this case the mechanism which controls the intergranular pressure solution.

At a smaller scale, we focus on the stability of a solid/fluid interface by a stability analysis in 3D. The dominant mode of instability is a wave which is perpendicular to the direction of the maximal compressive effective stress. The results of this analysis are coherent with experimental observations with regard to the orientation and the wavelength of instability. Nonconformity concerning the gradient in wavelengths and the growth rate are discussed.

Introduction générale

Les roches sédimentaires constituent la couche superficielle de la croûte terrestre. Elles subissent durant leur formation plusieurs processus : l'altération superficielle, le transport, la sédimentation et la diagénèse. Cette dernière est un ensemble de processus chimiques et mécaniques, à la base de la transformation des sédiments en roches. Cette transformation commence en superficie et se poursuit tout au long de l'enfouissement de la roche. En profondeur, cette dernière subit le processus diagénétique chimique de dissolution-cristallisation. C'est un important mécanisme de déformation de la croûte terrestre, au même titre que les déformations cataclastiques et plastiques. Il est également connu sous le nom de **transfert en solution**, et se traduit par une dissolution des minéraux du grain dans le fluide interstitiel, et par un transfert de matière.

Le transfert en solution peut être décrit comme un mécanisme à trois étapes : la dissolution aux points de contact entre les grains, le transport par diffusion des minéraux dissous dans le fluide du contact et/ou dans le fluide du pore, et leur redéposition sur les faces libres des grains. Chacun de ces trois processus a un temps qui lui est caractéristique ; le processus ayant le temps le plus grand est celui qui gouverne le transfert en solution.

La dissolution aux points de contacts intergranulaires est due à une forte concentration de contrainte effective en ces points, qui augmente la solubilité du grain. La dissolution ne se déclenche donc qu'à une certaine profondeur lorsque le poids des sédiments sus-jacents exerce une charge assez élevée. Elle ne s'active par exemple qu'à de grandes profondeurs comprises entre 3 et 8 km. À raison d'un gradient géothermique de 30 °C par km, cela correspondrait à une température supérieure à 90 °C.

La diffusion est entraînée par une différence de potentiels chimiques du soluté (présent dans le fluide), entre l'endroit de dissolution et celui de la redéposition.

La redéposition des matériaux dissous se fait dans les endroits à faible contrainte, et où le fluide est supersaturé.

A l'échelle du grain, le transfert en solution entraîne une déformation de celui-ci et une cimentation dans le pore. A une échelle plus grande, il aboutit à un ré-arrangement de l'ensemble des grains, et à une compaction de la roche, liée à une réduction de porosité.

Cette compaction peut être étudiée en prenant un élément de volume représentatif, tel un arrangement de grains, et en modélisant le transfert en solution au contact entre deux grains appartenant à l'agrégat. L'utilisation de l'outil numérique permet d'étudier l'avancée de cette compaction par transfert en solution dans le temps, et permet d'étudier l'influence des différents paramètres sur la déformation par transfert en solution.

Une présentation générale du transfert en solution, basée sur une étude bibliographique, est faite dans le **premier chapitre**.

La première section de ce chapitre est une présentation du transfert en solution tel qu'il se présente dans la nature. Elle consiste à présenter les preuves du transfert en solution, et à apporter une connaissance du phénomène à travers son observation.

La deuxième section est consacrée à une revue des méthodes et des résultats expérimentaux, qui permettent de mieux comprendre le phénomène, et de valider certains modèles théoriques, ainsi que de déterminer les forces entraînant le transfert en solution. Un accent particulier sera mis sur la structure du joint de grain. Cette structure constitue une hypothèse essentielle de notre étude. En effet, les caractéristiques du joint de grain dictent le type de mécanisme de transfert en solution, en particulier celui d'une possible diffusion des matériaux dans le joint de grain.

Ces différents types de mécanismes, sont discutés dans la troisième section de ce premier chapitre. Nous y verrons également la détermination des forces entraînant le transfert en solution, par l'application de la thermodynamique des processus irréversibles. À chacun des trois processus (dissolution, diffusion et précipitation) correspond une force thermodynamique et une loi phénoménologique qui relie le flux de masse à la force. Les forces qui entraînent la dissolution et la diffusion sont les différences de potentiels chimiques : entre le solide et le fluide pour la première, et entre l'intérieur de la zone de contact et l'extérieur (le pore) pour la deuxième. La première force fait intervenir l'énergie libre d'Helmholtz du solide, de par la dépendance du potentiel chimique du solide sur celui-ci. À l'échelle d'un volume élémentaire représentatif, les différentes modélisations théoriques, et en particulier un modèle de compaction par transfert en solution, sont récapitulées.

Le **deuxième chapitre** de cette thèse est consacré à l'étude de la compaction d'un agrégat de grain par transfert en solution. L'hypothèse importante de cette étude consiste en une modélisation géométrique de l'agrégat par un arrangement périodique de sphères tronquées, dont les troncatures constituent les surfaces de contact intergranulaires. L'hypothèse d'un état

stationnaire dans la zone de contact découle de l'hypothèse de périodicité de l'arrangement. Il en est de même de la condition de surfaces de contact planes. Les grains se dissolvent dans le fluide du contact et les minéraux dissous sont transportés par diffusion vers le pore. La variation de la contrainte normale le long du contact, induit une différence de solubilité des minéraux et produit un gradient de concentration dans la zone de contact, qui entraîne la diffusion. L'étude est menée à l'aide d'un problème aux limites dont la géométrie est constituée de la moitié de la sphère tronquée, pour des raisons de symétrie. Les forces agissant sur le solide, élastique linéaire isotrope, sont la contrainte normale à la surface de contact (la face tronquée) et la pression de pore sur les faces latérales du grain. Les hypothèses de base, le problème aux limites, et la formulation mécanique du problème, sont présentés dans la première section. La résolution du problème aux limites est faite à l'aide de la méthode des éléments finis.

Un premier problème purement élastique est d'abord traité. Il a pour but d'étudier la réponse mécanique du modèle géométrique choisi (sphère tronquée), à un chargement uniforme normal à la surface de troncature. Une approche analytique de ce premier problème va permettre une validation de la méthode numérique en comparant les résultats obtenus par les deux méthodes (numérique et analytique). Puis, un test sur différents types d'éléments et de maillage sera fait, afin de choisir l'élément et le maillage les mieux adaptés à notre problème.

Dans la deuxième section, on rappelle les équations du problème et on décrit le modèle de compaction par transfert en solution à l'échelle du grain. Les centres des deux grains en contact convergent, et le taux de convergence est déterminé en fonction des variables relatives au transfert en solution. En faisant des moyennes sur les contraintes, ce taux est déterminé en fonction des variables macroscopiques de compaction. On abordera dans cette section un moyen numérique de validation d'une approximation souvent faite dans les modèles de transfert en solution qui consiste à négliger l'énergie d'Helmholtz dans la force thermodynamique. Une fois ce modèle approché validé, on se consacre à l'application de celui-ci à l'étude de la compaction de l'arrangement de grain, en étudiant l'évolution du taux de convergence dans le temps. La principale question est : quand est-ce que le transfert en solution s'arrête ? On étudiera également la distribution de la contrainte normale intergranulaire en fonction des différents paramètres, comme la taille de grain ou le facteur de raccourcissement du grain. Ces études sont faites à l'aide du problème aux limites qui aura été présenté à la première section. La méthode des éléments finis est utilisée dans la résolution de ce problème, et dans la simulation de la déformation du grain par transfert en solution.

Le transfert en solution induit une modification de la morphologie de l'interface. Des travaux expérimentaux sur des cristaux de chlorate de sodium plongé dans une solution non saturée et soumis à une contrainte de compression, ont montré l'existence de rainures bien marquées sur les faces libres du cristal. Ces rainures sont le résultat d'une instabilité de la géométrie due au

transfert en solution. Dans un **troisième chapitre**, en référence à ces expériences (Morel et den Brok, 2001 [48]) sur des plaques trouées soumises à des déformations élastiques, on détermine par une analyse de stabilité linéaire en 3D la direction des modes dominants de perturbations. On comparera les résultats de ces calculs avec les observations expérimentales de den Brok et Morel, 2001.

ÉTUDE BIBLIOGRAPHIQUE - ETAT DES CONNAISSANCES

1. Introduction

La compréhension du phénomène de transfert en solution a connu une large avancée ces dernières années. Les observations naturelles sont abondantes dans la littérature et ont validé certaines approches théoriques, également nombreuses. Les travaux expérimentaux sont moins riches, mais on assiste tout de même ces derniers temps, à un développement de ceux-ci. Il est en effet, assez difficile de reproduire en laboratoire un phénomène dont l'échelle de temps dans la nature est l'échelle géologique.

Les différents processus du transfert en solution, qui sont la dissolution, la diffusion et la précipitation, sont mis en évidence à partir des observations naturelles. Leur revue permet de voir le transfert en solution d'un point de vue géologique, en tant que responsable de la déformation des roches, de la réduction de porosité, ou en tant que mécanisme important du processus diagénétique du transfert en solution (Labaume et Moretti, 2001 [35]). Elle permet également d'avoir un point de vue pétrographique (Houseknecht, 1984 [30], 1987 [31], 1988 [32]), et de connaître les différentes applications, notamment sur le transport d'hydrocarbures (Labaume et al. 2000 [36], Labaume et al. 2001 [37]) ou sur la génération de pétrole (Leythaeuser et al., 1995 [43]).

Les conséquences du transfert en solution tant au niveau du grain qu'au niveau d'un agrégat ont été reproduites expérimentalement, par le poinçonnement de monocristaux (Gratier, 1993a,b [18, 19], Tada et Siever, 1986 [67]) ou la compaction d'agrégats de grains (Niemeijer et al., 2002[50], Schutjens, 1991 [59]). Les vitesses de déformations dans la croûte terrestre étant difficile à reproduire en laboratoire (échelles de temps très différentes), la plupart des essais sont effectués dans des conditions extrêmes et avec des matériaux solubles. Les résultats servent de base à la discussion de nos résultats numériques, et de base aux modèles théoriques. Ces travaux sont aussi à l'origine d'une détermination des forces entraînant chacun des processus

du transfert en solution.

La modélisation du transfert en solution passe par la connaissance des relations thermodynamiques d'équilibre entre deux phases (Gibbs 1877 [17], Lehner et Bataille, 1984/85 [40], Lehner, 1990 [38]). Celles-ci sont donc récapitulées synthétiquement, et suivies de la détermination des forces thermodynamiques, en fonction du modèle de joint de grain choisi. Les lois phénoménologiques qui gouvernent chacun des trois processus sont passées en revue par l'intermédiaire d'une analyse des études théoriques antérieures sur le transfert en solution. Ces modèles ainsi que les comportements microphysiques liés au transfert en solution sont discutés. On s'intéresse ensuite à la dérivation d'un modèle de compaction chimique basé sur une hypothèse de joint de grain mouillé (Lehner, 1995 [39], Lehner et Leroy, 2004 [41]).

2. Les observations naturelles

Les observations naturelles ont permis de mettre en évidence le transfert en solution. Elles témoignent de l'occurrence du phénomène, et nous éclairent sur le déroulement de chaque processus (dissolution, diffusion, précipitation) ainsi que ses conséquences. Elles permettent ainsi de comprendre en quoi ce phénomène est responsable d'une déformation de la roche. Les observations naturelles permettent également d'étudier le lien entre le transfert en solution intergranulaire et la réduction de porosité des roches, par l'analyse des microstructures. Certaines des observations permettent également d'étudier les facteurs qui déclenchent le transfert en solution.

Avant d'aborder un aspect théorique du transfert en solution, intéressons-nous d'abord à ces travaux d'observation. Cela nous permet de bien cerner le phénomène et d'avoir une idée sur ses possibilités d'applications.

2.1 Les marqueurs naturels - Le transfert en solution en tant que mécanisme de déformation

Les étapes du transfert en solution décrites dans l'introduction de cette partie sont mises en évidence sur les observations de deux grains en contact imbriqués l'un dans l'autre. Ces observations sont possibles grâce à l'utilisation de microscope à balayage. Les contacts observés peuvent être concavo-convexes ou suturés (Houseknecht, 1988 [32], Liu, 2003 [44]). La figure I.1 montre ces types de contact sur des grains de quartz appartenant à des roches sédimentaires siliciclastiques (profondeur d'enfouissement comprise entre 4800 et 7200m). Les grains suturés témoignent d'un stade avancé du transfert en solution. Labaume et Moretti, 2001 [35] ont observé sur des échantillons de grès prélevés dans la zone sub-andine du Sud de la Bolivie,

les mêmes contacts concavo-convexes résultants des trois processus suivants (Fig. I.2) : la dissolution aux points de contact intergranulaire qui résulte en un raccourcissement des grains ; le transport des minéraux dissous et la précipitation de ceux-ci qui entraîne un accroissement secondaire des faces libres du grain.

Les contacts observés sont horizontaux. Cela suggère une déformation uniaxiale résultant de la pression lithostatique. D'autres, verticaux (voir fig. I.3), résultent probablement d'une contrainte tectonique. Une discussion sur l'origine du transfert en solution, entre une origine lithostatique et une origine tectonique peut être retrouvée dans Houseknecht, 1988 [32].

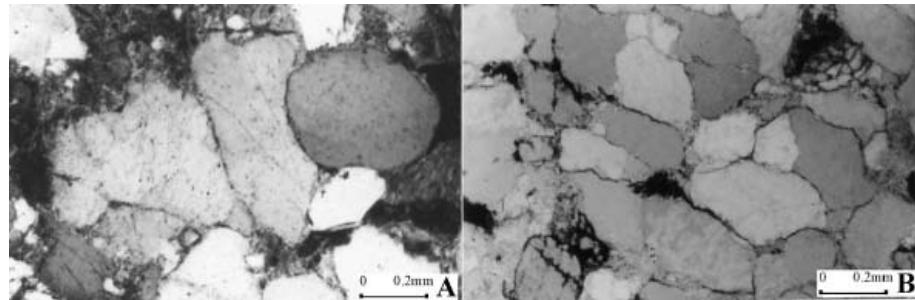


FIG. I.1 – Microphotographies de grains de quartz avec des contacts concavo-convexes (A) et de grains suturés (B). Natal Group ordovicien, Afrique du Sud. Source : Liu, 2003 [44]



FIG. I.2 – Microtextures de grès de la zone sub-andine du Sud de la Bolivie. On y voit les détails du transfert en solution entre deux grains. (a) dissolution au point de contact des grains liée à un raccourcissement normal au contact ; (b) dépôt de quartz ; (c) joint de grain d'origine avec couche d'oxyde de fer et inclusions de fluide ; (d) fractures intragranulaires cicatrisées (marquées maintenant par un alignement d'inclusions de fluide) liées à un raccourcissement normal au contact. Source : Labaume et Moretti 2001 [35]

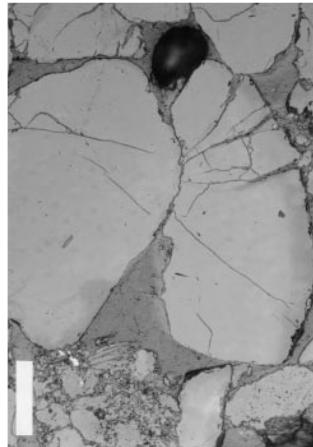


FIG. I.3 – Grain de Quartz poinçonné par un autre par transfert en solution. Grès miocène de la zone sub-andine du Sud de la Bolivie. Barre d'échelle = 0.1mm. Source : Gratier et al 1999 [20]

Un autre marqueur du transfert en solution est le stylolite. Cette marque (fig. I.4) résulte de la dissolution d'une partie de la roche sous la pression des sédiments sous-jacents, et se traduit par l'interpénétration de deux domaines de la roche, initialement limités par une surface plane (Gratier, 1993b [19]). Ces stylolites peuvent ainsi servir de marqueurs de direction de contrainte principale.

A une plus grande échelle, les galets de calcaire comme ceux des figures I.5 et I.6 présentent des «puits» (creux) résultant de la dissolution. Ce sont d'ailleurs les premiers marqueurs du transfert en solution qui ont été découverts.

La profondeur d'enfouissement estimée de ces galets ainsi que celle des microstructures présentées plus haut est comprise entre 3 et 8km. Ces observations sont les preuves que le transfert en solution est un processus diagénétique. On constate que le transfert en solution s'active à des profondeurs d'enfouissement importantes. Par exemple, dans la zone sub-andine de la Bolivie, le transfert en solution est plus important dans les formations datant du Mésozoïque, entre 3 et 8km de profondeur d'enfouissement (Labaume et Moretti, 2001 [35]).

L'importance du transfert en solution en tant que mécanisme de déformation a été reconnue et étudiée ces dernières décennies par des observations naturelles (Gratier, 1993a [18], Houseknecht, 1987 [31], Wintsch, 2002 [72]). La contribution du transfert en solution dans la compaction (diagénétique) de la roche a été établie, entre autres, par le lien entre la réduction de porosité et le transfert en solution intergranulaire.

Les différents processus de réduction de porosité de la roche (Houseknecht, 1988[32]) sont la compaction mécanique et la compaction chimique (dissolution intergranulaire et cimentation).

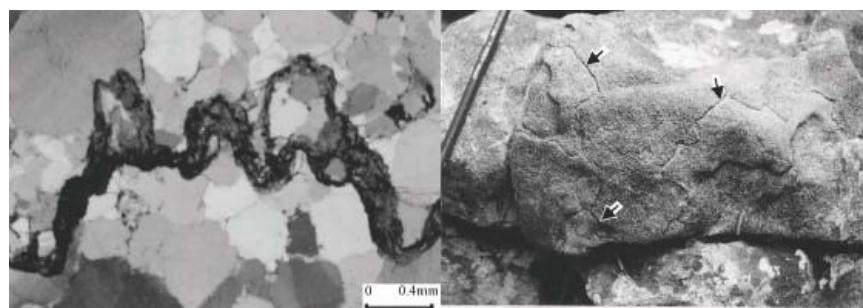


FIG. I.4 – Stylolites à deux échelles différentes. Formation Mkunya, Afrique du Sud. Source : Liu, 2003[44]

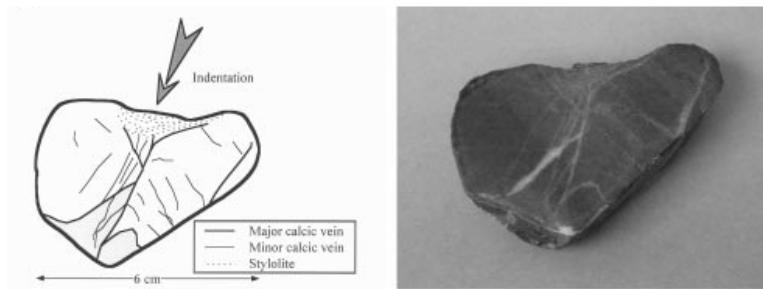


FIG. I.5 – Représentation schématique (a) et photographie (b) de la coupe d'un galet de calcaire du Miocène près de Grenoble. Source : Gratier et al 1999 [20]



FIG. I.6 – Galet présentant des puits de dissolution. Natal Group, formation Eshowe, Afrique du Sud. Source : Liu, 2003 [44]

Cette réduction de porosité est liée à la diagenèse de la roche sédimentaire. La comparaison de l'importance des deux mécanismes de compaction (mécanique et chimique) a été faite dans le grès de la zone sub-andine du sud de la Bolivie (Labaume et Moretti, 2001 [35]) : la porosité est élevée dans un échantillon dont la profondeur d'enfouissement est faible (1000m) et la déformation y est principalement due à une compaction mécanique (fig. I.7A) ; à mesure que la profondeur d'enfouissement augmente, la réduction de porosité s'accentue, et les grains imbriqués les uns dans les autres (fig.I.7B) suggèrent que cette réduction est due au transfert en solution (compaction chimique).

De même, selon Houseknecht, 1988 [32], sur trois des quatre grès qu'il a étudié, la compaction chimique est plus importante que la compaction mécanique dans le rôle de la réduction de porosité (profondeur d'enfouissement comprise entre 3 et 5,5km). Dans les deux cas, la quantité de dissolution intergranulaire augmente avec la profondeur d'enfouissement.

Pour Marfil et al., 1996 [45], dans le Buntsandstein de Siguenza (Espagne), sur la perte de porosité totale, la compaction mécanique est responsable des 15% et le transfert en solution de 6% (profondeur d'enfouissement estimée à 2600m).

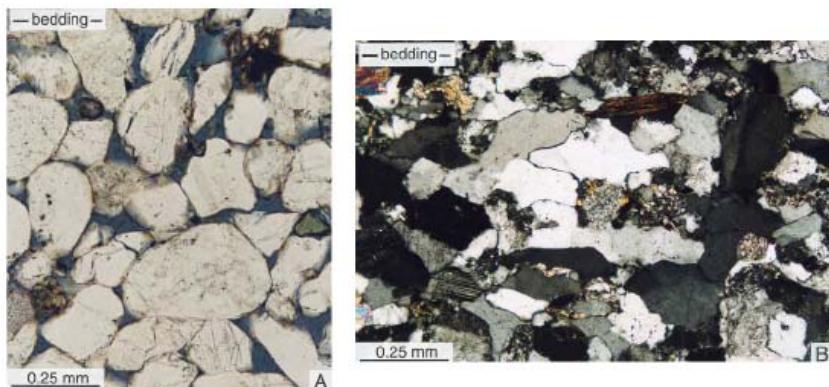


FIG. I.7 – Microtextures de grès de la zone sub-andine du Sud de la Bolivie. (A) A 1km de profondeur. La porosité est élevée : en bleu, les pores et fractures. La compaction est modérée avec quelque zones de contacts de dissolution et de fractures. (B)Jusqu'à une profondeur de 8km. La porosité est faible, et il y a eu compaction chimique : les grains sont imbriqués les uns dans les autres. Source : Labaume et Moretti (2001)[35]

Des interactions entre les différents mécanismes de déformation des roches existent. Ces mécanismes peuvent être regroupées en trois catégories : les déformations plastiques, les déformations cataclastiques, et les déformations par dissolution-cristallisation (transfert en solution) (Gratier, 1993b [19]). Lorsque les déformations cataclastiques sont présentes (par exemple dans

les zones de failles), une interaction entre ces déformations et les déformations par transfert en solution sont observées (Gratier et al., 1999 [20], Labaume et Moretti [35]).

En observant les deux grains imbriqués des figures I.2 et I.3, imbrication due au transfert en solution, on remarque l'existence de fractures à partir des points de contact. Ces fractures peuvent aboutir aux déformations cataclastiques. En effet, les fractures de plus en plus denses aboutissent à une fragmentation des grains. La figure I.8, présentant des échantillons provenant des zones de faille, montre des fractures intragranulaires dans le grès poreux (c'est-à-dire dans le grès plus récent), qui sont dues à la concentration de contraintes aux points de contact. Dans le grès peu poreux, les grains sont plus rapprochés, et l'homogénéité mécanique que présente la roche, font que les fractures peuvent traverser et traversent généralement plusieurs grains. Dans les deux cas, ces fracturations aboutissent, dans les endroits de localisation des déformations, à une fragmentation des grains et à des bandes de glissement (Cataclastic Slip Band), qui sont caractéristiques de la déformation cataclastique (voir figures I.9, I.10, et I.11).

On constate par ailleurs, que le transfert en solution est plus abondant dans les bandes de glissement, c'est-à-dire dans les zones ayant subi les déformations cataclastiques, qu'ailleurs. Les deux mécanismes (transfert en solution et fracturations) fonctionnent en parallèle, et l'existence de microfractures favorise le transfert en solution, en réduisant les chemins de diffusions (ce qui rejoint les observations de Gratier et al. [20]), ainsi que la taille des grains.

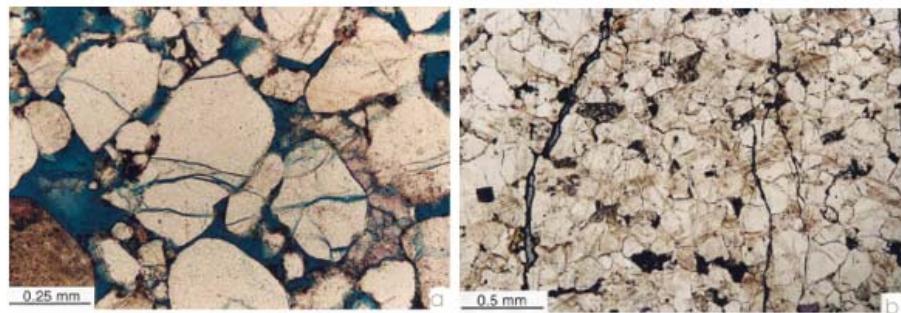


FIG. I.8 – Microstructures dans les zones de failles (sans cicatrisation) : (a) Dans le grès poreux, fractures intragranulaires liées à une concentration de contraintes aux contacts grain-grain ; (b) Dans le grès à faible porosité, fractures transgranulaires. Les fractures sont partiellement remplies d'oxyde de fer, formé probablement récemment près de la surface. Source : Labaume et Moretti 2001 [35]

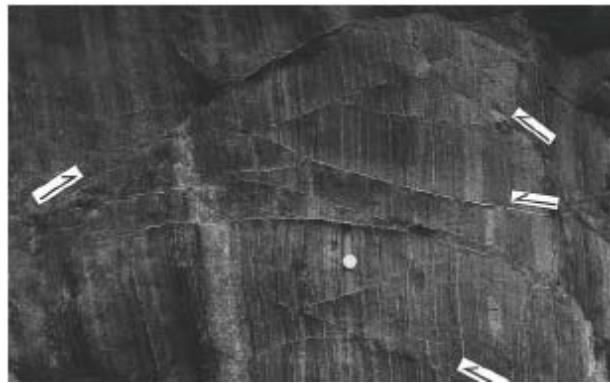


FIG. I.9 – Zones de failles, groupe de bandes de glissement (Cataclastic Slip Band) (échelle : flèche = 1cm). Zone de faille de Piedra Larga (Permien inférieur), Bolivie. Source : Labaume et Moretti, 2001 [35]

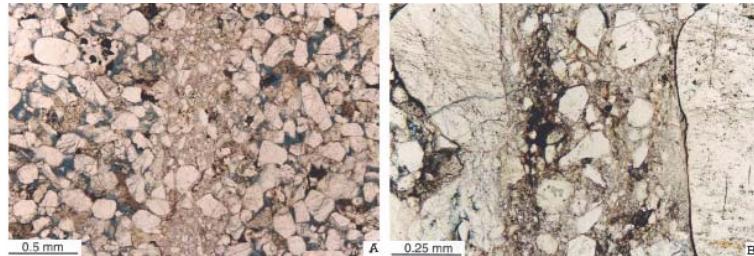


FIG. I.10 – Bande de glissement (Cataclastic Slip Band) dans un grès poreux d'une zone de faille. (A) Taille de grain et porosité plus faible dans la bande de glissement. Zone de faille de Cuello (Tertiaire), Bolivie. (B) Détails d'une bande de glissement. Zone de faille de Rio Azero (Tertiaire), Bolivie. Source : Labaume et Moretti, 2001 [35]

2.2 Applications géologiques de l'étude du transfert en solution

Un certain nombre d'auteurs se sont concentrés sur les capacités des roches sédimentaires à transporter ou à stocker des fluides, (Labaume et al., 2000 [36]), et sur les propriétés des failles en tant que drains ou barrières pour les écoulements d'hydrocarbures (Labaume et Moretti, 2001[35]). Ces propriétés découlent d'une redistribution des matériaux de la roche due au transfert en solution. Dans les failles, l'accroissement secondaire des quartz, résultant d'un transport par diffusion des minéraux dissous et d'une précipitation de ces minéraux, permet de réduire la porosité de la roche et impérméabilise la faille. Dans ce cas, la faille sert de barrière à l'écoulement des hydrocarbures. A une profondeur moins élevée, les failles restent ouvertes (pas d'imperméabilisation) et peuvent servir de drain préférentiel pour les écoulements latéraux de fluide.

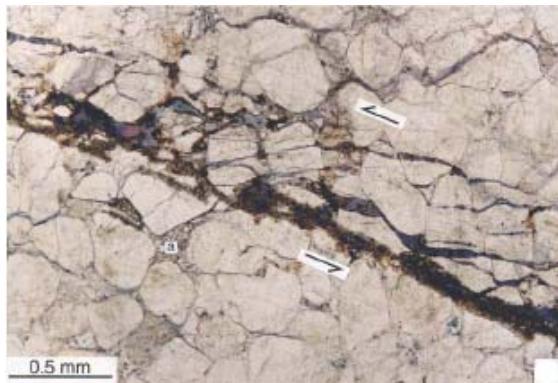


FIG. I.11 – Zone de cisaillement de type Riedel dans un grès à faible porosité, résultant de fractures transgranulaires (s'étendant sur plusieurs grains). Zone de faille de Piedra Larga (Permien Inférieur), Bolivie.
Source : Labaume et Moretti, 2001 [35]

Le rôle du transfert en solution dans le processus de génération et de migration du pétrole durant la diagénèse a été discuté par Leythaeuser et al., 1995 [43]. Leurs travaux ont montré que les stylolites sont très favorables à la génération de pétrole de par leur structure interne et leur composition (kérogène entouré de bords cimentés par du carbone). Une étude de porosité a été menée dans le but de déterminer la capacité de la roche dans la migration de pétrole.

Enfin, parmi les applications géologiques de l'étude du transfert en solution, des travaux ont été menés sur le lien entre le transfert en solution et les séismes. Par exemple, une réduction de porosité par transfert en solution a été observée après un séisme. (Renard et al, 2000 [53]).

2.3 Les facteurs influençant le transfert en solution

Bien que la détermination des facteurs déclenchant le transfert en solution soit surtout expérimentale, quelques observations de microstructures ont aussi permis d'en déterminer quelques-uns. Parmi ces facteurs, on s'intéresse particulièrement à ceux que l'on pourra faire varier dans nos calculs.

Dans le paragraphe précédent, nous avons vu que le transfert en solution est un processus diagénétique. Son déclenchement dépend de la profondeur à laquelle a été enfouie la roche. Ce déclenchement dépend donc d'une certaine condition de température, et de pression. Avec un gradient géothermique de $30^{\circ}\text{C}/\text{km}$, si la profondeur est comprise entre 3 et 8 km, la température à laquelle se déclenche le transfert en solution est de l'ordre de 90°C . L'occurrence de l'imperméabilisation par le quartz par exemple, est contrôlée par la température (Labaume et Moretti, 2001 [35]).

Mise à part la température, le facteur ayant une influence non négligeable sur le transfert en solution, est la taille de grain. Les relations entre taille de grain moyenne et volume de quartz dissous (en pourcentage) sont linéaires, selon les travaux de Houseknecht, 1988 [32]. Le volume de quartz dissous augmente à mesure que la taille de grain diminue. De plus, lorsque celle-ci diminue, les contacts entre grains sont plus nombreux (Houseknecht, 1988 [32]).

Housecknecht [30] a également étudié l'influence de la température, indépendamment de la profondeur (en effet, sur les quatre grès étudiés, à une même profondeur, la température est différente). Elle se traduit par un volume plus important de quartz dissous, à une température plus élevée, pour une même taille de grain.

2.4 Conclusion

Toutes ces observations microscopiques et mésoscopiques permettent de mieux connaître le processus du transfert en solution : la dissolution des minéraux se fait aux endroits du grain où la contrainte est maximale, c'est-à-dire aux points de contact avec d'autres grains ; la redéposition ou précipitation des minéraux, se fait aux lieux de faible contrainte ; le processus de dissolution et celui de la fracturation sont associés ; l'imperméabilisation des fractures est due à la précipitation de matières venant de microstructures voisines et transportées sur une courte distance par diffusion.

L'importance du transfert en solution dans la diagénèse de la roche et dans la déformation de celle-ci a été mise en avant dans cette section, afin de situer le contexte de notre étude.

L'étude du transfert en solution sur le terrain est, dans certains cas, dictée par la recherche de terrains ayant les propriétés nécessaires au transport des fluides (huile, hydrocarbure, etc ...) et par un intérêt pétrophysique (propriétés pétrophysiques des failles). En particulier, l'étude du transfert en solution dans les failles permet de connaître leur capacité en tant que drains ou barrières aux écoulements de fluides. La revue d'une large palette d'applications nous confirme l'importance de l'étude du transfert en solution, celle d'une amélioration des modélisations théoriques et l'intérêt d'une simulation numérique.

Cette revue bibliographique nous a permis d'avoir une première idée sur les différents facteurs responsables du transfert en solution. Ils nous seront utiles par la suite, car ils nous permettront de placer notre étude dans un contexte géologique cohérent. Avant de valider l'influence de ces différents facteurs par une étude numérique, il est intéressant d'enrichir notre analyse par une revue des travaux expérimentaux, qui va faire l'objet de la section suivante.

3. Les travaux expérimentaux

Les travaux expérimentaux ont permis de mieux comprendre le transfert en solution, et de déterminer le rôle des différentes variables comme la température, la pression ou la taille de grain sur la vitesse de déformation de la roche par fluage.

Les expériences consistent à reproduire en laboratoire les différents processus que nous avons vus dans la section précédente (dissolution, diffusion, précipitation). Les taux de déformation dans la nature sont difficiles à reproduire en laboratoire : ils sont de l'ordre de $10^{-11} s^{-1}$, ce qui veut dire qu'il faudrait donc 100 ans pour avoir 3% de déformation (Gratier 1993a[18]). Il résulte de cette difficulté que peu d'essais en laboratoire ont été entrepris durant les premières années de recherche sur le transfert en solution, jusque dans les années 1990 et 2000.

Dans ces essais, les conditions sont choisies de façon à accélérer le processus : augmentation de la température, des contraintes appliquées, diminution de la taille de grain, et choix de matériaux solubles. Il faut donc noter que les valeurs de certains paramètres ne correspondent pas aux conditions réelles rencontrées dans la nature.

3.1 Reproduction en laboratoire du transfert en solution

Deux principaux types d'expériences ont été menés depuis une vingtaine d'années : la mise sous contrainte d'agrégats et le poinçonnement de monocristaux. Le premier consiste à reproduire l'effet de la contrainte lithostatique sur l'activation du transfert en solution dans un agrégat (voir par exemple le dispositif expérimental de Niemeijer et al. [50] , fig.I.13). Le deuxième est la simulation du poinçonnement d'un grain par un autre, qui suppose une dissolution à la surface de contact et la diffusion des matériaux dissous à travers le fluide intergranulaire (fig I.12a). L'appareil de poinçonnement est représenté schématiquement à la figure I.12b.

Ces types d'essais ont servi à déterminer les forces motrices et le processus limitant du transfert en solution, à fournir une meilleure compréhension de la compaction par transfert en solution, et à analyser la stabilité de la géométrie des surfaces libres soumises à dissolution. Ils permettent particulièrement d'étudier l'influence de divers paramètres telles que la température, la pression appliquée, le diamètre du grain... On rencontre également d'autres dispositifs tels que le réacteur à écoulement continu de He et al. [26], ou l'appareil triaxial, qui permettent entre autre, d'étudier l'influence de la concentration du fluide sur le transfert en solution.

3.2 Essais de poinçonnement de monocristaux

Ce sont les essais de poinçonnement de monocristaux qui ont donné les résultats les plus significatifs concernant la recherche de la **force motrice** et les processus limitants. Ils permettent d'étudier le transfert en solution à l'échelle de l'interface solide(grain)/fluide. Intéressons-nous

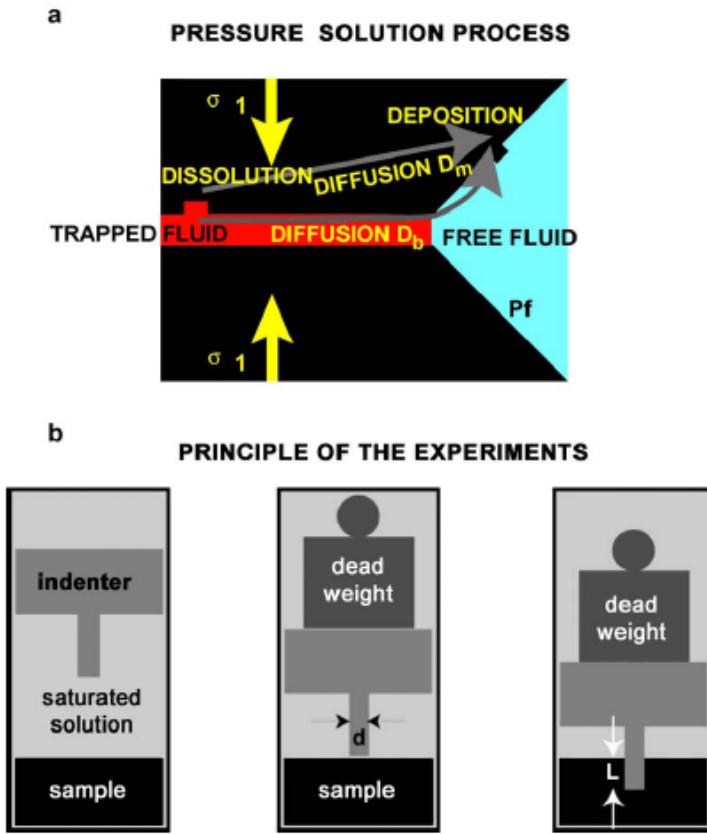


FIG. I.12 – Les processus du transfert en solution (a) à reproduire par l’essai de poinçonnement, représenté schématiquement (b). (a) Compression des deux grains, dissolution au contact grain-grain, diffusion le long du film fluide, et redéposition sur les faces du grain en contact avec le pore. (b) Un poinçon cylindrique est monté sur un piston libre de se déplacer. Un poids mort est placé par-dessus le piston qui permet l’application d’une contrainte constante sur l’échantillon. Ce dernier est contenu dans un récipient dans lequel on peut ajouter une solution. Le tout est mis dans un four à température constante. Source : Gratier et al. 2004 [22]

d’abord à la force qui entraîne le transfert en solution, c’est-à-dire les forces correspondant à chacun des trois processus. En poinçonnant un cristal baignant dans une solution, la dissolution peut s’activer autour du poinçon – donc sur les faces libres du cristal– ou sous le poinçon – c’est-à-dire au contact poinçon/cristal (fig. I.14 et I.15).

Dans le cas où la dissolution se passe sur les faces libres du cristal, elle est due à une énergie élastique qui est plus grande autour du poinçon, là où se sont également développées des déformations plastiques (Tada et Siever 1986 [67] et Gratier 1993b [19], sur des cristaux de halite). La force motrice est la **variation d’énergie élastique** ou plastique (fig. I.14 et I.15b).

Mais une autre force est introduite par Gratier 1993b [19], qui est la **différence de contrainte normale**, aboutissant à une dissolution sous le poinçon (un diamètre de poinçon plus petit, une

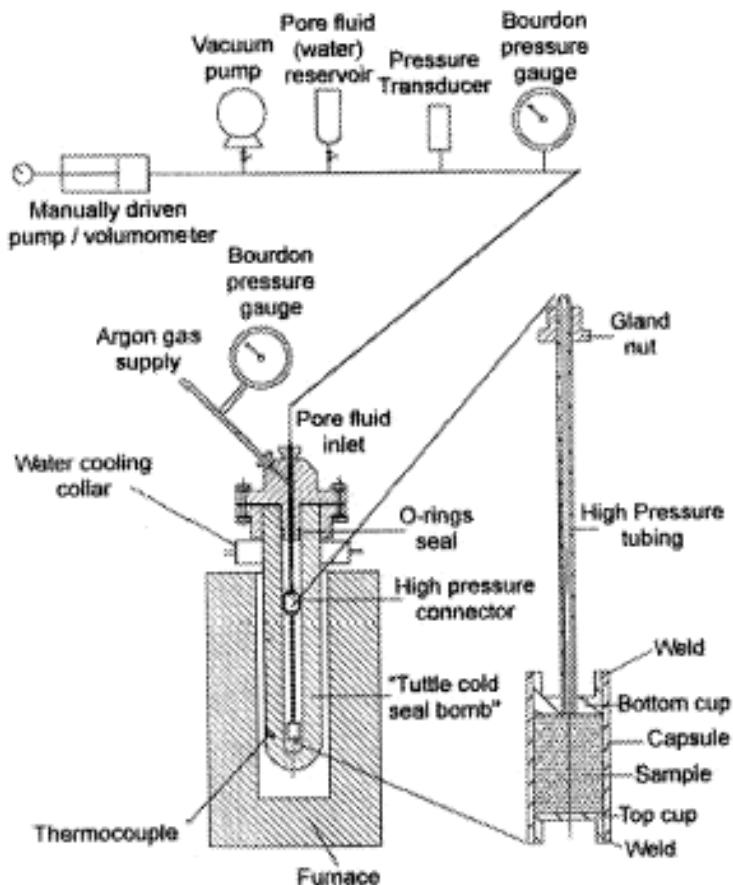


FIG. I.13 – Diagramme schématique du dispositif expérimental de compaction d'agrégat. L'échantillon est soumis à une pression de confinement dans une « bombe » pressurisée avec de l'argon. Le tout est relié à un système d'injection de fluide et mis dans un four. Source : Neimeijer et al. [50]

contrainte plus grande, ont permis de créer un trou). Elle s'active lorsque le fluide est totalement saturé (fig. I.15a,c et d). La forme conique de la partie supérieure du trou indique qu'il y a eu combinaison des deux forces motrices (combinaison de la dissolution autour du poinçon, figure I.14b, avec la dissolution sur l'interface poinçon/halite). A l'inverse, la partie inférieure du trou, parfaitement cylindrique, indique qu'il y a eu dissolution associée à une diffusion des minéraux dissous dans le film fluide piégé entre le poinçon et le cristal. Cette diffusion est entraînée par une différence de contrainte normale entre le contact poinçon/halite et la surface libre.

Dans ces essais (Gratier 1993a [18]), le transfert en solution sous le poinçon est gouverné par la diffusion. Le coefficient de diffusion dans le fluide piégé (sous le poinçon) est plus faible que celui dans un fluide libre (de l'ordre de $10^{-13} m^2/s$ à $350^\circ C$ pour le premier), la diffusion est donc le mécanisme le plus lent sous le poinçon : c'est le processus limitant, c'est-à-dire le processus dont la vitesse, nettement plus faible, impose celle de la déformation du système. Sur les faces libres du cristal, le processus limitant est la cinétique de la réaction (Gratier 1993a [18]).

L'importance du mécanisme lié à l'«énergie élastique» ne doit pas être négligée. Les travaux de Den Brok et Morel [9] sur la compression uniaxiale de cristaux de sel en contact avec une solution sous-saturée le confirme. L'énergie élastique entraîne une dissolution des surfaces libres du cristal et également des rugosités sur ces surfaces (voir fig.I.16). La rugosité qui se forme, due à l'application de la contrainte de compression, est favorable à une concentration d'énergie élastique dans les vallées, qui, à son tour, active une dissolution dans ces vallées, et une précipitation dans les monts. Tout ceci accentue encore plus la rugosité. La dissolution des surfaces libres peut donc créer des instabilités qui peuvent aboutir à une localisation de la dissolution. Nous reviendrons sur ces expériences dans le chapitre 3 avec une étude d'instabilité linéaire en 3D.

Par ailleurs, Morel et Den Brok 2001 [48] ont montré que cette concentration d'énergie élastique augmente la vitesse des processus de dissolution dans les vallées et augmente ainsi le taux de dissolution, en liaison avec le degré de sous-saturation.

Cette revue des travaux antérieurs nous confirme ce que nous avions évoqué dans la section «observations naturelles», que la dissolution intergranulaire est due à une concentration de contrainte. La dissolution ou précipitation sur les bords libres est quant à elle, due à la variation de l'énergie élastique. Les conclusions des essais de poinçonnage de cristaux nous donnent aussi une idée sur les modèles de dissolution : un premier modèle où la dissolution se passe à l'intérieur de la zone de contact grain-grain (associée à une diffusion dans un film fluide), et un deuxième où elle se passe sur le bord de la surface de contact. L'effet de l'énergie de déformation élastique ne doit pas être négligé comme l'ont montré Morel et Den Brok. Ceci a d'ailleurs été confirmé par un certain nombre de travaux théoriques et numériques récents

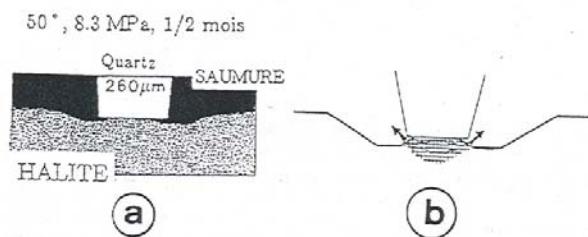


FIG. I.14 – Essais de poinçonnement de monocristaux. Résultats obtenus par Tada et Siever : dissolution sur les bords du contact. Source : Gratier et al. 1993b [19]

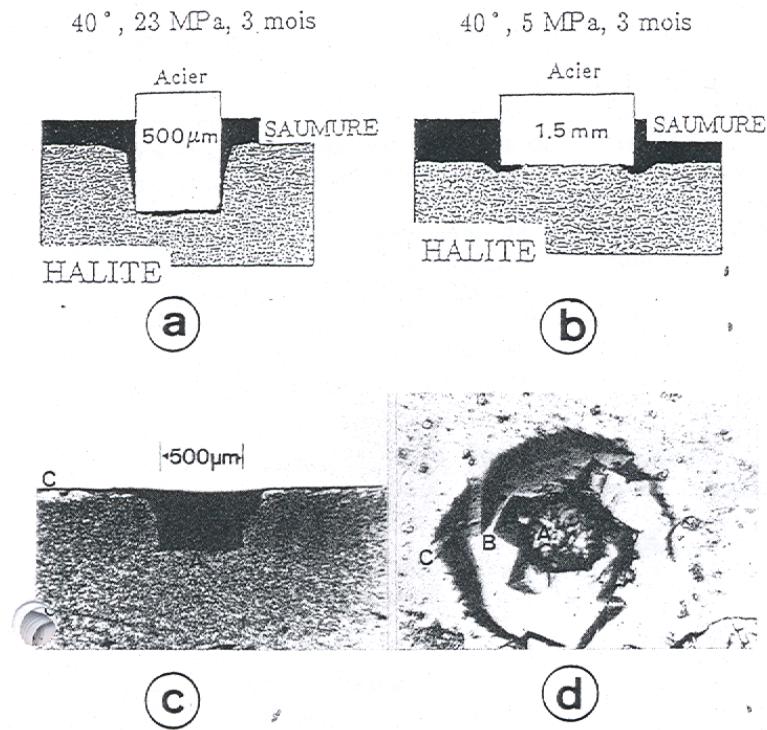


FIG. I.15 – Essais de poinçonnement de monocristaux. Deux types de dissolution, en fonction de la contrainte appliquée et du degré de saturation du fluide. Source : Gratier et al. 1993b [19]

basé sur une analyse de stabilité linéaire (Ghoussoub et Leroy 2001 [16], Koehn et al. 2003 [34], Misbah et al. 2004[47]).

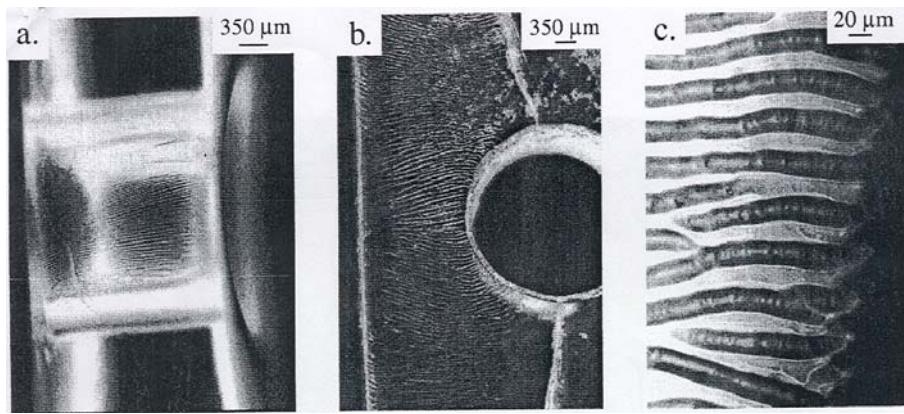


FIG. I.16 – Dissolution sur les faces libres d'un cristal sous contrainte de compression uniaxiale. Rugosité orientée parallèlement à la trajectoire des contraintes. Source : Den Brok et Morel, 2001 [9]

3.3 Essais de compaction d'agrégat

Les essais de compaction d'agrégat permettent d'étudier la contribution du transfert en solution dans la compaction des roches. La convergence de deux grains appartenant à l'agrégat résulte de la dissolution à la surface de contact grain-grain, et aboutit à la compaction générale de l'agrégat. Cela sous-entend un transport dans le fluide intergranulaire des matériaux dissous, de la surface de contact vers le fluide du pore (voir explication schématique de la fig. I.12a).

Les travaux de compaction hydrostatique d'agrégat de halite de Schutjens 1991, [59] ont montré des preuves microstructurales du transfert en solution, comme le poinçonnement de grains et les accroissements secondaires (voir fig.I.17). Ces observations couplées à une analyse du taux de déformation volumique en fonction de la pression de confinement, de la pression de fluide, et de la taille des grains, ont permis de conclure qu'en présence de fluide, on assiste à une compaction de l'agrégat par fluage, avec transfert en solution. Les courbes de compaction (déformation volumétrique en fonction du temps) permettent d'étudier l'évolution de la compaction dans le temps.

La compaction par transfert en solution a également été étudiée par Niemeijer et al. 2001 [50] sur du sable de quartz, en mettant en évidence les indentations entre les grains. Leurs essais sont menés à de plus hautes températures ($400\text{-}600\text{ }^{\circ}\text{C}$) et à pression effective de (50-150MPa). Le mécanisme de compaction dominant est toujours le transfert en solution intergranulaire.

L'étude de la compaction d'un agrégat de quartz a été réalisée par un essai sous écoulement continu par He et al. 2003 [26]. L'essai mené à une température de $150\text{ }^{\circ}\text{C}$ et une pression effective de 34,5 MPa, consiste surtout à déterminer l'effet de la vitesse d'écoulement de fluide dans l'agrégat, sur le taux de compaction : une vitesse d'écoulement élevée induit un transport plus rapide et ainsi un taux de convergence des grains plus élevé.

L'essai triaxial ($\sigma_1 > \sigma_3$) mené par Hellmann et al. 2002 [28] sur la craie a abouti aux mêmes conclusions. En présence de fluide et soumise à des contraintes différentielles, la craie se compacte par fluage. La compaction est d'abord purement mécanique en l'absence de fluide, puis à l'injection de fluide, la déformation devient plus rapide (déformation vs. temps) et dépend directement de la nature chimique du fluide (test avec l'eau, une solution saline et le propanol).

En fait, ces deux derniers essais indiquent que le degré de concentration du fluide influe sur le taux de déformation de l'agrégat. En effet, l'injection de fluide modifie la composition du fluide déjà présent, et du degré de saturation dépend l'importance de la dissolution sur les faces libres des grains et les contacts intergranulaires, et donc du taux de compaction de l'agrégat.

Ces expériences de compaction ont aussi pour but de déterminer l'influence des différents paramètres, tout comme les essais de poinçonnement. Cette détermination fait l'objet du paragraphe suivant.

3.4 L'influence des différents paramètres

Dans les essais de compaction de sable de quartz, Niemeijer et al. 2002 [50] constatent en mesurant la porosité initiale (ϕ_0) et la porosité finale (ϕ), pour différentes valeurs de pressions de confinement, de température et de taille de grain (d_f taille de grain final), que la réduction de porosité augmente avec la pression et la température, et diminue avec la taille de grain. Il y a donc un effet de ces trois paramètres sur la compaction par fluage.

L'influence de la taille de grain sur le transfert en solution a également pu être déterminé par les essais de poinçonnement. En faisant varier le diamètre du poinçon, différents modes de dissolution ont été mis en évidence (voir paragraphe 3.2). Par ailleurs, pour Gratier 1993a, 1993b [18, 19], la proportionnalité du taux de déplacement du poinçon avec le carré du diamètre du poinçon est en accord avec la théorie. Plus le diamètre est petit, plus le poinçon s'enfonce grâce à une dissolution sous le poinçon et une diffusion dans le fluide piégé (entre le poinçon et le cristal) des minéraux dissous.

Le rôle des caractéristiques du fluide a été établi expérimentalement par les constats suivants. Une plus grande solubilité des minéraux implique un taux de déformation plus grand dans les essais de compaction de craie. Une relation linéaire existe entre le taux de déformation et la solubilité du solide (Hellmann et al. [28]). Par ailleurs, le degré de saturation de la solution dicte le type de dissolution : lorsque la solution est sous-saturée on assiste à une dissolution sur les faces libres du cristal ; lorsque la solution est totalement saturée, c'est aux surfaces de contact poinçon/cristal que la dissolution s'active (en association avec la diffusion) (Gratier 1993a [18]).

Les travaux expérimentaux ont permis également de trouver que la variation de la contrainte subie par la roche a une influence sur le taux de déformation, et déterminer ainsi une transition entre le transfert en solution et la déformation plastique. Les courbes taux de déformation en

fonction de la contrainte sont quasi-linéaires pour de faibles valeurs de contrainte : l'exposant de contrainte n vaut 1 selon les travaux de Gratier 1993a,b [18, 19] sur du quartz et du halite ; il est compris entre entre 0,8 et 1,8 pour les essais de Spiers et al. 1990 [64] sur le sel, et 1 et 2 pour Hellmann et al. 2002 [28], sur la craie. Pour des valeurs de contrainte plus grandes, les pentes varient entre 2 et 4, c'est-à-dire que la dépendance du taux de déformation sur la contrainte appliquée est plus élevée (Spiers et al. 1990 [64] sur le sel). Lorsque la contrainte dépasse une certaine valeur, les relations ne sont plus linéaires, mais elles sont exponentielles ou d'exposants supérieurs à 1. Pour Gratier 1993b [19], ces valeurs des exposants sont caractéristiques de la déformation plastique ($n = 3 - 5$, résultats obtenus sur des matériaux très solubles, K_2CO_3 +argile, sucre, sel). Pour les essais de Niemeijer et al. 2002 [50] sur du quartz, l'exposant n vaut 3-4 mais correspond toujours à un modèle de transfert en solution, non-linéaire en σ cependant. Ces résultats sont intéressants pour l'étude et la modélisation du transfert en solution à l'échelle de l'agrégat, c'est-à-dire pour la modélisation de la compaction.

Ce qui peut être intéressant à étudier à l'échelle de deux grains, c'est l'influence de la température sur la vitesse de convergence des grains. Rappelons que les travaux d'observations naturelles ont montré que la température a une influence sur le transfert en solution. Ceci est confirmé par les travaux de Niemeijer et al. 2002 sur le quartz [50], où la perte de porosité s'accélère lorsque la température augmente (voir début de ce paragraphe). Mais dans bon nombre de travaux expérimentaux, l'influence de la température sur le transfert en solution n'est que faible (travaux de Hellmann et al. 2002 [28] sur la craie, de Gratier 1993a[18] sur le sel, et de Gratier et al. 2004 [22] sur l'argilite). Ceci est dû à une faible énergie d'activation du processus. Ceci nous pousse à approfondir l'analyse du rôle de la température, par l'intermédiaire de l'outil numérique, qui est la méthode certainement la plus efficace pour les études paramétriques. On pourra de même, valider les constatations sur l'effet de la taille de grain.

D'autres paramètres influençant le transfert en solution ont été étudiés expérimentalement, comme la vitesse d'écoulement de fluide par He et al. [26] (voir paragraphe 3.3), la présence de minéraux d'argile dans le grès (Renard et al. 2001 [52])... Mais le nombre restreint des études expérimentales concernant ces paramètres ne nous permet pas de débattre de leur importance.

3.5 L'association des déformations par transfert en solution et des déformations cataclastiques

Nous avons vu dans la revue des travaux d'observations naturelles que le transfert en solution est associé à l'apparition de fractures. Quelques travaux expérimentaux ont reproduit ce phénomène, comme ceux de Gratier et al. 1999 [20] sur un essai de poinçonnage de halite. Le transfert en solution se traduit par la présence d'un trou cylindrique sous le poinçon formé par dissolution et par un transfert de masse par diffusion du trou vers la surface libre du cristal. En

augmentant la contrainte appliquée, des fractures radiales apparaissent, dépassant le diamètre du trou, et qui divisent la surface de contact en plusieurs parties. Ceci a pour conséquence d'augmenter la vitesse de déformation. En effet, la diffusion dans la partie des fractures hors du poinçon est plus rapide (diffusion sur une surface libre), et la diffusion sous le poinçon se fait sur des domaines plus petits et non plus sur toute la surface de contact. Ces résultats nous apportent la preuve que le processus de transfert en solution et celui de la fracturation dans la croûte supérieure peuvent être associés.

3.6 La mise en évidence des structures des joints de grains

On conçoit que les propriétés du joint de grain ont un effet sur le transport des matériaux dissous, et donc sur le taux de compaction : la diffusion requiert une structure qui permet au fluide de circuler. Ces propriétés doivent également permettre de transmettre la contrainte normale et la contrainte de cisaillement. Une telle structure du joint de grain a été mise en évidence expérimentalement par Schutjens 1991 [59] et Spiers et Schutjens, 1990 [63]. Les inclusions de fluide dans le contact ressemblent à des chenaux (voir fig.I.17e et f). Cette structure est connue sous le nom de «structure en îles et chenaux». Pour notre étude, nous ne discutons pas en détail la nature physico-chimique de l'interface, mais nous retenons le modèle d'îles et chenaux qui présente les caractéristiques que nous voulons prendre en compte dans notre modèle.

3.7 Conclusion

Les travaux expérimentaux fournissent des preuves de l'activation du transfert en solution, et de l'influence des différents paramètres. Ces preuves ajoutées aux observations naturelles, permettent de bien comprendre le transfert en solution, quelles sont ses forces motrices et en quoi est-ce que ce phénomène agit comme mécanisme de compaction. Le rôle de certaines variables est encore discuté. Il y a donc matière à les étudier numériquement. D'autres paramètres sont expérimentalement bien reconnus comme ayant une influence sur le transfert en solution (comme la taille de grain). Cette influence pourra être validée via l'outil numérique.

L'autre intérêt de cette revue est la mise en évidence de la structure de joint de grain. Cette structure a déjà permis de mieux modéliser le transfert en solution, comme nous allons le voir dans le paragraphe suivant.

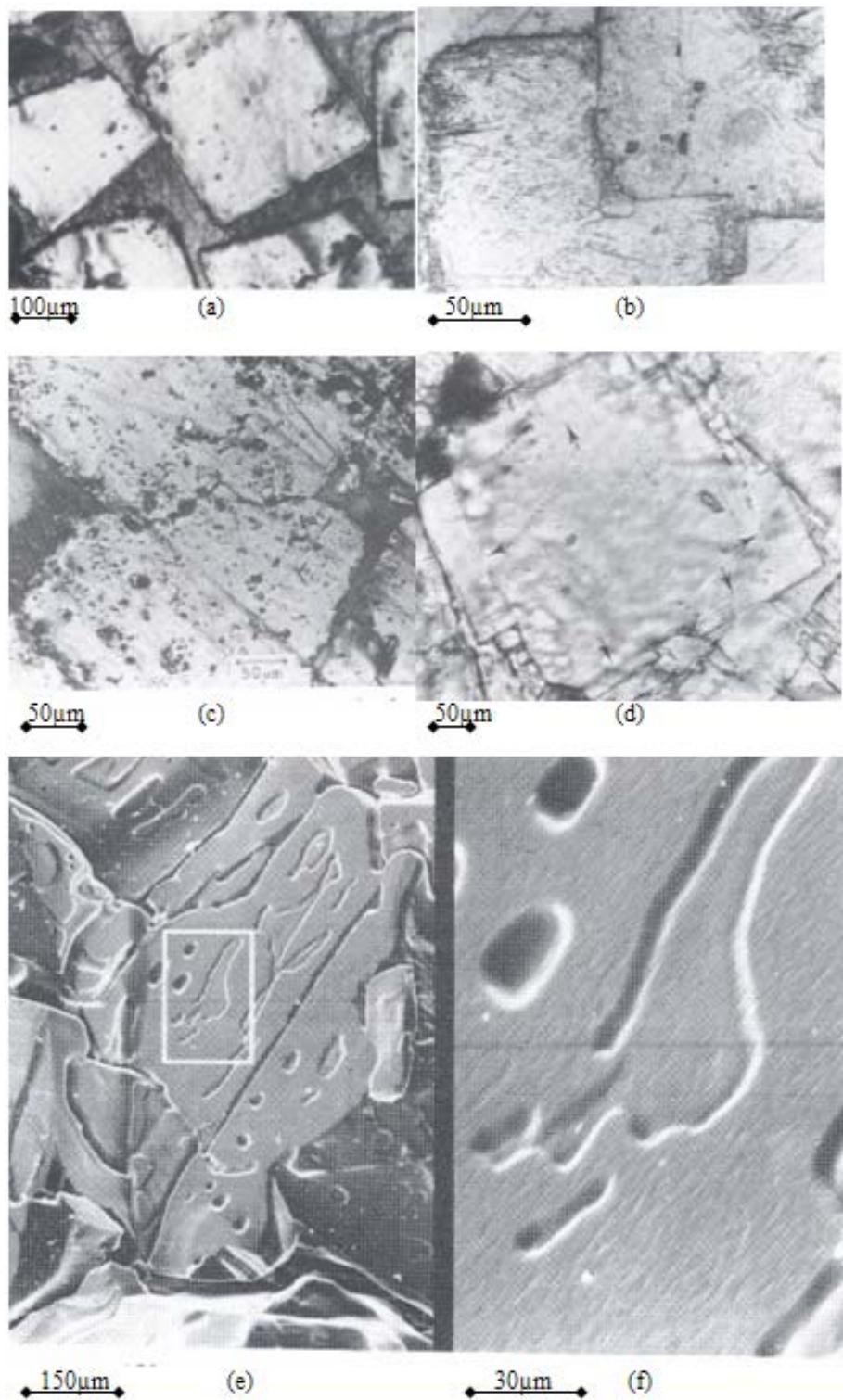


FIG. I.17 – Microstructure de halite après essai de compaction. (a) Sans présence de fluide : aucun contact. (b-f) Compaction en présence de fluide : b)indentation de grains, preuve de l'occurrence du transfert en solution ; c)contact suturé (microstylolites) ; d)accroissements secondaires (flèches) ; e-f) Morphologie de la surface de contact : en zoom, structure tubulaire (chenaux). Source : Schutjens 1991 [59]

4. Les différents modèles du transfert en solution

A l'échelle macroscopique, l'étude théorique du transfert en solution consiste à trouver des lois de compaction (par fluage) des bassins sédimentaires. Ces lois prennent en compte diverses variables géologiques. Elles s'écrivent comme une relation entre la vitesse de déformation de la roche sédimentaire et ces variables (température, taille de grain, orientation cristallographique des grains) (Goussoub, 2000 [15]).

La détermination d'une telle loi passe par une approche à l'échelle microscopique. Celle-ci consiste à déterminer les forces responsables des processus de dissolution, de diffusion, et de précipitation, qui sont les trois étapes du transfert en solution intergranulaire. Ces forces sont identifiées grâce à l'application de la thermodynamique des processus irréversibles, qui permet la description de systèmes se trouvant hors équilibre. L'écriture des conditions d'équilibre local à l'interface entre la phase fluide et la phase solide, et donc la description thermodynamique des processus, dépend du modèle physique considéré (modèle du joint de grain, modèle de dissolution et/ou diffusion).

La revue des différents modèles et des théories thermodynamiques existants aboutira au choix d'un modèle de travail, dont les grandes lignes seront données dans le dernier paragraphe de cette section.

4.1 Modèle micropysique

On étudie le transfert en solution sur un modèle de deux grains en contact qui appartient à une roche soumise à une contrainte macroscopique de compression. La contrainte intergranulaire agissant sur le solide que constituent les grains, est donc plus élevée que la contrainte agissant sur les surfaces libres des grains, qui est due à la pression du fluide interstitiel (que l'on va appeler pression de pore) (fig.I.18).

Les modèles qui existent dans la littérature sont présentés brièvement :

- Le modèle de Bathurst [4](fig. I.19) : la dissolution s'opère progressivement sur les bords du contact entre les deux grains. On constate que ce modèle correspond aux résultats expérimentaux de Tada et Siever 1986 [67] : la dissolution sur ces surfaces libres du grain est due à une énergie de déformation ou une énergie de surface élevée (Lehner, 1990 [38]). Il n'y pas de diffusion dans le contact.
- Le modèle de Weyl [71](fig. I.20) : ce dernier a mis en évidence par des analyses pétrographiques l'existence d'un film fluide entre les deux grains, dans la zone de contact. La dissolution du solide au contact grain/film fluide/grain est associée à la diffusion des minéraux dissous vers le pore (Renard et al. 1999 [54]). Le fluide visqueux assure la continuité

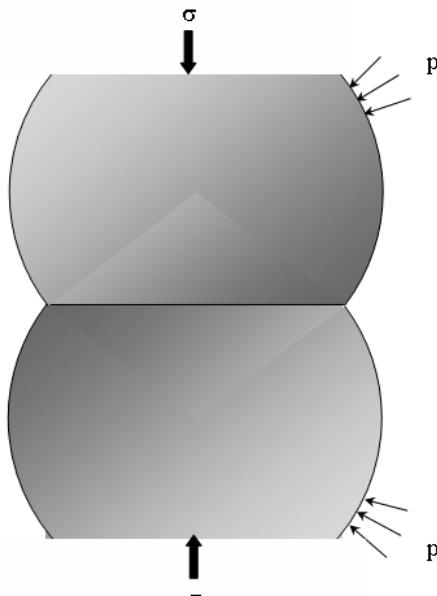


FIG. I.18 – Modèle de deux grains en contact, soumis à une contrainte de compression macroscopique effective, avec transfert en solution intergranulaire

des contraintes normales et de cisaillement (Shimizu, 1995 [62]), voir fig I.22a. L'épaisseur de ce film fluide est de l'ordre du nanomètre (film adsorbé)(Ghoussoub, 2000[15]).

- Le modèle qui découle des travaux expérimentaux de Spiers et Schutjens [63](fig. I.21) : la dissolution s'opère toujours dans le contact, mais la structure du contact est cette fois-ci constituée d'îles et chenaux. Les «îles» maintiennent le contact entre les deux solides, et les «chenaux» sont en fait des inclusions de fluide. Le fluide contenu dans ces inclusions est de même nature que celui du pore [62], voir fig I.22b. L'épaisseur du joint de grain est assez grande pour permettre au fluide d'avoir les propriétés d'une masse liquide (à l'opposé du film adsorbé) (Lehner, 1995 [39]). Les contacts solide-solide permettent de transmettre les contraintes intergranulaires.

Avant la mise en évidence expérimentale de la structure en «îles et chenaux», quelques auteurs ont déjà considéré un tel modèle, comme Raj 1982 [51], Lehner et Bataille 1984 [40] ou Tada et al. 1987 [66].

Nous n'abordons pas la dynamique de ce modèle qui conduit à une structure, toujours en évolution, d'îles et chenaux, mais nous le considérons globalement comme assurant le transport du fluide de l'interface vers le pore et la transmission des contraintes.

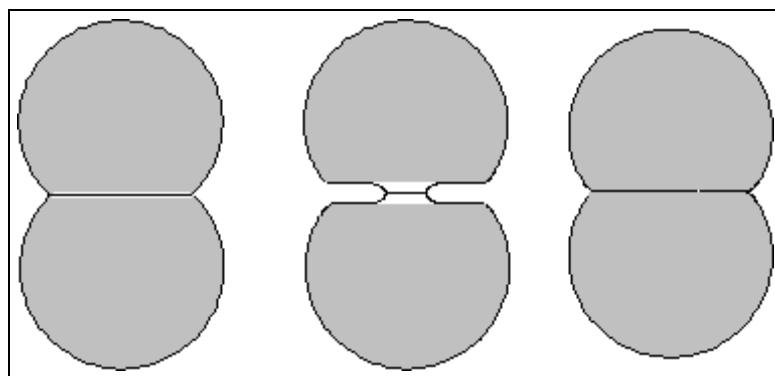


FIG. I.19 – Le modèle de Bathurst [4]. Dissolution marginale.

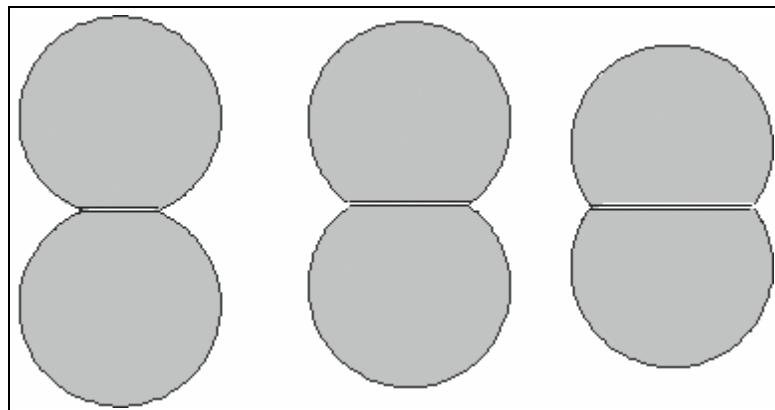


FIG. I.20 – Le modèle de Weyl [71]. Dissolution et diffusion dans un film fluide intergranulaire.

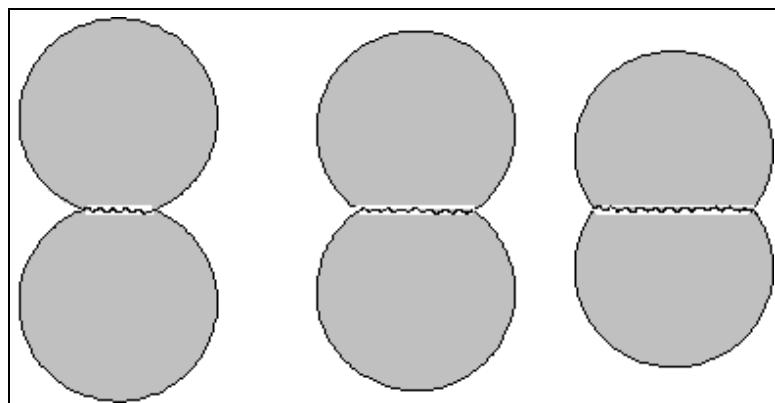


FIG. I.21 – Le modèle en îles et chenaux. Dissolution et diffusion dans un contact en îles et chenaux.

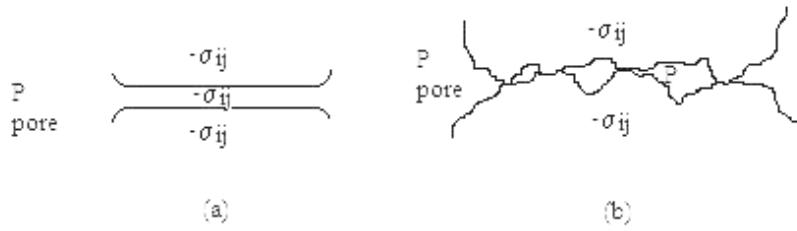


FIG. I.22 – (a) Modèle de Weyl : le film fluide visqueux assure la continuité des contraintes normales et de cisaillement. (b) Modèle en îles et chenaux : la contrainte est transmise par les «îles». Le fluide contenu dans les chenaux a les mêmes propriétés que le fluide du pore. Source : Shimizu, 1995 [62].

Dans les deux derniers modèles, le départ de matériaux (par dissolution puis diffusion) de la zone de contact, conduit à un rapprochement des centres des deux grains. Une loi de fluage consiste en l'expression du taux de convergence des deux grains.

D'autres modèles peuvent dériver des modèles cités ci-dessus, comme celui qui tient compte de la dissolution et de la diffusion dans la zone de contact, et avec dissolution ou précipitation sur les surfaces libres du grain – à l'extérieur de la zone de contact (Renard et al. 1999 [54]). On peut encore citer celui où la diffusion se fait également dans le fluide du pore pour transporter les matériaux dissous à une distance supérieure à la taille du grain (c'est-à-dire que les minéraux dissous sont redéposés sur les faces libres d'un ou plusieurs grains, autres que ceux au contact desquels les minéraux se sont dissous)(Gundersen et al. 2002 [11]).

Le modèle en îles et chenaux, bien que largement accepté et utilisé, a été récemment controversé (voir les travaux de Sheldon et al. 2003 [61]). Cependant sa pertinence est due au fait que la fameuse structure a été observée expérimentalement sur du sel gemme (Schutjens [59] et Spiers et Schutjens, 1990 [63]) et sur du quartz (Tada et al., 1987 [66]). Mais selon Sheldon et al. 2003 [61], ces observations peuvent être des artefacts des processus de préparation des échantillons. Pourtant, on peut imaginer au vu des résultats expérimentaux, que la dissolution sous contrainte peut entraîner une rugosité de la surface de contact (Schutjens et Spiers, 1999 [60], Den Brok et Morel, 2001 [9]). Les travaux de Ghoussoub, 2000 [15] à une petite échelle (celle d'une «île» ou d'une inclusion, constituant le joint de grain) ont par ailleurs montré que ces rugosités de surface, dues à une instabilité, peuvent aboutir à un «undercutting» qui permet au fluide de pénétrer un contact sec, et ont montré ainsi l'évolution dans le temps d'une structure en îles et chenaux. Nous allons donc dans ce travail nous placer dans cette hypothèse de structure en îles et chenaux.

4.2 Thermodynamique d'une interface solide/fluide

La thermodynamique appliquée au transfert en solution a été introduite par Lehner et Bataille, 1984 [40]. Ont suivi les travaux de Lehner 1990 [38], et ceux de Heidug et Leroy 1994 [27].

On recherche donc une écriture des conditions d'équilibre local de l'interface entre un solide soumis à une contrainte non-hydrostatique et un fluide. On peut partir de la condition d'équilibre chimique de Gibbs entre un solide constraint et sa solution (avec une interface plane) :

$$u^s - Ts^s + p/\rho^s = \mu_S \quad (\text{I.1})$$

les indices s et S correspondent respectivement au solide et au soluté. u^s et s^s sont l'énergie interne et l'entropie spécifique du solide pur, et ρ^s sa masse volumique; p est la pression de fluide, et μ_S , le potentiel chimique du soluté.

En considérant un modèle avec une zone de contact mouillée, l'équilibre entre le solide et le fluide de la zone de contact se décrit comme suit. Le solide étant soumis à une force non-hydrostatique (fig.I.23), on peut exprimer l'équation (I.1) uniquement en fonction des quantités associées au solide (Lehner, 95 [39]), puisque $-p$ doit être remplacé par la contrainte normale σ_n du côté «solide» de l'interface solide/fluide. :

$$f^s - \sigma_n/\rho^s = \mu_S \quad (\text{I.2})$$

où σ_n est la composante normale de la contrainte agissant sur l'interface.

$u^s - Ts^s = f^s$ est l'énergie spécifique libre d'Helmholtz.

L'équation I.2 est une équation locale pour un point d'une interface plane solide/fluide

4.3 La force thermodynamique

La mise en évidence de l'existence d'une force responsable des différents processus du transfert en solution s'est faite à l'aide de la thermodynamique des processus irréversibles. On peut voir les détails de la démonstration dans les travaux de Heidug et Leroy, 1994 [27]. Dans ce qui suit, nous récapitulerons les grandes lignes des travaux de recherche sur les forces thermodynamiques, afin de nous situer.

On considère toujours le modèle avec contact mouillé, de type îles et chenaux.

De la dissolution

La dissolution (ou la précipitation) est le fruit d'un déséquilibre le long de l'interface solide/fluide [59], c'est-à-dire d'un non-respect de l'égalité (I.2). La force thermodynamique res-

ponsable de cette dissolution est alors la différence entre le terme de gauche de cette équation et le terme de droite.

La quantité de gauche peut être considérée comme la composante normale du tenseur de potentiel chimique de Bowen [5] utilisée par J. Ghoussoub 2000 [15]. L'expression tensorielle du membre de gauche de l'équation I.2 est ainsi :

$$\boldsymbol{\mu}^s = f^s \mathbf{1} - \boldsymbol{\sigma}/\rho^s \quad (\text{I.3})$$

où $\mathbf{1}$ est le tenseur unité d'ordre 2, $\boldsymbol{\sigma}$ le tenseur de contrainte de Cauchy.

Sa composante normale est donc le potentiel chimique du solide, noté :

$$\mu_n^s = f^s - \sigma_n/\rho^s \quad (\text{I.4})$$

La force qui entraîne la dissolution (précipitation) est donc une différence de potentiel chimique entre la phase solide et la phase fluide à l'interface solide/fluide :

$$\chi_S(r) = \mu_n^s(r) - \mu_S(r) \quad (\text{I.5})$$

Le déséquilibre entre les deux termes μ_n^s et μ_S , qui correspond à une force non-nulle, donc au déclenchement d'une dissolution, peut être dû à un état de contrainte non-homogène dans le solide. Différentes distributions de la contrainte intergranulaire dépendant de r ont d'ailleurs été déjà données par Robin [56] (r étant la position dans la zone de contact à partir du centre). Cette non-homogénéité implique une variation de f^s , l'énergie d'Helmholtz et de ρ^s la densité de masse, le long du contact.

De la diffusion

La contrainte intergranulaire σ_n étant plus grande que la pression de pore p , si on suppose un état d'équilibre le long du contact (équation I.2), le potentiel chimique du soluté dans la zone de contact μ_S est plus grand que le potentiel chimique du soluté dans le pore $\mu(a)$. Cette différence de potentiel chimique entraîne la diffusion puisque le système tente de restaurer l'équilibre entre la zone de contact et le pore [61]. La force thermodynamique entraînant la diffusion est donc :

$$\chi_D = \mu_S - \mu(a) \quad (\text{I.6})$$

La diffusion se fait depuis la zone de contact où le potentiel chimique μ_S est le plus grand, vers le pore où le potentiel chimique $\mu(a)$ est le plus faible. C'est la distribution parabolique de

la contrainte agissant sur le contact (hypothèse bien acceptée dans la littérature) qui entraîne le gradient de potentiel chimique dans la zone de contact.

La diffusion est donc entraînée par un déséquilibre chimique entre le fluide de la zone de contact et celui du pore, ou plus exactement, une variation de concentration, le potentiel chimique étant lié à la concentration (voir paragraphe suivant).

4.4 Le potentiel chimique du soluté

Le potentiel chimique du soluté est fonction de la pression de fluide p_f et de la concentration de soluté C_S . Il s'écrit, en considérant un état de référence :

$$\mu_S(p_f, C_S) = \mu_S^0 + \frac{kT}{\rho^s \Omega^s} \log \frac{C_S}{C_S^0} \quad (\text{I.7})$$

où l'indice 0 indique l'état de référence. k est la constante de Boltzmann, et Ω^s le volume moléculaire. La dérivation de cette expression peut être trouvée dans Ghoussoub 2000[15].

4.5 Loi de fluage phénoménologique

La compaction chimique de la roche peut être étudiée sur un élément de volume représentatif, comme l'assemblage de plusieurs grains. La modélisation de cet assemblage de grains consiste en une simplification de la géométrie, en considérant un assemblage périodique de sphères tronquées (Lehner 1995 [39] et Lehner et Leroy, 2003 [41]). La détermination d'une loi de fluage équivaut à trouver une expression du taux de convergence des centres de deux grains en contact, qui sont, dans le modèle considéré, séparés par une zone de contact d'épaisseur δ limitée par deux surfaces planes (Lehner, 1995 [39] et Lehner et Leroy, 2003 [41])(voir fig.I.23). Cette zone de contact est constituée en réalité de microcavités, représentatives de la structure en îles et chenaux (fig.I.22). Les deux grains sont soumis à une contrainte macroscopique de compression et la pression du fluide du pore, la contrainte macroscopique étant plus élevée que la pression de pore. Le système est «ouvert», c'est-à-dire qu'il fonctionne comme un exportateur de solutés sur de grandes distances par rapport à l'échelle du grain (Lehner 1995 [39]). La concentration de soluté ou les potentiels chimiques contrôlés par un transport à l'échelle macroscopique sont considérés constants dans le temps.

Dans ce modèle, la distance entre les centres des deux grains est λd , où λ est un facteur de raccourcissement du grain (< 1), et d le diamètre du grain.

Le flux de masse de dissolution ($\text{kg}/\text{m}^2/\text{s}$) des matériaux des deux grains dans le fluide de la zone de contact, noté J_n^{gb} , est relié au saut de vitesses non-matérielles (vitesses de déplacement des interfaces non-matérielles) $[[v_n]]$ entre les deux interfaces planes (solide/fluide) qui limitent

la zone de contact. Ce saut est lui-même lié au taux de raccourcissement $\dot{\lambda}$.

$$J_n^{gb} = -\rho_0^s[[v_n]] = -\rho_0^s \dot{\lambda} d \quad (\text{I.8})$$

Une loi phénoménologique pour le transfert en solution intergranulaire relie le flux de masse et la force thermodynamique. Cette relation est donnée pour les deux processus (dissolution dans la zone de contact et diffusion à l'intérieur de la zone de contact) par Lehner et Leroy 2003 [41] en appliquant la thermodynamique des processus irreversibles.

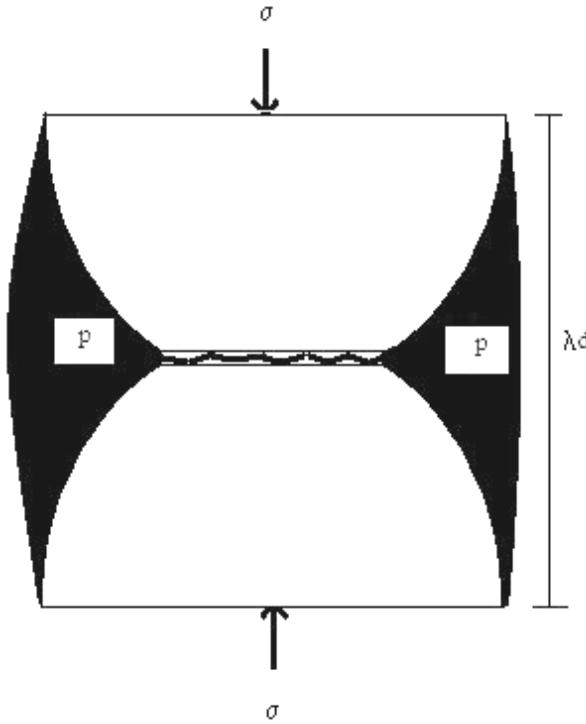


FIG. I.23 – Le modèle de à l'échelle du grain : le contact constitué d'un réseau d'îles et chenaux est représenté par une zone limitée par deux interfaces planes entre les grains et le fluide du contact. La troncature des grains équivaut à un raccourcissement d'un facteur λ .

Pour la dissolution

Une relation linéaire peut être écrite entre la force thermodynamique et le flux de masse à travers l'interface. Cette relation s'obtient à partir d'arguments thermodynamiques. En effet, le taux de dissipation d'énergie correspondant à la dissolution est lié à la production d'entropie \dot{s} (positive) (Heidug et Leroy, 1994, Lehner et Leroy 2004). Le premier est considéré comme étant le produit : $J_n^{gb}(\mu_n^s(r) - \mu_S(r))$, on a donc :

$$J_n^{gb}(\mu_n^s(r) - \mu_S(r)) = T\dot{s} \geq 0$$

où T est la température absolue.

Une dépendance entre la force $\mu_n^s(r) - \mu_S(r)$ et le flux J_n^{gb} apparaît à partir de cette inégalité. La plus simple relation entre les deux quantités est une relation linéaire, qui peut être écrite sous la forme :

$$J_n^{gb}(r) = -\rho^s K^{gb} (\rho^s \Omega^s / kT) [\mu_n^s(r) - \mu_S(r)] \quad (\text{I.9})$$

Le coefficient phénoménologique de dissolution ($K^{gb} > 0$ supposé constant tout le long de l'interface) peut être estimé par des relations phénoménologiques pour les réactions de précipitation et de dissolution (voir Rimstidt et Barnes, 1980 [55]). Le matériau considéré ici est le quartz.

En faisant une moyenne des potentiels chimiques entre $r = 0$ (le centre de la zone de contact) et $r = a$ (la jonction entre le contact et le pore), on obtient :

$$J_n^{gb} = -\rho^s K^{gb} (\rho^s \Omega^s / kT) [\bar{\mu}_n^s - \bar{\mu}_S] \quad (\text{I.10})$$

Le terme entre crochets étant la force thermodynamique moyenne.

Pour la diffusion

On considère le flux radial du matériau dissous, et l'on suppose qu'il est régi par la loi de Fick, qui s'applique à la diffusion dans une phase liquide. Si la solution est suffisamment diluée, on écrira (De Groot et Mazur, 1984 [24]) :

$$J_r^{gb}(r) = -\rho_f D \frac{dC_S(r)}{dr} \quad (\text{I.11})$$

où J_r^{gb} est la composante radiale du flux de diffusion,
 $C_S(r)$ est la concentration du soluté,
 ρ_f la densité de masse du fluide, et
 D est diffusivité du joint de grain.

En considérant un état stationnaire dans la zone de contact, le taux total de transfert de masse vers l'extérieur de la zone de contact et le taux total de dissolution dans cette zone doivent s'équilibrer. Considérant à l'abscisse r , un anneau de largeur dr et d'épaisseur δ (voir figure I.24), la conservation de masse dans cet anneau s'écrit :

$$2\pi r \delta J_r^{gb}(r) - 2\pi(r + dr) \delta J_r^{gb}(r + dr) + 2\pi r dr J_n^{gb} = \dot{m}_S 2\pi r dr \quad (\text{I.12})$$

Les deux premiers termes correspondent au flux radial de diffusion dans l'anneau (différence entre le flux radial dans le disque de rayon r et le disque de rayon $r+dr$), le deuxième correspond au flux normal de dissolution.

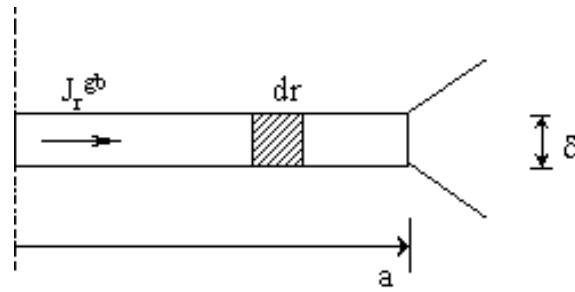


FIG. I.24 – Schématisation d'un élément de la zone de contact par un anneau de rayon r et de largeur dr .

Après linéarisation (au premier ordre), on obtient :

$$\frac{\partial J_r^{gb}(r)}{\partial r}r + J_r^{gb}(r) - J_n^{gb}\frac{1}{\delta}r = -\dot{m}_S r \quad (\text{I.13})$$

L'hypothèse d'état stationnaire implique que la masse du soluté m_S ne varie pas. Ainsi, $\dot{m}_S = 0$. Puis, en remplaçant le flux normal par son expression dans (I.8), on obtient :

$$\frac{\partial J_r^{gb}(r)}{\partial r}r + J_r^{gb}(r) = -\rho^s \lambda \frac{d}{\delta}r \quad (\text{I.14})$$

La résolution de cette équation différentielle donne une expression de $J_r^{gb}(r)$

$$J_r^{gb}(r) = -\rho^s \lambda \frac{d}{\delta} \frac{r}{2} \quad (\text{I.15})$$

Utilisant la loi de Fick (I.11) pour exprimer $J_r^{gb}(r)$, on exprime la variation de la concentration de soluté en fonction de sa position r le long de l'interface, le taux de convergence λ et les paramètres du matériau et géométriques :

$$\frac{dC_s(r)}{dr} = \lambda \frac{\rho^s}{\rho_f} \frac{d}{\delta D} \frac{r}{2} \quad (\text{I.16})$$

D'où en intégrant cette dernière équation le long de l'interface (entre une position r et le pore),

$$C_s(r) - C_s(a) = \lambda \frac{\rho^s}{\rho_f} \frac{d}{4\delta D} (r^2 - a^2) \quad (\text{I.17})$$

où $a = \frac{d}{2} \sqrt{1 - \lambda^2}$.

En faisant une moyenne entre $r = 0$ et $r = a$, de la distribution de concentration de soluté, on obtient à partir de l'équation précédente, une expression du taux de convergence :

$$\lambda = -\frac{8\rho^f D \delta}{d \rho^s a^2} [\bar{C}_s - C_s(a)] \quad (\text{I.18})$$

Finalement, en utilisant une relation entre la concentration et le potentiel chimique pour de petites variations de concentration (se référer à l'équation I.7),

$$\frac{\bar{C}_S - C_S(a)}{C_S(a)} \approx \ln \bar{C}_S(r) C_S(a) \approx \frac{\rho^s \Omega^s}{kT} [\bar{\mu}_S - \mu_S(a)] \quad (\text{I.19})$$

on aboutit à l'expression de la loi phénoménologique suivante :

$$J_n^{gb} = -(8\rho^f C_{eq} \delta D_{gb}/a^2) (\rho^s \Omega^s / kT) [\bar{\mu}_S - \mu(a)] \quad (\text{I.20})$$

en ayant pris soin de considérer le lien entre $\dot{\lambda}$ et J_n^{gb} . La concentration d'équilibre C_{eq} peut être, dans l'hypothèse des petites variations de concentration, prise égale à $C_S(a)$, la concentration de soluté dans le pore.

Loi de fluage

En combinant les deux relations (I.10) et (I.20), pour éliminer le potentiel chimique $\bar{\mu}_S$ on aboutit à la relation suivante :

$$\dot{\lambda} = \frac{-1}{4(a^2/d^2)\tau_D + \tau_S} \left\{ \frac{\Delta\bar{\psi}^s - \bar{\sigma}_n - p}{kT/\Omega^s} - \frac{C_S(a) - C_S^0}{C_S^0} \right\} \quad (\text{I.21})$$

où $\Delta\bar{\psi}^s$ est la moyenne sur la surface de la densité d'énergie libre d'Helmholtz, et
 $\bar{\sigma}_n$ est la moyenne sur la surface de la contrainte normale à l'interface,
et le terme entre accolades étant la force thermodynamique.

Dans l'équation précédente, τ_S et τ_D sont définis comme étant les temps caractéristiques des deux processus, respectivement de dissolution et de diffusion.

$$\begin{aligned} \tau_S &= \frac{d}{K^{gb}} \quad \text{et} \\ \tau_D &= \frac{\rho^s d^3}{32\rho^f \delta D^{gb} C_{eq}} \end{aligned}$$

4.6 Conclusion

L'hypothèse de l'existence d'un film fluide dans le joint de grain a été acceptée depuis quelques années, et vérifiée expérimentalement et numériquement. La présence de ce film fluide constitue la différence entre le fluage de Coble, 1963 [8] et le transfert en solution. Parmi les modèles de joint de grain existant dans la littérature, celui ayant une structure dynamique en îles et chenaux nous semble le plus intéressant et le plus pertinent, au vu des observations expérimentales de Shutjens, 1991 [59] et Spiers et Schutjens, 1990 [63], et des résultats des études

numériques de Ghoussoub, 2000 [15] et Ghoussoub et Leroy, 2001 [16].

D'une part, l'existence de fluide dans le joint de grain, permet de considérer une dissolution du grain dans ce fluide, et un transport par diffusion vers le pore. La dissolution est décrite comme une transformation de phase entre le solide et le fluide et est régie par la théorie thermodynamique de Gibbs, 1961 [17]. La force thermodynamique responsable de la dissolution ou de la précipitation, découle de la violation d'un équilibre à l'interface solide-fluide, selon la théorie des processus irreversibles. La diffusion quant à elle est régie par une différence de potentiel chimique. Dans le modèle discuté au paragraphe précédent, la force thermodynamique responsable du transfert en solution combine un terme en contrainte et un terme en concentration de soluté, autrement dit, un terme mécanique et un terme chimique.

D'autre part, le modèle en îles et chenaux permet de transmettre une contrainte intergranulaire entre les grains. Cette contrainte peut être exprimée en fonction des variables qui entrent en compte dans le transfert en solution, et sa distribution le long du joint de grain peut être étudiée.

À partir des hypothèses du modèle à l'échelle du grain de Lehner, 1995 [39], et de Lehner et Leroy, 2004 [41], nous avons aboutit à la loi de fluage présentée à l'équation I.21 et dont les détails seront discutés dans le chapitre suivant. Cette loi va permettre d'étudier l'évolution de la compaction par transfert en solution d'un agrégat de grain par un schéma numérique présenté dans le chapitre suivant. Les temps caractéristiques à chaque processus (dissolution et diffusion – nous ne considérerons pas la précipitation des minéraux sur les faces libres du grain), définis plus haut, sont en accord avec les estimations expérimentales [18], du point de vue de leur dépendance en d , et vont avoir une influence sur la compaction.

ÉTUDE DE LA COMPACTION D'UN AGRÉGAT DE GRAINS

1. Introduction

Le modèle présenté précédemment a pour particularité de tenir compte de la diffusion dans la zone de contact. Une mise en oeuvre numérique d'un tel modèle et à cette échelle reste encore à faire.

Nous avons vu dans le chapitre précédent que la contrainte normale intergranulaire apparaît dans les équations, donc on peut ainsi chercher une expression de la contrainte normale intergranulaire pour un taux de raccourcissement donné. Dans notre cas, nous nous intéressons à l'étude de la distribution de la contrainte normale intergranulaire. Il sera intéressant de justifier les hypothèses qu'a déjà avancées Robin 1978 [56] concernant la distribution de la contrainte normale, mais également d'étudier l'influence de la vitesse de compaction de l'agrégat ($\dot{\lambda}$) sur cette distribution.

A partir d'un problème élastique que nous allons poser (écriture des conditions aux limites, et des équations d'équilibre), et résoudre par la méthode des éléments finis, nous obtiendrons les états de contrainte et de déformation dans le solide soumis à cette contrainte intergranulaire, condition aux limites qui tient compte du transfert en solution.

La résolution du problème purement élastique (sans transfert en solution) va aboutir à une discussion sur la validité de la géométrie du modèle choisi, cette géométrie de sphère tronquée qui a été évoquée et utilisée depuis un certain temps dans les études théoriques (Robin, 1978 [56]).

L'étude de la contrainte normale intergranulaire est ensuite menée, et permet d'étudier l'importance de l'énergie d'Helmholtz dans la force thermodynamique. La contrainte normale et l'énergie d'Helmholtz étant toutes deux présentes dans l'expression de cette force, il s'agit d'étudier si l'énergie d'Helmholtz est négligeable par rapport à la contrainte normale. Cette approximation introduite dans la littérature par Lehner, 1995 [39] vise à simplifier la loi de

fluage en ne tenant pas compte de l'énergie d'Helmholtz.

Après la résolution du problème élastique et la discussion des résultats (section 2, paragraphe 2.2), la dérivation d'une loi de fluage (section 3, paragraphes 3.1 à 3.3) et la validation de l'approximation de Lehner (section 3, paragraphe 3.2), nous étudierons la compaction d'un agrégat de grain par transfert en solution, en se basant sur le modèle approché (section 3.4).

2. Le modèle d'étude

Notre étude est basée sur un modèle de deux grains en contact séparés par un joint dont la structure est en îles et chenaux. On suppose que le contact est plat pour permettre l'hypothèse d'un empilement périodique de grains. Le grain est modélisé par une sphère et on suppose qu'il a déjà subi de la dissolution intergranulaire. On a donc le modèle de sphères tronquées en contact, présenté à la figure II.1. Le système est soumis à une contrainte macroscopique de compression et à la pression de fluide du pore. Le joint de grain en îles et chenaux est pénétré par un fluide, qui permet la dissolution des grains dans celui-ci, et ensuite la diffusion de ces matériaux dissous, vers le pore. Cette structure permet également de transmettre une contrainte normale à l'interface grain-grain, comme il est montré à la figure II.1. Le contact est représenté par deux interfaces planes. Son épaisseur δ est de l'ordre du nanomètre. Les deux grains se dissolvent dans le fluide de la zone de contact, et les matériaux dissous sont transportés par diffusion à travers ce fluide, vers le pore. Les deux grains convergent à une vitesse $\dot{\lambda}$. Le flux de matériaux dans la zone de contact est supposé stationnaire pour assurer la symétrie de l'arrangement.

On présente dans cette section le problème aux limites à résoudre, et les équations mécaniques qui régissent le problème (le principe des travaux virtuels). Puis, on étudiera un problème préliminaire, purement élastique, sur la sphère tronquée pour mettre en évidence une discontinuité liée aux conditions de charge.

2.1 Le problème aux limites

2.1.1 La géométrie et les conditions aux limites

Pour des raisons de symétrie, on étudie le huitième de la sphère tronquée, représentée à la figure II.2. Le solide (le grain), qu'on suppose élastique linéaire, isotrope, occupe dans sa configuration courante un domaine Ω_t (dans la suite on ne distinguera plus le solide du domaine qu'il occupe). La frontière du domaine est composée de :

1. la surface de contact avec le deuxième grain notée $\partial\Omega_t^I$ dont la normale est dirigée selon l'axe 2 du repère cartésien orthonormé choisi (fig. II.2).

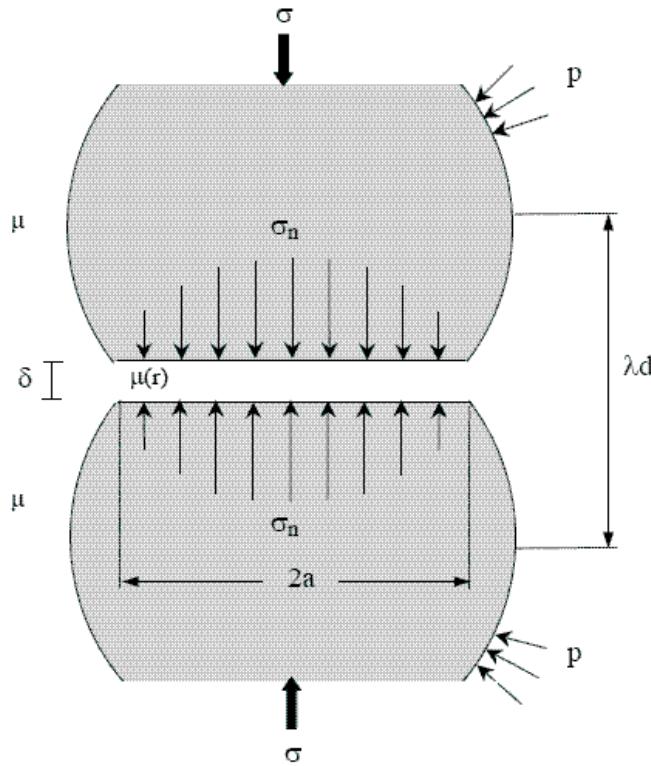


FIG. II.1 – Compaction par transfert en solution de deux grains identiques en contact. La zone de contact d'épaisseur δ contient du fluide qui varie selon la position r ($\mu(r)$). La pression de fluide du pore agit sur la surface libre du grain (le potentiel chimique du fluide du pore est noté μ). Les grains sont soumis à une contrainte macroscopique de compression et le long du contact, à la contrainte normale σ_n .

2. l'interface solide/fluide du pore notée $\partial\Omega_t^{sf}$.

$$\partial\Omega_t = \partial\Omega_t^I \cup \partial\Omega_t^{sf}$$

- Le long de l'interface grain-grain, le solide est soumis à la force intergranulaire F représentée par :

$$\mathbf{T}^I = \mathbf{n}^I F(\boldsymbol{\sigma}, C_s, \dot{\lambda}) \quad (\text{II.1})$$

La condition aux limites s'écrit :

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}^I = \mathbf{T}^I \quad \text{sur} \quad \partial\Omega_t^I \quad (\text{II.2})$$

La contrainte normale à l'interface est : $\sigma_n = F$

La dépendance implicite de F sur le tenseur des contraintes dans le solide est due à la contribution de l'Energie d'Helmholtz dans la force responsable de la dissolution.

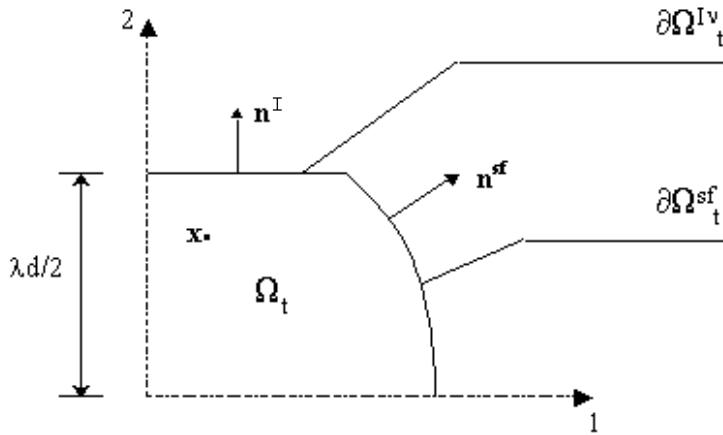


FIG. II.2 – Le grain dans sa configuration courante.

- Sur l'interface solide/pore, le solide est soumis à la pression de fluide du pore p_f .

$$\mathbf{T}^{sf} = -\mathbf{n}^{sf} p_f \quad (p_f > 0) \quad (\text{II.3})$$

La condition aux limites s'écrit :

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}^{sf} = \mathbf{T}^{sf} \quad \text{sur} \quad \partial\Omega_t^{sf} \quad (\text{II.4})$$

- Afin d'assurer la périodicité de l'arrangement de grains, on pose comme hypothèse que la surface de contact doit être plane dans la configuration courante.

$$\forall \mathbf{x} \in \partial\Omega^I, \mathbf{x} \cdot \mathbf{n}^I = \lambda \frac{d}{2} \quad (\text{II.5})$$

Cette condition est une condition en déplacement incompatible avec les conditions en force précédentes. L'analyse de perturbation géométrique qui constitue l'objet du paragraphe suivant est introduite pour remédier à ce problème d'incompatibilité.

2.1.2 Analyse de perturbation géométrique - double linéarisation

Pour que la condition précédente soit compatible avec les conditions aux limites en force, il faut que dans la configuration de référence, non chargée, la surface de contact ne soit pas plane. Dans ce cas, sa forme est inconnue. Nous allons démontrer que nous n'avons pas besoin de connaître nécessairement la forme de l'interface dans la configuration de référence pour pouvoir déterminer $\boldsymbol{\sigma}$ et $\boldsymbol{\epsilon}$.

La méthode est la suivante : on introduit une nouvelle configuration de référence où la forme de l'interface est connue, plane, et on se place dans un cadre d'hypothèses qui nous permettra

d'écrire les équations d'équilibre et les conditions aux limites sur cette nouvelle configuration de référence. On se propose ensuite de mener l'analyse sur cette nouvelle configuration de référence.

On aura donc deux linéarisations. La linéarisation «classique» qui permet de passer de la configuration courante à la configuration de référence Ω_0 avec les hypothèses nécessaires correspondantes. Ensuite, on procède à une deuxième linéarisation qui permet de passer de cette configuration de référence Ω_0 à la nouvelle configuration de référence Ω_* .

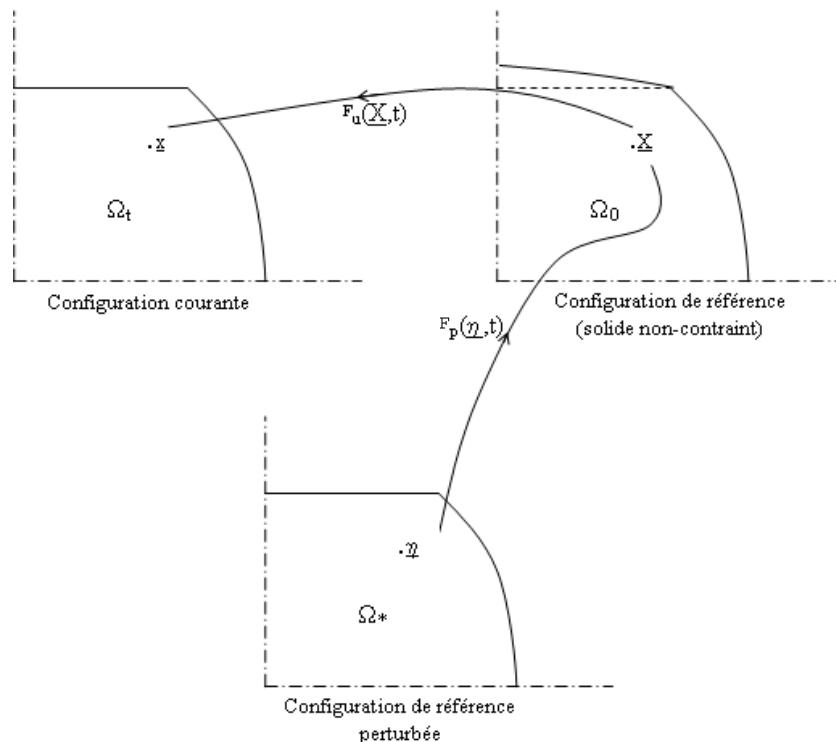


FIG. II.3 – Les différentes configurations de l'analyse de perturbation géométrique.

2.1.2.1 Hypothèses

Les hypothèses qui rendent possible cette double linéarisation sont données ci-après :

- Hypothèses sur la transformation entre Ω_0 et Ω_* :
 1. On suppose que la transformation entre la configuration de référence inconnue Ω_0 et

cette nouvelle configuration Ω_* :

$$\begin{aligned}\phi_p : \quad \Omega_* &\longrightarrow \Omega_0 \\ \boldsymbol{\eta} &\longmapsto \phi_p(\boldsymbol{\eta}, t) = \mathbf{X} = \boldsymbol{\eta} + \mathbf{p}(\boldsymbol{\eta})\end{aligned}\tag{II.6}$$

est une perturbation infinitésimale $\mathbf{p}(\boldsymbol{\eta})$ telle que :

$$\|\mathbf{p}(\boldsymbol{\eta})\| \ll d \tag{II.7}$$

$$\left\| \frac{\partial \phi_p}{\partial \boldsymbol{\eta}}(\boldsymbol{\eta}, t) - \mathbb{I} \right\| \text{sur } \Omega_* \ll 1 \tag{II.8}$$

(La transformation est purement géométrique et n'est associée à aucune déformation matérielle). On appellera la nouvelle configuration Ω_* , la configuration de référence «perturbée».

2. L'hypothèse précédente implique celle des déformations infinitésimales

$$\|\mathbf{e}(\mathbf{X}, t)\| \ll 1 \tag{II.9}$$

3. La condition II.7 constitue l'hypothèse des petits déplacements, d étant une longueur caractéristique du problème.

– Hypothèses sur la transformation entre Ω_0 et Ω_t :

1. Le déplacement \mathbf{u} entre Ω_0 et Ω_t est défini par :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \mathbf{X} \quad \text{avec} \quad \mathbf{X} \longmapsto \phi_u(\mathbf{X}, t) = \mathbf{x} \tag{II.10}$$

La transformation est aussi infinitésimale telle que :

$$\|\mathbf{u}\| \ll d \tag{II.11}$$

$$\left\| \frac{\partial \phi_u}{\partial \mathbf{X}}(\mathbf{X}, t) - \mathbb{I} \right\| \ll 1 \tag{II.12}$$

2. Cette hypothèse implique comme dans le premier cas, celle des petites déformations.

3. L'équation II.11 indique comme dans la première transformation qu'on est en hypothèse des petits déplacements.

– On est donc en hypothèses des petites perturbations autour des deux configurations de référence.

2.1.2.2 Conséquences

- Les hypothèses des transformations infinitésimales (hypothèse numéro 1.) impliquent que l'on peut confondre au premier ordre en $\|\nabla \mathbf{u}\|$ et $\|\nabla \boldsymbol{\eta}\|$ respectivement les gradients lagrangien et eulérien **grad** et ∇_0 et les gradients ∇_0 et ∇_* . Nous en verrons l'utilité lors de l'écriture des équations d'équilibre sous forme linéarisée, d'abord sur la configuration de référence, ensuite sur la nouvelle configuration de référence, connue (annexe A).
- Les hypothèses des petits déplacements permettent de confondre, au même ordre d'approximation que précédemment, la géométrie dans la configuration courante et celle dans la configuration de référence, c'est-à-dire \mathbf{X} et \mathbf{x} , et respectivement \mathbf{X} et $\boldsymbol{\eta}$.

En résumé, les hypothèses des petites perturbations, faites précédemment, permettent d'écrire le principe des travaux virtuels aussi bien sur la configuration de référence que sur la configuration de référence perturbée Ω_* . Le gradient du déplacement peut donc être estimé à partir de Ω_* .

2.1.3 Formulation faible du problème

La formulation variationnelle du problème aux limites présenté au paragraphe 2.1.1 est maintenant donnée. C'est l'équation expression du principe de travaux virtuels.

2.1.3.1 Le principe des travaux virtuels sur la configuration courante Ω_t

Il s'écrit

$$\int_{\Omega_t} \boldsymbol{\sigma} : \nabla^s \delta \mathbf{u} \, dV_t = \int_{\partial \Omega_t^{sf}} -\mathbf{n}^{sf} \cdot P_f \cdot \delta \mathbf{u} \, dS_t + \int_{\partial \Omega_t^I} \mathbf{n}^I \cdot F \cdot \delta \mathbf{u} \, dS_t \quad (\text{II.13})$$

où \mathbf{u} est champ de déplacement, inconnu du problème

$\delta \mathbf{u}$ est le champ de déplacement admissible virtuel

∇^s est la partie symétrique du gradient dans Ω_t

$$\nabla^s \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} (\mathbf{grad} \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{grad} \delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)^T)$$

grad est le gradient dans Ω_t

2.1.3.2 La double linéarisation de l'équation du principe des travaux virtuels

Étant en hypothèse de petites perturbations, nous pouvons écrire cette équation d'équilibre sur la configuration de référence Ω_0 puis sur la configuration de référence «perturbée» Ω_* . À partir de ces hypothèses on peut donc écrire :

$$\int_{\Omega_*} \boldsymbol{\sigma} : \nabla_*^s \boldsymbol{\delta u} \, dV_* = \int_{\partial\Omega_*^{sf}} -\mathbf{n}_*^{sf} \cdot P_f \cdot \boldsymbol{\delta u} \, dS_* + \int_{\partial\Omega_*^I} \mathbf{n}_*^I \cdot F \cdot \boldsymbol{\delta u} \, dS_* \quad (\text{II.14})$$

La démonstration est donnée à l'annexe A. Dans la suite, les calculs sont faits sur Ω_* et l'indice * est omis.

2.2 Un calcul purement élastique

L'hypothèse de deux sphères tronquées (grains) en contact subissant une contrainte de compression a été émise ces dernières années pour modéliser le transfert en solution. On souhaite résoudre le problème aux limites présenté précédemment, c'est-à-dire celui d'un huitième d'une sphère tronquée subissant une densité de force \mathcal{F} sur sa face supérieure. Mise à part la contribution du transfert en solution dans cette densité de force, que nous allons voir ultérieurement, nous allons nous intéresser d'abord au comportement mécanique de ce système, qui n'a pas encore fait l'objet d'investigation par le calcul. Nous avons seulement comme référence les travaux de Tada et Siever, 1986 [67] et Gratier, 1993 [18] qui ont constaté, en simulant expérimentalement le poinçonnage d'un grain par un autre, une forte concentration d'énergie élastique de déformation au bord de la surface de contact.

On se propose alors de résoudre quelques problèmes purement élastiques, sans transfert en solution d'abord, pour voir si on retrouve ces résultats.

En gardant la même géométrie (la sphère tronquée), on remplace la densité de force \mathcal{F} (voir éq. II.1), qui est de forme parabolique [56], par un chargement uniformément réparti, par souci de simplicité.

La géométrie est également amenée à être simplifiée (transformation de l'arc de cercle de la sphère tronquée en une droite pour avoir un talus) pour permettre une approche analytique et une comparaison entre cette approche et le calcul par éléments finis.

Le problème préliminaire que nous allons traiter maintenant va déjà permettre de connaître la réponse mécanique d'une sphère tronquée en réponse à un chargement réparti sur sa surface de troncature. On introduit ensuite une pression de fluide sur le côté circulaire du solide ou sur la pente du talus selon le cas, afin de se rapprocher du problème avec transfert en solution.

On terminera cette section par une discussion des résultats en comparant l'approche analytique et l'approche numérique. On fera également une discussion sur l'effet des différents paramètres de l'approximation par élément fini sur les résultats. Ces discussions aboutiront au choix pertinent de paramètres idéaux pour le calcul avec transfert en solution.

2.2.1 La géométrie et les conditions aux limites

Un cas avec la même géométrie que celle du problème avec transfert en solution, et un autre avec une géométrie trapézoïdale seront traités. Les géométries et les conditions de chargement des problèmes que nous allons résoudre sont présentées aux figure II.4.

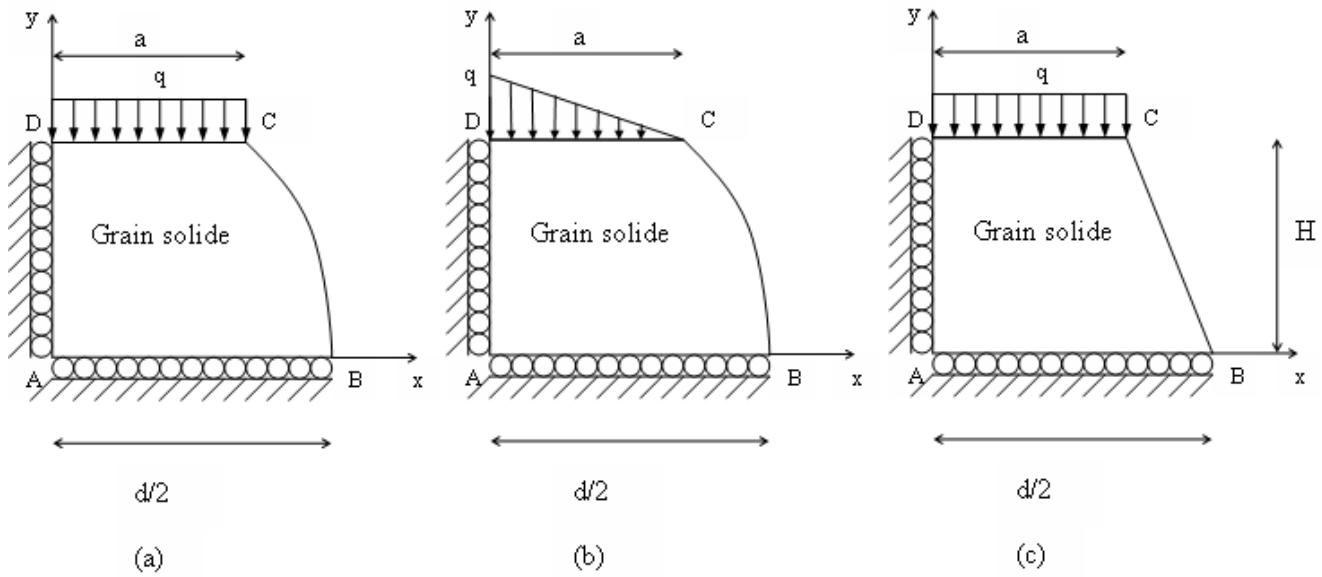


FIG. II.4 – Les problèmes aux limites en calcul élastique. (a) Sphère tronquée soumise à un chargement uniformément réparti q . (b) La même géométrie avec un chargement linéaire. (c) Talus soumis à un chargement uniformément réparti.

Les données géométriques sont pour la sphère tronquée :

$$d = 1 \cdot 10^{-4} \text{ m}$$

$$H = \lambda d/2 \text{ avec } \lambda = 0,7$$

$$a = \frac{d}{2}\sqrt{1 - \lambda^2}$$

et pour le talus :

$$H = 0,7$$

$$d = 2$$

$$a = 0,714$$

(quantités adimensionnelles).

Les conditions aux limites sont les suivantes :

- dans le premier problème aux limites (fig. II.4a), le solide est soumis sur sa partie supérieure (CD) à un chargement uniformément réparti d'intensité q . Les côtés AB et AD étant des axes de symétrie, le déplacement est empêché verticalement sur le côté AB et horizontalement sur le côté AD . La surface en contact avec le pore (BC) est choisi libre (sauf au point B) pour étudier l'effet du seul chargement supérieur (pas de pression de pore donc). Nous discuterons de l'effet de l'existence d'une pression de pore plus tard.
- dans un deuxième problème, on testera l'influence du type de chargement en adoptant un chargement linéaire dont la plus grande valeur de l'intensité est q et la plus petite 0 (fig. II.4b) – le but étant de se rapprocher de la forme de la répartition de σ_n , condition aux limites du problème avec transfert en solution, et qui n'est pas uniforme.
- le troisième problème (fig. II.4c) avec une géométrie de talus, sera traité dans le but de pouvoir faire une comparaison avec une solution analytique que l'on présentera dans le paragraphe suivant.

Le choix de la valeur de la charge q peut être basé sur la pression lithostatique s'exerçant à une profondeur de 4km (si on se réfère à la profondeur où commence le transfert en solution). Soit la densité de masse des sédiments sus-jacents égale à 2200kg/m^3 et l'accélération de la pesanteur $g = 10\text{m/s}^2$, on a :

$$q = -4000 \times 2200 \times 10 = -8,8 \cdot 10^7 \text{Pa} = 88 \text{Mpa}$$

2.2.2 Approche analytique

Notre approche analytique part d'un espace semi-infini chargé sur sa surface par une densité de force, infinie à gauche et limitée à droite (fig. II.5a). Ensuite, on ramène ce problème au problème de la figure II.6, pour obtenir l'état de contrainte dans un talus chargé sur sa partie supérieure.

La répartition des contraintes, pour le problème de la figure II.5(a), s'obtient à partir de la fonction de contrainte suivante (voir Timoshenko et Goodier [69]) :

$$\Phi = -\frac{q}{2\pi} \left((x^2 + y^2) \arctan \frac{y}{x} - xy \right) \quad (\text{II.15})$$

On rappelle les équations d'équilibre en coordonnées polaires :

$$\begin{aligned} \sigma_r &= \frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \theta^2}, \\ \sigma_\theta &= \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2}, \\ \sigma_{r\theta} &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r \partial \theta} = -\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right) \end{aligned} \quad (\text{II.16})$$

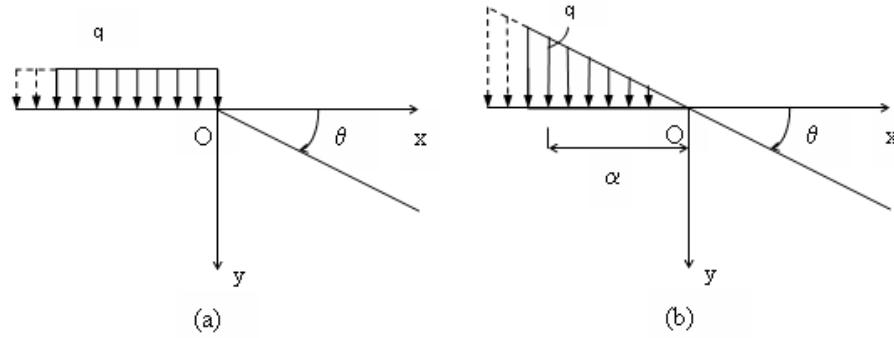


FIG. II.5 – Problèmes de demi-espace supportant deux types de chargement : (a) uniformément réparti et (b) linéairement réparti.

En utilisant le passage de coordonnées polaires en cartésiennes et inversement

$$x = r \cos \theta, y = r \sin \theta, \arctan \frac{y}{x} = \theta$$

on vérifie par les conditions d'équilibre que les solutions suivantes dérivent de la fonction de contrainte (II.15) :

$$\begin{aligned}\sigma_x &= -\frac{q}{\pi} \left(\arctan \frac{y}{x} + \frac{xy}{x^2 + y^2} \right) \\ \sigma_y &= -\frac{q}{\pi} \left(\arctan \frac{y}{x} - \frac{xy}{x^2 + y^2} \right) \\ \sigma_{xy} &= -\frac{q}{\pi} \frac{y^2}{x^2 + y^2}\end{aligned}\quad (\text{II.17})$$

Ces premiers résultats montrent une singularité dans la contrainte de cisaillement au point O ($x = 0, y = 0$). Ailleurs, sur la surface, la contrainte de cisaillement est nulle. En fait, la discontinuité du chargement au point O est à l'origine de cette singularité en contrainte à la surface. Le changement brusque des conditions aux limites provoque ce genre de singularité.

Qu'en est-il si ce changement au niveau des conditions aux limites est progressif? Considérons alors le cas d'un chargement linéaire comme celui de la figure II.5b, qui diminue vers zéro jusqu'au point O . On détermine la solution en partant de la fonction de contrainte suggérée par Timoshenko et Goodier [69] p.135 :

$$\Phi = -\frac{q}{2\pi\alpha} \left[\left(\frac{1}{3}x^3 + xy^2 \right) \arctan \frac{y}{x} + \frac{1}{3}y^3 \log(x^2 + y^2) - \frac{1}{3}x^2y \right]$$

La solution s'obtient en vérifiant que cette fonction de contrainte vérifie les conditions d'équilibre II.16. On trouve que la contrainte vaut :

$$\sigma_{r\theta} = -\frac{q}{6\alpha\pi} r \sin \theta [6\theta \cos 2\theta + (8 + 3 \log r^2) \sin 2\theta]$$

Là encore, la singularité existe au point O , lorsque r est égal à 0.

Etudions maintenant le problème d'un espace semi-infini, représenté à la figure II.6. La solution de ce problème découle de la solution générale du problème d'un coin soumis à l'action des forces agissant sur ses faces (fig.II.7), donnée dans [69] :

$$\begin{aligned}\sigma_\theta &= \frac{q}{k} \left(-k + \frac{1}{2} \tan \beta - \theta - \frac{1}{2} \tan \beta \cos 2\theta + \frac{1}{2} \sin 2\theta \right) \\ \sigma_r &= \frac{q}{k} \left(-k + \frac{1}{2} \tan \beta - \theta - \frac{1}{2} \sin 2\theta + \frac{1}{2} \tan \beta \cos 2\theta \right) \\ \sigma_{r\theta} &= \frac{q}{k} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \tan \beta \sin 2\theta - \frac{1}{2} \cos 2\theta \right)\end{aligned}\quad (\text{II.18})$$

avec $k = \tan \beta - \beta$

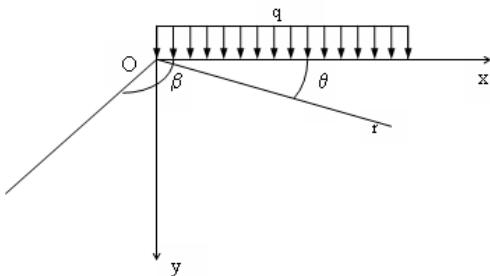


FIG. II.6 – Problème d'un demi-espace limité par un talus. La charge s'étend à l'infini à droite.

Dans ces expressions, si on choisit une valeur de β supérieure à $\pi/2$, on obtient l'état de contrainte dans le «talus semi-infini» (fig. II.6)¹. Et on remarque qu'au point O , c'est-à-dire à $\theta = \pi/2$, la contrainte de cisaillement prend une valeur non nulle, ce qui traduit l'existence d'une singularité au point O . En tous les autres points de la surface de chargement, le cisaillement est nul.

En prenant un angle β équivalent à l'angle du talus de la figure II.4(c), c'est-à-dire $\beta =$

¹Notons qu'en remplaçant dans les expressions II.18, l'angle β par π , on obtient les solutions du premier problème, l'espace semi-infini de la figure II.5a, solutions données à l'équation II.17

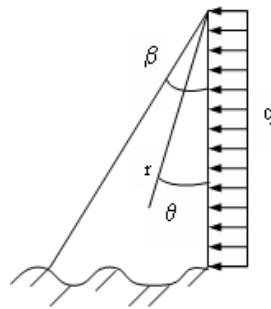


FIG. II.7 – Problème d'un coin soumis à un chargement sur ses faces.

$0,3878 \text{ rad}$ (calculé à partir des données géométriques), on trouve une contrainte de cisaillement au point de singularité qui vaut :

$$\sigma_{r\theta}(O) = -2 \cdot 10^7 \text{ MPa}$$

Si on limitait ce talus –sur sa surface– aux dimensions du problème aux limites de la figure II.4(c), on aurait la représentation graphique de la solution présentée à la figure II.8 (la charge q s'étendant de zéro –à l'origine du chargement–, à $0,714$ –le point O du talus semi-infini).

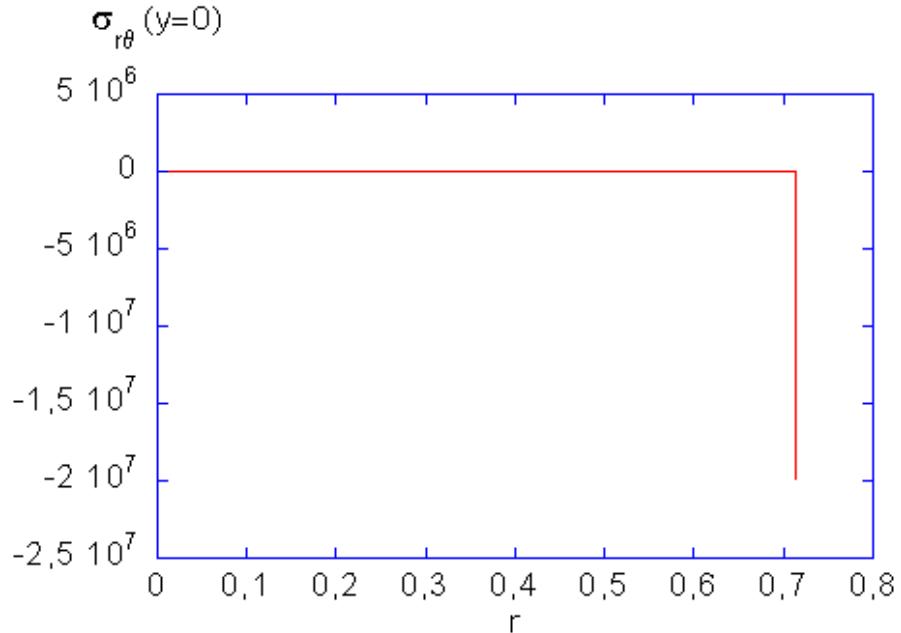


FIG. II.8 – La contrainte de cisaillement de surface dans le cas du talus semi-infini.

Conclusion

La résolution analytique des problèmes d'espaces semi-infinis a permis de montrer l'existence d'une singularité en contrainte de surface lorsque la condition aux limites (en force) change brusquement. Elle est due à la discontinuité des conditions aux limites au point $x = y = 0$, d'après les premières analyses sur les espaces semi-infinis «plats».

En étudiant un espace semi-infini limité par la pente d'un talus et qui est chargé sur sa surface supérieure, on se rapproche des conditions aux limites des problèmes que l'on veut traiter (fig. II.4). Le bord du talus qui coïncide avec le bord du chargement est aussi un point de singularité. On peut concevoir qu'il en est de même pour le problème du huitième de sphère tronquée (fig. II.4(a)) et du talus (II.4(b)), même si les conditions aux limites ne sont pas tout à fait les mêmes. La dernière solution analytique (fig. II.8) est intéressante pour une comparaison avec les calculs par éléments finis : elle donne une valeur de la contrainte de cisaillement au point de singularité.

On note, en outre, que le changement progressif de la condition aux limites (cas de la charge linéaire fig.II.4(b)) n'enlève pas la singularité.

Comment le calcul par éléments finis va-t-il pouvoir capturer cette singularité ? Quels seront les paramètres de la méthode qui vont être choisis et que l'on utilisera pour le calcul avec transfert en solution ? C'est ce que nous allons voir dans la section suivante.

2.2.3 Résolution par éléments finis

On veut étudier le problème posé par cette singularité par la méthode des éléments finis. Cette méthode sera appliquée à la résolution des problèmes élastiques, dont les conditions de chargement sont simplifiées, mais se rapprochent de celles du problème avec transfert en solution (les problèmes élastiques introduits au début du paragraphe 2.2.1).

L'utilisation de la méthode des éléments finis se fait par l'intermédiaire du code de calcul SARPP. Pour ces calculs élastiques, nous utilisons les schémas de calcul classiques en élasticité linéaire, qui sont déjà programmés dans SARPP, et dont les détails peuvent être retrouvés dans les ouvrages de référence sur la méthode des éléments finis (Dhatt et Touzot, 1984[10], Hugues, 1987 [33]).

Les éléments que nous utiliserons dans ces calculs sont de continuité C^0 . Nous comparerons les résultats obtenus avec des éléments rectangulaires de type Lagrange à 9 noeuds, avec les résultats des éléments triangulaires à 6 noeuds. Ce deuxième type d'élément a été choisi pour pouvoir construire un maillage radial, qui part de la jonction entre la surface de chargement et le bord libre de la sphère tronquée. Ce maillage radial est motivé par les résultats analytiques précédents, qui prédisent une contrainte de cisaillement dépendante uniquement de θ (et non de r).

Des programmes spéciaux pour la génération de maillages de sphère tronquée, ont été élaborés et implantés dans SARPP. Le maillage est constitué de deux groupes d'éléments : ceux du volume et ceux de l'interface. Ces derniers sont ceux qui se trouvent sur la dernière rangée et qui sont en contact avec la surface de chargement. Les éléments de l'interface ont, en plus des points de Gauss intérieurs, des points de Gauss de surface qui se trouvent sur le côté supérieur de chaque élément. C'est sur ces points de Gauss que seront estimées les contraintes et les déformations sur l'interface. Le chargement, lui, est appliqué par l'intermédiaire d'éléments de peau.

On va s'intéresser particulièrement aux contraintes de cisaillement de surface afin de comparer les résultats avec les solutions analytiques. Les résultats sont présentés sous forme de courbes qui représentent la distribution des contraintes sur la surface de chargement, et d'isovaleurs dessinées par le post-processeur XD3D, représentant la moyenne des valeurs calculées aux points de Gauss de chaque élément.

Les problèmes aux limites à résoudre sont ceux de la figure II.4. Les problèmes sont dans un premier temps traités en déformation plane pour se rapprocher de l'approche analytique (on considère donc des cylindres infiniment longs). Un calcul en axisymétrie, le cas qui nous intéresse pour le calcul avec transfert en solution, est ensuite traité et discuté. Les données du calcul sont récapitulées dans le tableau II.1. Les longueurs sont ensuite rendues adimensionnelles par une division par $d = 10^{-4}m$.

Quantités	Unité	Valeurs exactes
Pression q	Pa	$-8.8 \cdot 10^7$
Module d'Young E	Pa	$82 \cdot 10^9$
Coefficient de Poisson μ		0.2
d	m	10^{-4}
H	m	$0.35 \cdot 10^{-4}$
a	m	$0.3571 \cdot 10^{-4}$

TAB. II.1 – Quantités utilisées pour le problème de la sphère tronquée chargée uniformément

Les résultats sont présentés et discutés ci-après. Un accent sera mis sur la qualité des résultats obtenus par le calcul élément fini : on testera les deux types d'éléments pour connaître celui qui capture au mieux la singularité, et on étudiera l'effet du raffinement du maillage, et du nombre de point de Gauss. Les paramètres idéaux du calcul élément fini seront gardés pour le calcul avec transfert en solution. Idéalement, on appliquera ensuite une pression de fluide sur la face circulaire.

2.2.3.1 Sphère tronquée soumise à un chargement uniforme

Les calculs sont tout d'abord faits avec des éléments rectangulaires et un maillage relativement grossier de 40×60 éléments.

La contrainte de cisaillement est représentée à la figure II.9 sous forme d'isocontours. On remarquera la singularité de la contrainte dans le dernier élément de l'interface. La contrainte de cisaillement est négative dans ce coin et est de l'ordre du $-3 \times 10^7 Pa$, tandis que dans les autres éléments de l'interface, cette contrainte est nulle. Ces résultats sont cohérents avec ceux de l'approche analytique. La distribution de la contrainte de cisaillement dans le solide montre un bulbe de contrainte, qui part du coin de la sphère, avec une valeur maximale qui se trouve à peu près sous la limite du chargement. On constate que dans la solution analytique correspondant à l'espace semi-infini (éq. II.17), la valeur de la contrainte de cisaillement est également maximale à l'abcisse $x = 0$, qui correspond à la limite du chargement. Les résultats trouvés correspondent donc à ce que nous avons prédit dans l'approche analytique.

La représentation graphique sous forme de courbes permet de mieux analyser la singularité en contrainte. Les courbes sont tracées à partir des valeurs trouvées aux points de Gauss de surface de chaque élément de surface. Nous avons 40 éléments de surface, ce qui fait 120 points si on a 3 points de Gauss par élément. En déterminant la contrainte sur trois points de Gauss de surface par élément (figure II.10(a)), on constate que la courbe remonte dans le dernier élément. Cette remontée est en fait due à une oscillation des valeurs de la contrainte, qui commence dès les premiers éléments, et qui s'amplifie dans le dernier élément (représenté par les trois derniers points de la figure).

En faisant varier le nombre de points de Gauss de surface on remarque qu'avec un seul point de Gauss, la solution est plus «lisse» (fig II.10(b)), et se rapproche plus de la solution analytique qui prédit une contrainte de cisaillement nulle partout et qui diminue brusquement au dernier point. Cette influence du nombre de point d'intégration est discutée dans le paragraphe suivant. Dans les deux cas, le calcul élément fini confirme l'existence d'une singularité, qui est mieux capturée en ne mettant qu'un seul point d'intégration.

Ce maillage est encore trop grossier pour avoir une bonne approximation de la solution exacte. Nous pouvons le voir sur le tracé des isovaleurs, mais aussi sur les courbes de la contrainte de cisaillement. À la figure II.10 (b), on constate que la diminution de la contrainte de cisaillement commence à partir du troisième élément avant le dernier (les trois derniers points de la figure) et non concentrée au dernier élément. Il faudrait donc raffiner un peu plus le maillage.

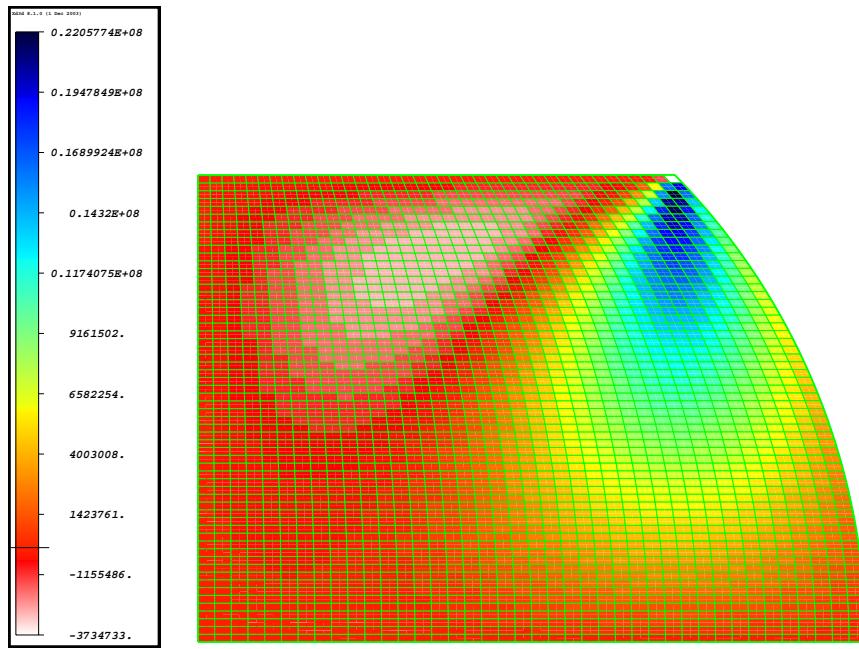


FIG. II.9 – La contrainte de cisaillement à la surface dans le cas d'un chargement uniforme. Représentation des isovaleurs en constant par élément. La contrainte représentée dans les éléments de la dernière rangée est celle calculée au points de Gauss de surface.

Les particularités d'une approximation des contraintes aux interfaces inter-élémentaires dans notre cas

Le calcul est résolu par la méthode des déplacements. Au vu de ces premiers résultats, il nous paraît utile de discuter de la qualité de la solution élément fini, afin de pouvoir comparer au mieux les résultats analytiques aux résultats numériques. L'existence d'une singularité justifie d'autant plus une étude rapprochée de cette qualité.

En déterminant la contrainte de cisaillement de surface sur trois points d'intégration, on constate que les valeurs aux deux points de Gauss extérieurs de chaque élément oscillent autour de celle du milieu, oscillation qui s'amplifie à mesure que l'on s'approche du bord (fig. II.10(a)). Ceci est dû au fait que dans notre calcul élément fini, le champ de contrainte à la surface des éléments n'est pas statiquement admissible. Le champ de déplacement obtenu par l'approximation

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_{a=1}^N \mathbf{N}(x) \cdot \mathbf{u}_a, \quad (\text{avec } N \text{ nombre de noeuds}), \quad (\text{II.19})$$

est cinématiquement admissible par construction. Les déformations et donc les contraintes

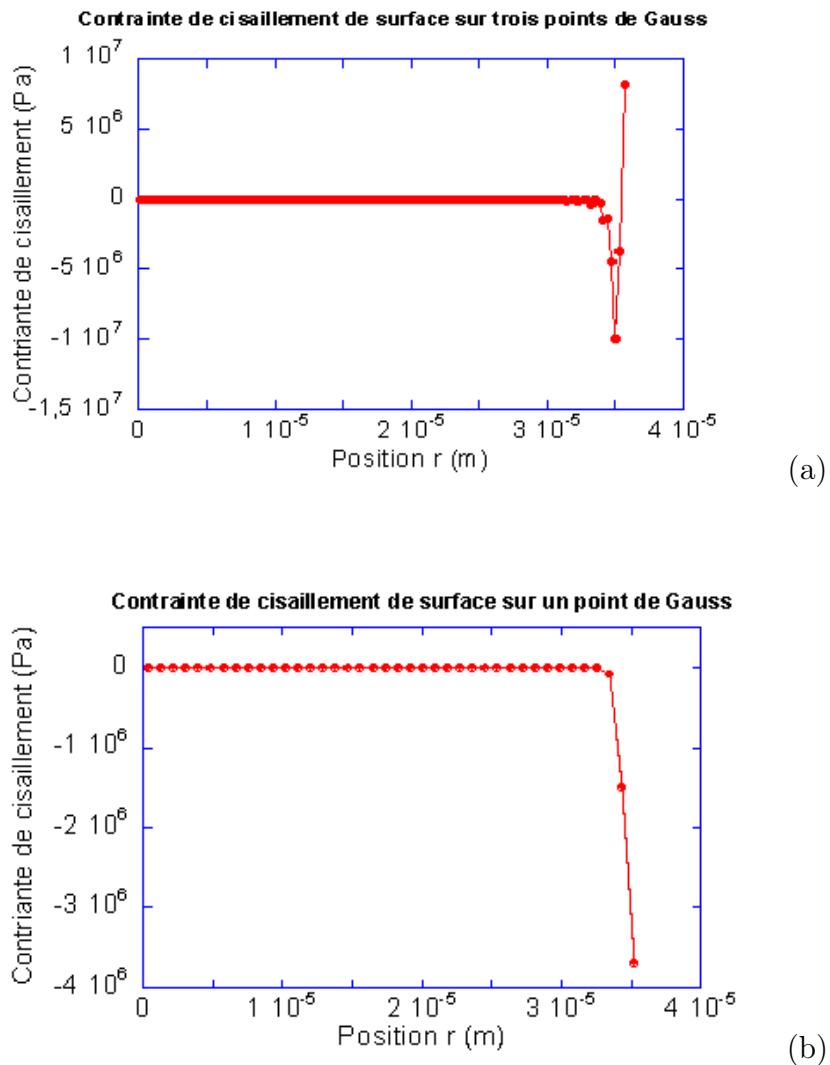


FIG. II.10 – La contrainte de cisaillement de surface dans le cas d'un chargement uniforme. (a) Contrainte sur la surface, déterminée en trois points de Gauss, (b) en un point de Gauss.

(en élasticité) sont dérivées de ce champ de déplacement approché :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = [\mathbf{B}] \cdot \{\mathbf{u}\} \quad (\text{II.20})$$

où $[\mathbf{B}]$ contient les dérivées des fonctions de forme $\langle N \rangle$. Ces dernières n'étant pas continues à l'interface des éléments, qui sont de continuité C^0 , le champ de déformation (dérivé du déplacement), et puisqu'on est en élasticité, le champ de contrainte, est discontinu sur cette interface, et donc n'est pas statiquement admissible. Il en résulte que la solution approchée (la solution par élément fini) est moins lisse que la solution exacte, pour laquelle le champ de contrainte associé au champ de déplacement est statiquement admissible. Dans beaucoup de cas, ces oscillations peuvent être négligées. Cependant, avec l'existence d'une singularité, les erreurs sont amplifiées au voisinage de ce point de singularité.

Une alternative serait d'utiliser des éléments de classe supérieure à C^0 (par exemple C^1, \dots , etc) pour lesquelles les dérivées sont continues sur les interfaces inter-élémentaires.

La qualité des résultats peut également être améliorée en appliquant les méthodes de lissage existantes. Une revue de ces méthodes est donnée à l'annexe B. Ces méthodes permettent d'avoir une bonne valeur des contraintes (se rapprochant de la solution analytique) aux noeuds. D'ailleurs, Hinton et Campbell(1974)[29] présentent des exemples de validation de ces méthodes qui montrent que les contraintes (aux noeuds) lissées par la méthode locale sont égales aux contraintes calculées analytiquement. Effectivement, les noeuds sont dans la plupart des analyses les endroits les plus utiles pour l'évaluation des contraintes, alors que c'est aux points de Gauss que celle-ci est meilleure. D'où l'intérêt des méthodes précédentes. Par ailleurs, il faut noter que ces méthodes ne donnent de résultats satisfaisants que pour les cas où il n'y a pas de singularité.

Dans notre cas, l'étude est faite sur les points de Gauss et nous avons une singularité. On s'intéresse donc à une façon de bien estimer les contraintes sur les points de Gauss de cette interface, et non aux noeuds. La question est de savoir comment obtenir une contrainte lissée sur cette interface. La notion de superconvergence est une des réponses à cette question. Il a été démontré qu'il existe certains points où la contrainte «approchée» coïncide avec la solution exacte. Ces points sont appelés points de superconvergence (Barlow, 1976,[3]). L'intérêt de cette notion réside surtout dans le fait qu'elle a amélioré considérablement les résultats obtenus par la méthode locale de lissage, puisque la valeur au noeud est calculée à partir de la

moyenne des valeurs en ces points, qui sont donc des valeurs exactes. C'est ce qui a fait le succès de cette méthode. Un débat persiste sur le lien entre ces points de superconvergence et les points d'intégration réduite (Zlamal, 1978)[77]. L'intérêt, dans notre cas, de l'existence de ces points de superconvergence c'est qu'on peut évaluer la contrainte uniquement en ces points, puisque ce qui nous intéresse ce sont les contraintes aux points de Gauss, et non aux nœuds (ce ne sera pas la peine de faire la moyenne). Hinton et Campbell [29] ont établi que pour des éléments quadrilatéraux, la contrainte lissée évaluée à la coordonnée ($\varepsilon = 0, \eta = 0$) correspond à la moyenne des contraintes approchées calculées aux points de Gauss. Zienkiewicz et Zhu (1992) [76] en concluent que ce point est le point de superconvergence. Si on cherche à intégrer les contraintes sur la frontière du domaine, le point de superconvergence serait au milieu de l'élément. Dans notre cas, on peut considérer que le point de superconvergence se trouve donc au milieu de la face supérieure de l'élément, au point de Gauss de coordonnée ($\varepsilon = 0, \eta = 0$) de cette face. Un calcul numérique simple que nous avons fait sur un cas parfait de bloc rectangulaire soumis sur toute sa face supérieure à une pression uniforme, et qui se résoud analytiquement, a confirmé la validité de cette supposition. En effet, ce calcul montre que la valeur de la contrainte au point de Gauss du milieu correspond à la contrainte exacte. Par ailleurs, si la valeur en ce point est égale à la moyenne des valeurs aux points de Gauss (Hinton et Campbell [29]), on peut donc soit prendre la moyenne des valeurs aux points de Gauss de surface (dans nos calculs on a trois points à l'interface) soit évaluer la contrainte seulement sur le point milieu. Mais la première approche n'est valable (comme dans les méthodes de lissage) que lorsqu'on n'a pas de singularité (vérifié pour le cas d'un bloc rectangulaire). En effet, l'erreur (l'oscillation) sur les autres points de Gauss (autre que le point milieu) est amplifiée avec de la singularité. Prendre la moyenne ne sera donc pas satisfaisant. Voilà pourquoi dans notre cas, en estimant les contraintes sur un seul point de Gauss de surface par élément, on a des résultats qui se rapprochent plus de la solution analytique. On remarquera également que la valeur de la contrainte sur les points de Gauss du milieu de chaque élément, correspondent aux valeurs lorsqu'on a qu'un seul point de Gauss (figure II.11).

Dans les deux problèmes élastiques suivants, la détermination des contraintes sur l'interface se fera avec un seul point de Gauss de surface, qui est au milieu de l'interface et est donc le point de superconvergence.

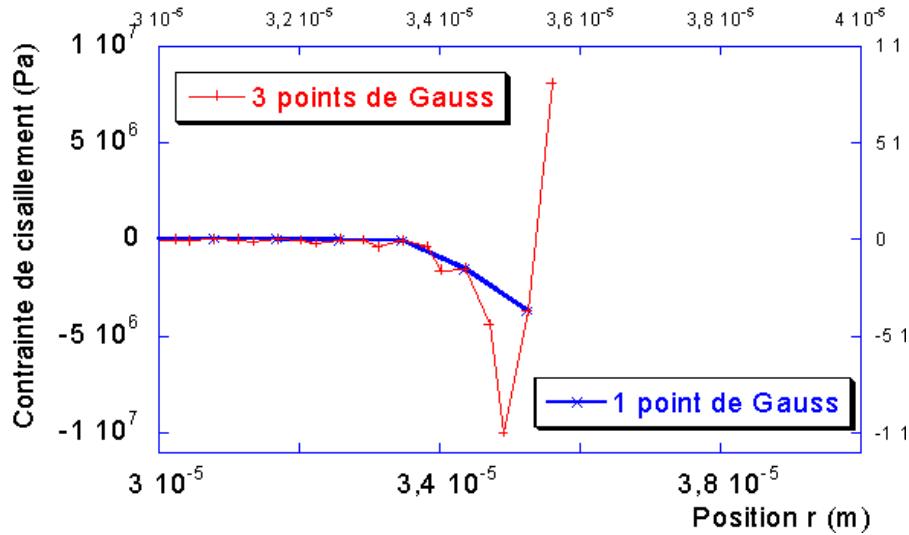


FIG. II.11 – Cas de la sphère tronquée sous chargement uniformément réparti. Contrainte de cisaillement de surface calculée sur 1 et 3 points d'intégration.

2.2.3.2 Le talus uniformément chargé

On présente ici le résultat de la résolution par élément fini du problème de la figure II.4(c), pour lequel on a la solution analytique du problème qui s'en rapproche le plus. Les longueurs peuvent être prises adimensionnelles : $H = 0,7$, $L = 1$, $a = 0,714$.

L'équation (II.18) donne pour une valeur de β la contrainte de cisaillement au point de singularité, c'est-à-dire à $\theta = \pi/2$. Avec les données géométriques précédentes, on trouve que la contrainte de cisaillement au point de singularité est de $-2 \cdot 10^7 (Pa)$. En se référant à la figure II.12 pour un maillage de 40×60 , on constate qu'une singularité existe, mais à cause du degré de raffinement du maillage (comme on l'a déjà vu précédemment), la diminution de la contrainte est progressive sur plusieurs éléments, et surtout on est à un ordre de grandeur inférieur à la solution analytique. Nous verrons dans le paragraphe concernant le raffinement du maillage comment celui-ci contribue à nous rapprocher de la solution analytique.

2.2.3.3 La sphère tronquée avec un chargement linéairement réparti

Nous montrons par les résultats ci-après (fig II.13) concernant un chargement linéaire (figure II.4(b)) que même avec une changement progressif de la condition aux limites, la singularité existe toujours (voir approche analytique).

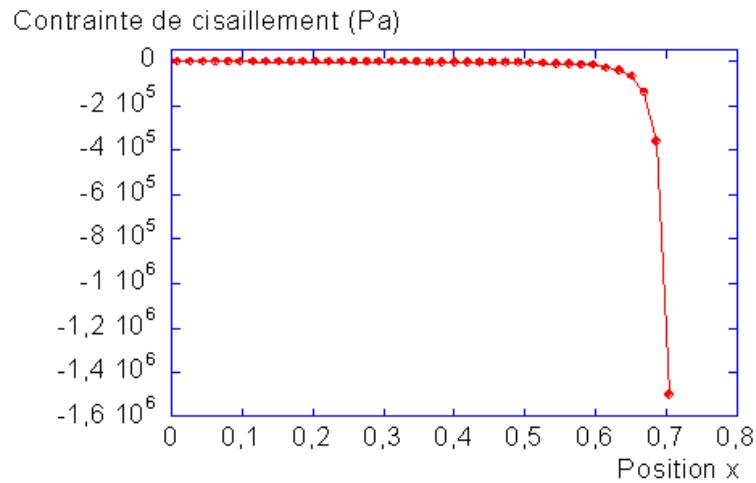


FIG. II.12 – La contrainte de cisaillement de surface sur un talus.

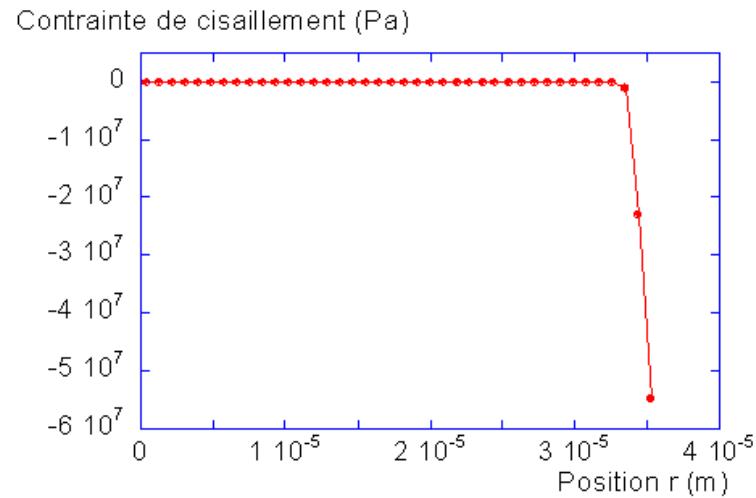


FIG. II.13 – La contrainte de cisaillement de surface dans le cas d'une sphère tronquée et un chargement linéairement réparti.

2.2.3.4 Etude poussée de la sphère tronquée chargée uniformément

Le raffinement du maillage

Les résultats précédents nous poussent à raffiner le maillage. Nous allons étudier les conséquences d'un tel raffinement avec les éléments rectangulaires. On s'intéresse en particulier à raffiner le maillage dans la zone de singularité, afin de concentrer cette dernière dans un seul élément, le dernier, et de s'approcher de la valeur obtenue dans l'approche analytique. On a testé plusieurs maillages : on a le choix entre augmenter le nombre d'éléments en gardant

le même rapport entre le nombre d'élément suivant x et suivant y (par exemple un maillage 73×110 aurait le même rapport que le maillage 40×60), augmenter le nombre total d'éléments en prenant le même nombre d'élément en x et en y (90×90) ou augmenter le nombre total avec un rapport éléments x /éléments y plus petit (90×110), ce qui donnera des éléments plus allongés. On peut également raffiner uniquement une partie du maillage, comme la partie sous le point de singularité (le coin supérieur droit), soit en déplaçant la macro-noeud intermédiaire, soit en créant plusieurs sous-domaines, et en ne raffinant que l'un d'entre eux. Pour ces deux derniers cas, on présente le calcul sur un talus, ce qui a pour avantage de pouvoir comparer avec la solution analytique.

Les résultats de ce test montrent que le raffinement doit être fait avec attention dans un cas où on veut capturer une singularité, car selon le conditionnement de l'élément (rapport largeur/longueur de l'élément), les résultats peuvent varier beaucoup.

Si on se contente d'augmenter le nombre d'élément en gardant à peu près la même régularité (rapport nombre d'élément en x /nombre d'élément en y), le résultat est légèrement amélioré mais n'est pas très différent. On peut le constater en comparant les résultats d'un maillage 40×60 et d'un maillage 73×110 - maillage présenté à la figure II.16. La distribution de la contrainte de cisaillement dans ce dernier cas est donnée à la figure II.14(a). Elle est équivalente à celle de la figure II.10(b).

Par contre en prenant le maillage 90×110 , on constate une remontée de la contrainte de cisaillement, après la diminution (figure II.14(b)). Il en est de même pour le cas où les éléments sont concentrés dans le coin supérieur droit du solide (maillage représenté à la figure II.17) pour lequel la distribution de la contrainte de cisaillement est donnée à la figure II.15(a). Conclusion : un mauvais conditionnement des éléments entraîne l'apparition d'une singularité due au maillage.

La subdivision de la zone de maillage en quatre permet aussi de serrer au maximum dans la partie qui nous intéresse (fig.II.18). Cependant les résultats montrent un autre type de comportement avec un pic avant la singularité (figure II.15(b)). Cela montre encore à quel point la détermination de cette singularité par les éléments finis dépend du conditionnement de la maille.

Néanmoins dans ces deux derniers cas qui concernent le talus uniformément chargé, le raffinement a permis d'atteindre une valeur de la singularité qui s'approche de la valeur analytique, en particulier le deuxième cas (de l'ordre de 10^{-7}). Mais cependant la difficulté relative au conditionnement de la maille ne nous permet pas de garder ce maillage.

Une singularité est délicate à capturer par les éléments finis. On sait par exemple qu'il est assez fréquent que le déplacement de la position des noeuds intermédiaires crée une singularité en déformation (Guarrigues, 2002 [25]), or c'est la méthode que l'on utilise dans les derniers

cas de maillage cités précédemment. Il se peut donc qu'à la singularité due au changement de conditions aux limites (notre cas) s'ajoute une singularité due aux éléments finis. Un mauvais conditionnement de la maille suffit à créer ce genre de singularité, cas que l'on retrouve dans les tests de maillage que nous avons fait.

Finalement, on peut considérer que le maillage «idéal» pour les éléments rectangulaires, et qui capture suffisamment bien la singularité et à un coût moins élevé qu'un maillage plus fin, est celui à 40×60 éléments et régulier, ou celui à 73×110 .

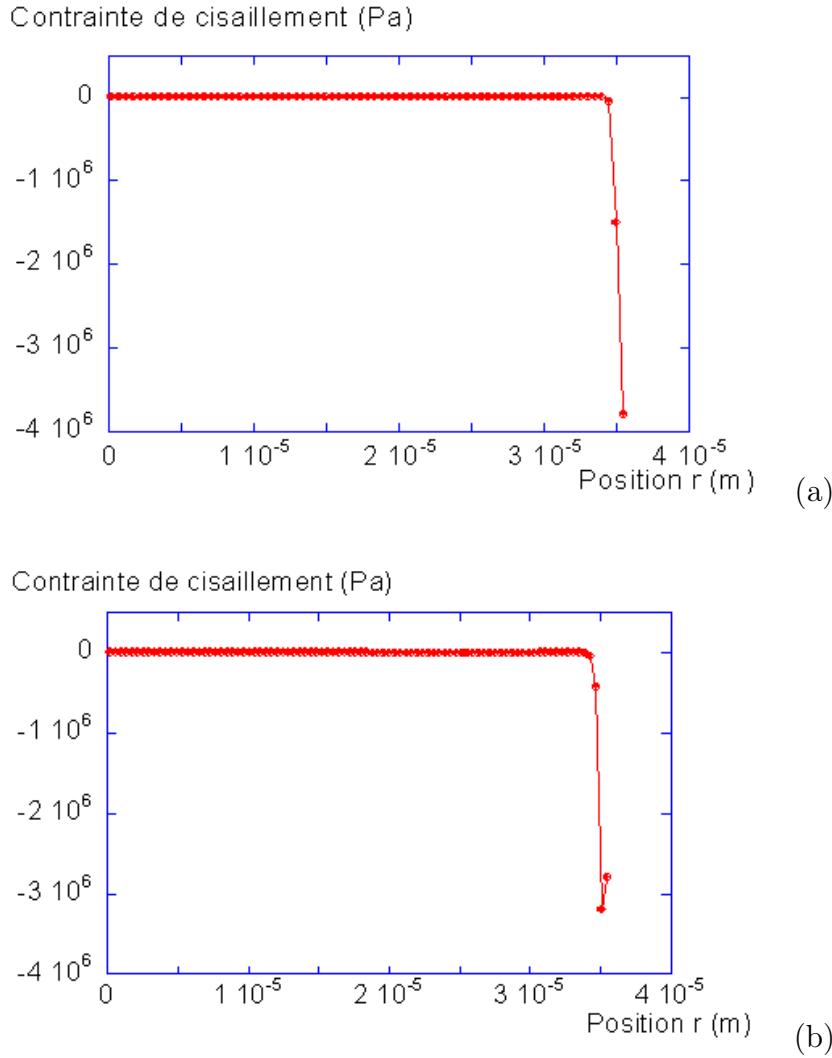


FIG. II.14 – Distribution de la contrainte intergranulaire - Cas d'une sphère tronquée. (a) Dans le cas d'un maillage à 73×110 éléments. (b) Dans le cas d'un maillage à 90×110 éléments.

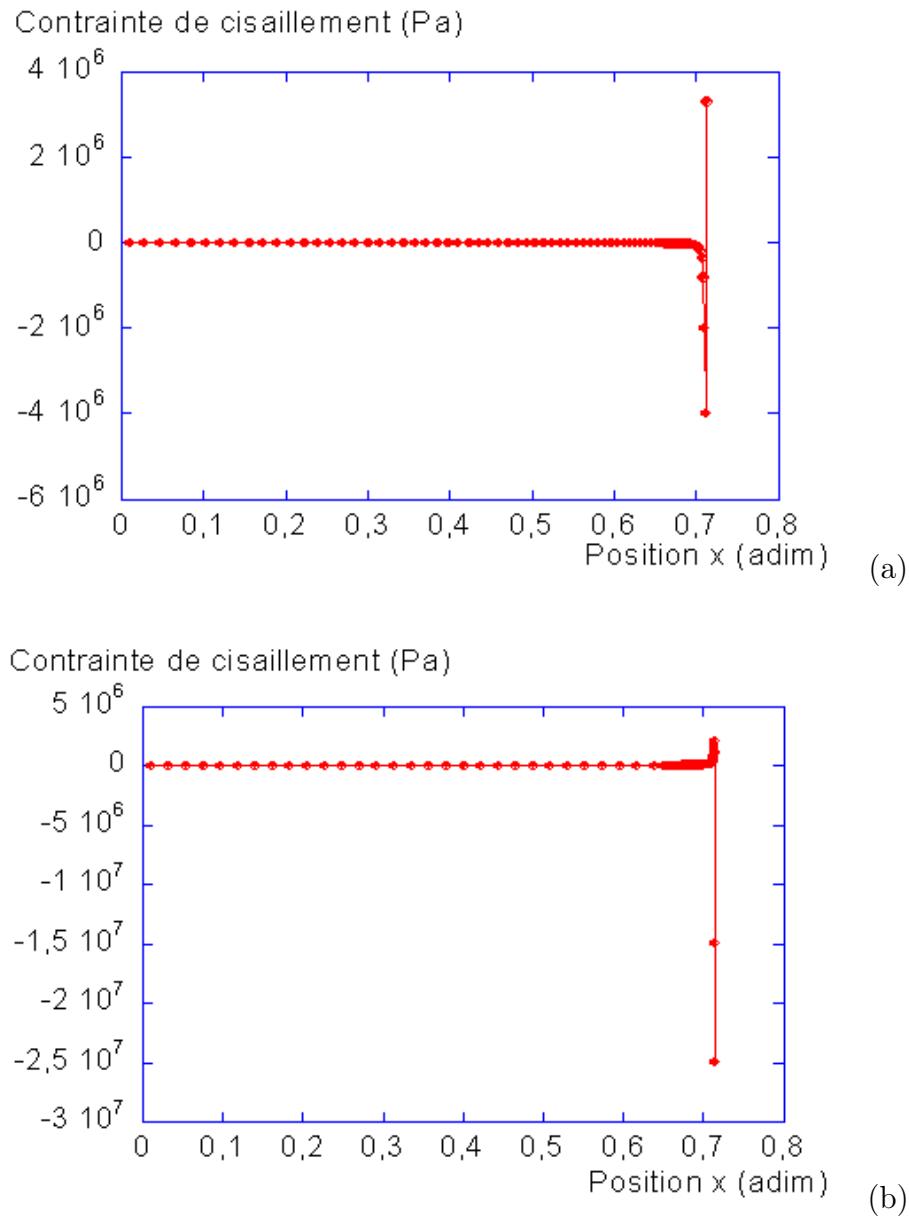


FIG. II.15 – Distribution de la contrainte intergranulaire - Cas d'un talus. (a) Maillage à 70×70 éléments serrés dans le coin (fig.II.17). (b) Maillage à 8100 éléments répartis dans 4 blocs générés différemment (fig.II.18)

Le calcul axisymétrique

Pour être en accord avec la méthode de résolution analytique et pour pouvoir comparer les résultats élément fini avec les résultats de cette dernière, on a considéré les problèmes précédents en déformation plane. Ne s'intéressant dans cette discussion qu'à la singularité sur les contraintes à la surface de chargement, et en particulier au bord de cette surface, on a pu

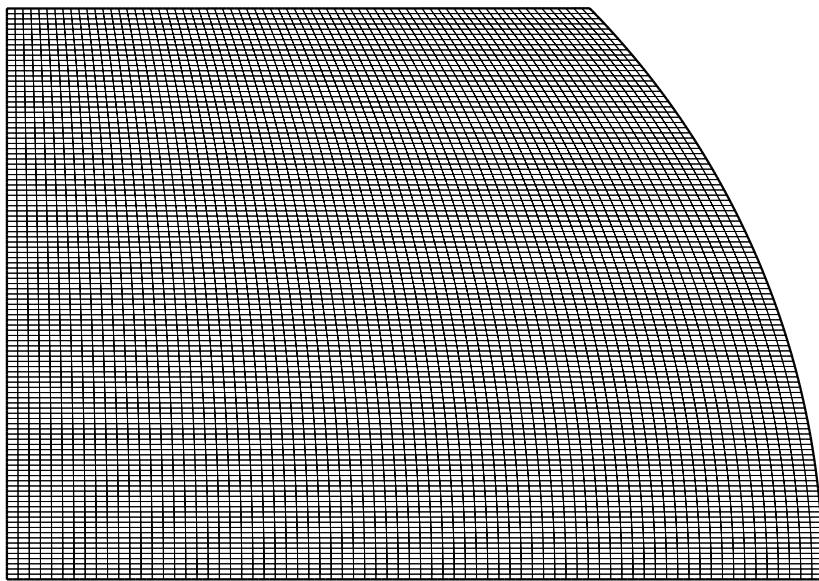


FIG. II.16 – Maillage de sphère tronquée à 73×110 éléments.

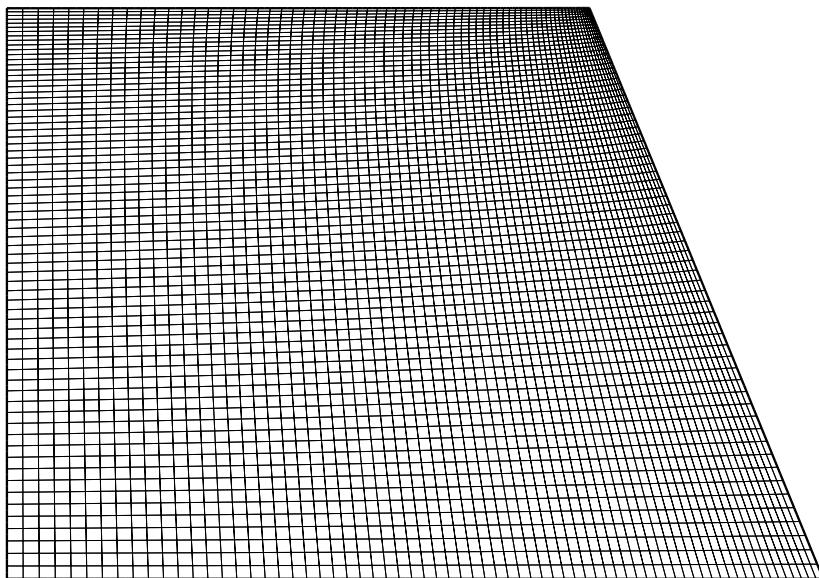


FIG. II.17 – Maillage du talus à 70×70 éléments. Les éléments sont concentrés dans la zone de singularité en déplaçant les macro-noeuds intermédiaires.

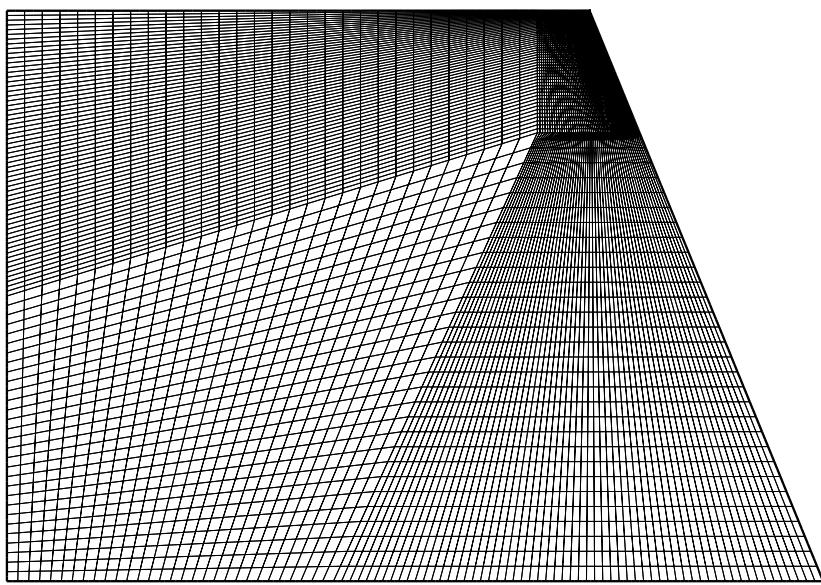


FIG. II.18 – Maillage du talus à 8100 éléments. Le maillage est généré à partir de 4 sous-domaines pour permettre de raffiner une partie seulement du maillage, en l'occurrence ici la zone de singularité.

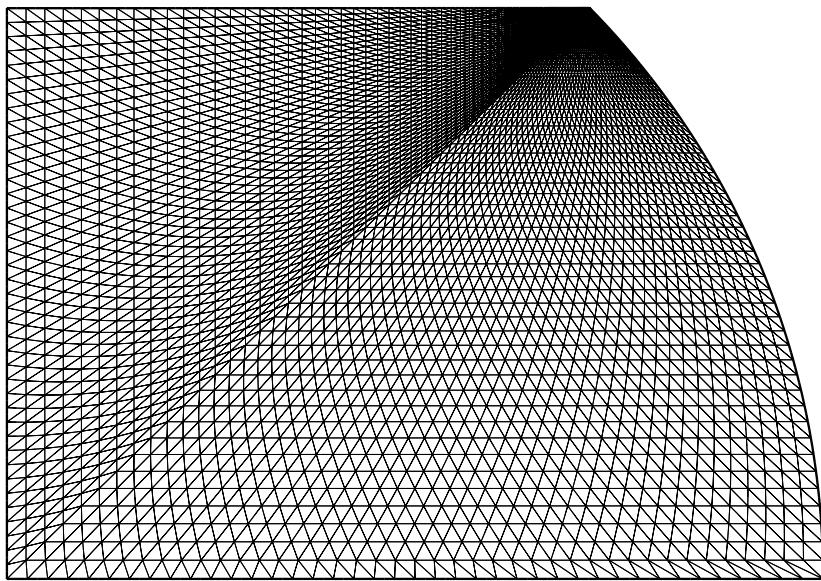


FIG. II.19 – Maillage radial avec des éléments triangulaires, 9638 éléments.

faire le calcul avec cette hypothèse. Les calculs sur la sphère tronquée sont supposés cependant être en axisymétrie, et c'est ainsi qu'ils vont être menés dans la suite.

On a noté que dans la recherche de la singularité, le calcul axisymétrique donne le même résultat que le calcul en déformation plane.

Le calcul élastique avec pression de pore

Pour se rapprocher du calcul avec transfert en solution, et pour valider numériquement les résultats expérimentaux de poinçonnement avec transfert en solution (Tada et Siever, 1986 [67], Gratier, 1993a [18]), on se propose de rajouter aux conditions aux limites des problèmes de la figure II.4, une pression de fluide sur le côté circulaire de la sphère tronquée. La valeur de cette pression de fluide correspond à la pression de l'eau à 4km de profondeur, donc à $40MPa$. Dans ce cas, les problèmes sont maintenant traités en axisymétrie. La comparaison des résultats avec des éléments rectangulaires et avec des éléments triangulaires est discutée dans ce paragraphe.

Avec la pression de pore appliquée sur le côté, on reste dans le même cas que les calculs précédents : on a une discontinuité des conditions aux limites, puisque la force répartie appliquée sur la face supérieure est plus grande que la pression de pore appliquée sur le côté. Ce qui explique que dans ce cas présent, la singularité existe aussi. C'est ce que montre la figure la figure II.20(a). L'application de la pression de pore contribue à diminuer la singularité, ce qui s'explique facilement : la discontinuité de la condition aux limites est atténuée puisque celle-ci est passée de $88MPa$ à $0MPa$, tandis qu'ici elle passe de $88MPa$ à $40MPa$. On imagine très bien que si on avait une pression de pore égale à la force répartie sur la face supérieure, on n'aurait pas de singularité, puisqu'il n'y aurait pas de discontinuité dans les conditions aux limites.

La comparaison est faite avec le résultats concernant les éléments triangulaires donnés à la figure II.20(b), et dont le maillage est représenté à la figure II.19.

On constate que l'utilisation des éléments triangulaires permet de raffiner le maillage dans la zone qui nous intéresse. Son intérêt réside également dans le fait que le maillage radial capture mieux les contraintes normale et de cisaillement dans le solide, étant donné que celles-ci dépendent de l'angle θ (voir figure II.21, II.22, II.23 et II.24 représentant les deux contraintes - respectivement pour le maillage à éléments rectangulaires et pour le maillage radial à éléments triangulaires -). En ce qui concerne la contrainte de surface et la singularité qui est délicate à capturer, le résultat dépend de la taille des éléments dans le coin. À la figure II.20(b), la singularité est pratiquement concentré sur le dernier point.

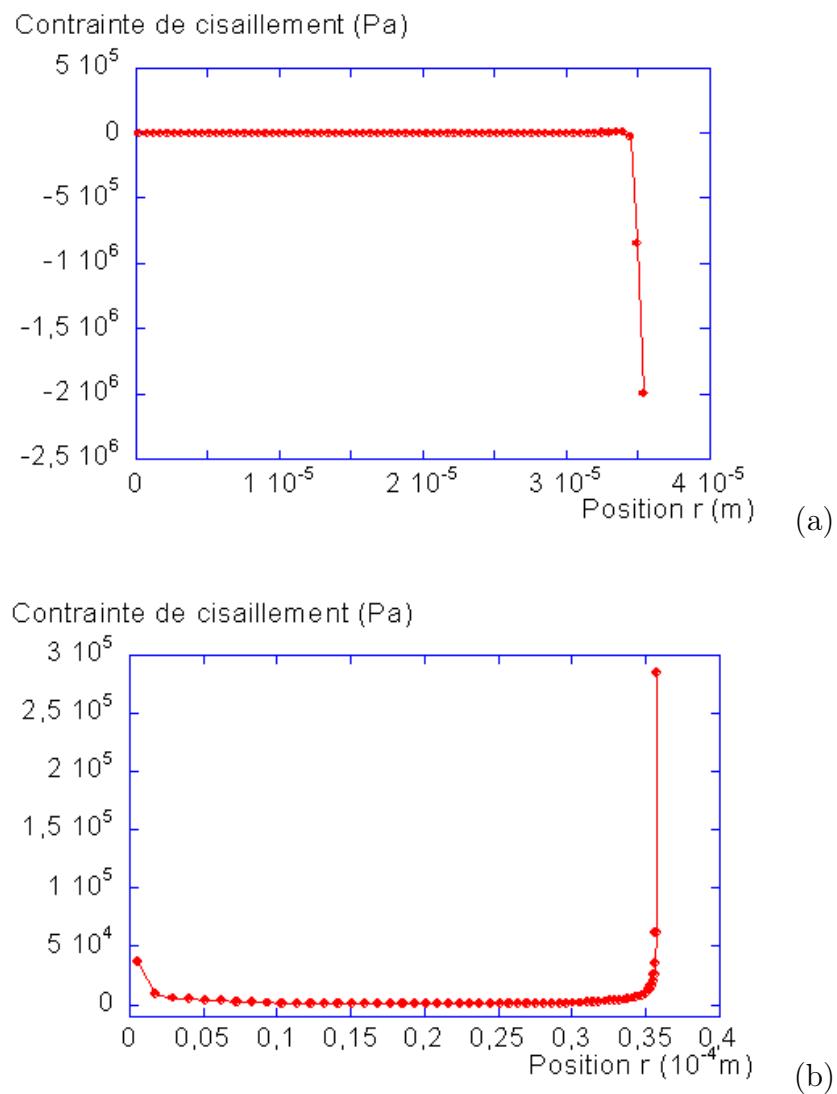


FIG. II.20 – Distribution de la contrainte de cisaillement dans le cas où on applique en plus de la charge répartie, une pression de pore (cas de la sphère tronquée). (a) Un maillage constitué d'éléments rectangulaires (73×110). (b) Un maillage constitué d'élément triangulaires (9758 éléments).

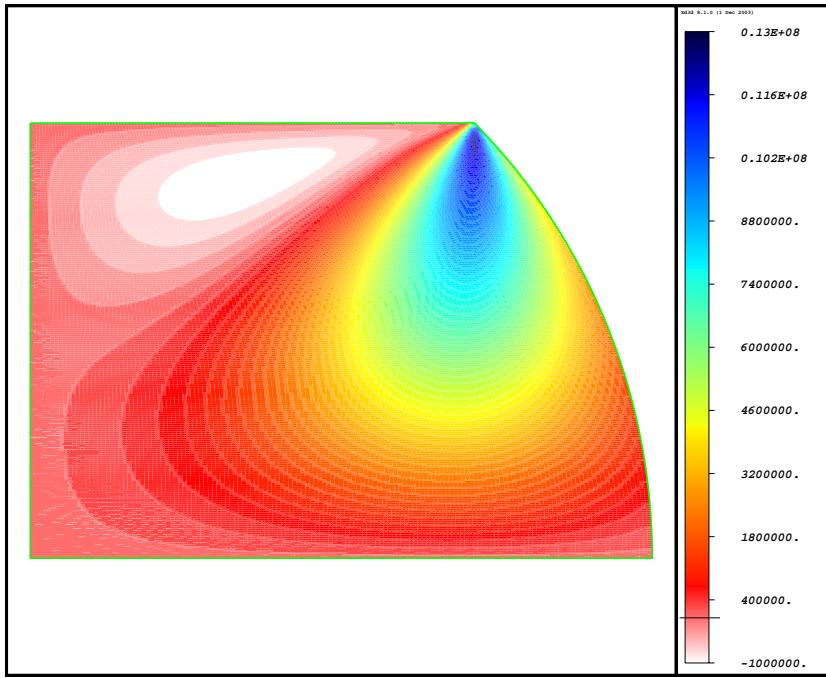


FIG. II.21 – Contrainte de cisaillement (chargement uniforme sur la face supérieure et pression de fluide sur le côté). Maillage constitué 73×110 éléments rectangulaires.

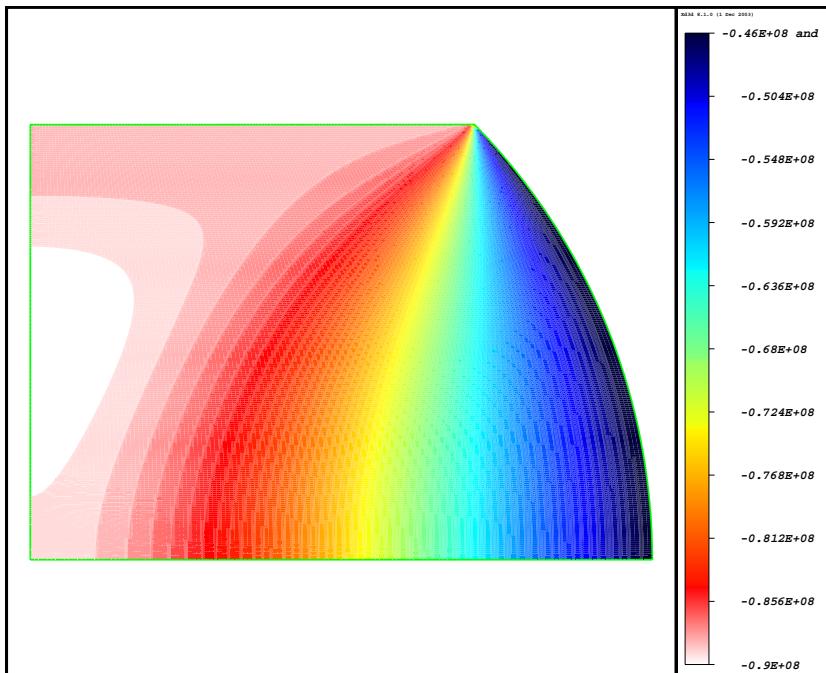


FIG. II.22 – Contrainte normale (chargement uniforme sur la face supérieure et pression de fluide sur le côté). Maillage constitué 73×110 éléments rectangulaires.

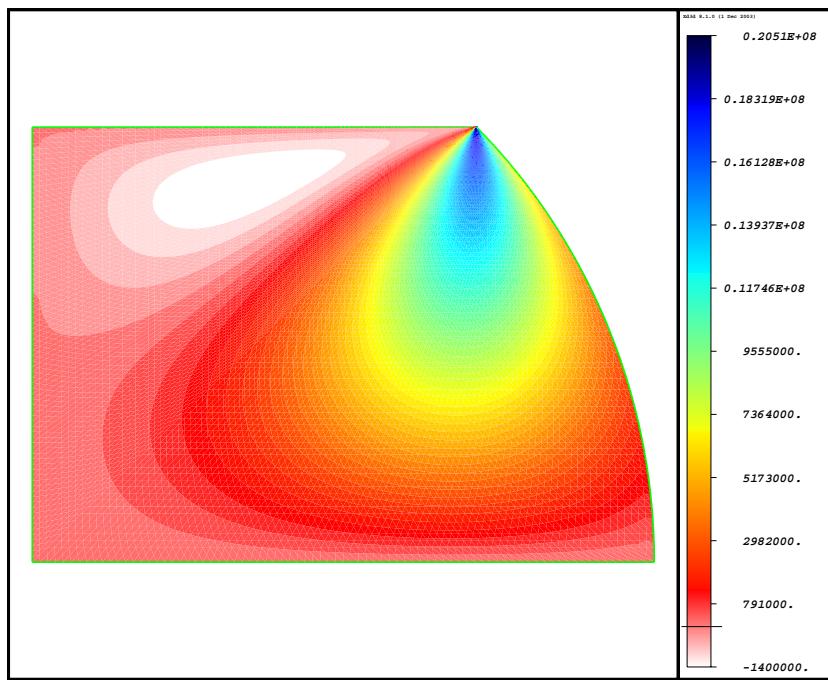


FIG. II.23 – Contrainte de cisaillement (chargement uniforme sur la face supérieure et pression de fluide sur le côté). Maillage radial constitué d'éléments triangulaires.

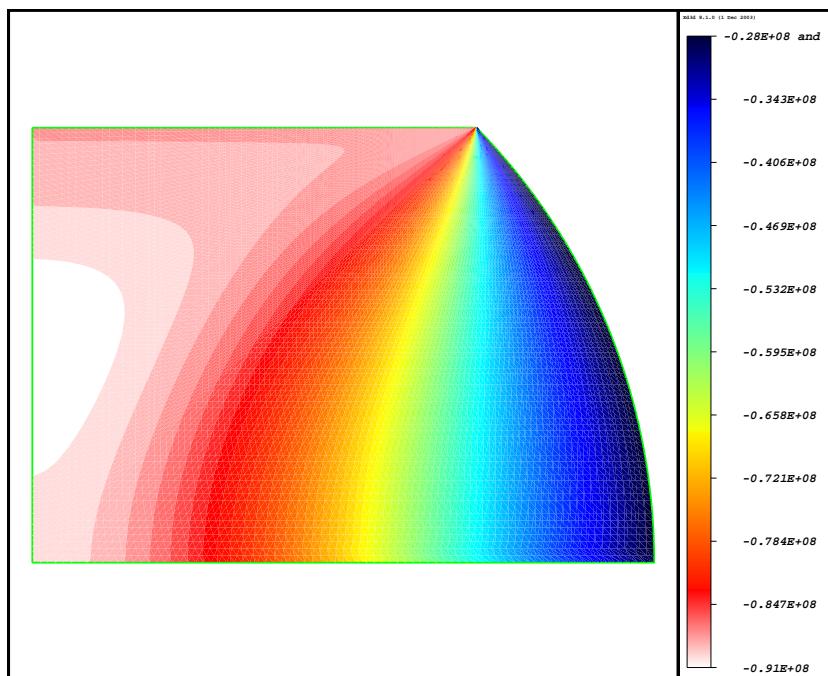


FIG. II.24 – Contrainte normale (chargement uniforme sur la face supérieure et pression de fluidie sur le côté). Maillage radial constitué d'éléments triangulaires.

2.2.4 Conclusion

Ce chapitre a eu pour but de présenter le modèle mécanique utilisé dans ces travaux, ainsi que les méthodes de résolution. Une étude poussée de ce modèle a permis d'étudier l'effet de la géométrie sur la réponse mécanique du grain à une contrainte de compression.

On constate ici que la discontinuité du chargement est à l'origine de la singularité des contraintes sous la limite de la charge. Une sphère tronquée chargée sur sa partie supérieure peut être considérée comme un solide chargé uniquement sur une partie de sa surface supérieure : l'arc de cercle serait la partie qui reste. Il y a donc discontinuité du chargement.

Cette singularité se traduit par une brusque augmentation (en valeur absolue) des contraintes normales et des contraintes de cisaillement. C'est ce que nous avons vu dans les résultats précédents.

Donc quel que soit le chargement appliqué sur la surface supérieure, dès lors qu'il est limité, (passe «brusquement» d'une valeur non nulle à une valeur nulle), on a une singularité au point de la limite d'application de ce chargement. Ces études élastiques sans transfert en solution ont permis de mettre en évidence l'existence de cette singularité. Dans le cas du transfert en solution, nous aurons le même comportement, puisque la sphère tronquée sera chargée par une contrainte intergranulaire σ_n .

S'il existe une pression de pore, le résultat serait le même dans le sens où on aura une discontinuité de la condition aux limites puisque la contrainte intergranulaire et la pression de pore n'ont pas les mêmes intensités.

La brusque augmentation des contraintes normale et de cisaillement au bord de la surface de contact de notre sphère tronquée induit une valeur élevée de l'énergie de déformation élastique. Dans les observations expérimentales de Gratier, 1993b [19] ou celles de Tada et Siever, 1986 [67], une telle concentration de l'énergie élastique de déformation induit une dissolution accentuée autour du poinçon, accompagnée de déformations plastiques (voir figures I.14 et I.15). Cette dissolution au bord du contact fait également penser à la dissolution marginale de Ba-thurst, 1958 [4]. Notre modèle est donc conforme aux travaux expérimentaux et aux modèles mécaniques de la littérature, et les calculs élastiques précédents ont permis cette validation. La question se pose alors sur la validité de l'hypothèse d'un contact plat. Le restera-t-il au fur et à mesure que le transfert en solution avancera ? En fait étant en hypothèse de petite déformation, la déformation induite par la singularité de contrainte reste petite par rapport à la longueur caractéristique du problème. L'hypothèse reste donc valable. Dans les expériences de Tada et Siever 1986 [67], il faut savoir que ces expériences sont menées dans des conditions favorisant le transfert en solution, donc des conditions plutôt «exagérées», ce qui fait qu'on peut observer la déformation du cristal qui n'est plus plat sous le poinçon.

Comment cette singularité entre-t-elle en jeu dans le calcul que nous allons mener maintenant ? Nous le verrons dans le chapitre suivant. On retient de cette étude les maillages, les types d'éléments, ainsi que le nombre de points de Gauss «idéaux».

3. Le transfert en solution dans le contact intergranulaire

Le modèle d'étude a été présenté dans la section précédente (voir section 2. de ce chapitre).

Nous allons, dans cette section, dériver une expression de la contrainte normale intergranulaire, notée σ_n (voir fig. II.1), en fonction de la force thermodynamique entraînant le transfert en solution, et des quantités qui y entrent en compte. Le problème aux limites présenté dans la section précédente pourra ensuite être résolu. L'utilisation de l'outil numérique permettra d'étudier précisemment la distribution de la contrainte normale intergranulaire, en fonction des différentes quantités relatives au transfert en solution. Dans le cadre de l'étude de cette contrainte intergranulaire, nous aborderons un calcul permettant de vérifier la validité de l'approximation avancée par Lehner, 1995 [39].

La compaction du grain par transfert en solution se fait à un taux noté $\dot{\lambda}$. Le lien entre ce taux de raccourcissement du grain et la contrainte intergranulaire sera établi et nous étudierons la distribution de cette contrainte en fonction de l'avancement de la compaction par transfert en solution. On fait dans un premier temps un rappel des équations de base du transfert en solution. Ce rappel aboutira à la dérivation d'une expression de la contrainte normale à l'interface, conditions aux limites du problème de la sphère tronquée.

3.1 Équations préliminaires

En suivant les hypothèses avancées dans la littérature (Lehner et Bataille, 1984/85 [40], Lehner et Leroy, 2004 [41]), on imagine deux interfaces planes entre chaque grain et le fluide du contact. La dissolution aux deux interfaces solide/fluide se fait à des vitesses non-matérielles V_n^+ et V_n^- (figure II.25), reliées à la vitesse de raccourcissement $\dot{\lambda}d$. L'état stationnaire dans la zone de contact implique l'égalité des modules de ces deux vitesses. On a $V_n^+ = -V_n^- = (1/2)\dot{\lambda}d$.

3.1.1 Les flux de masse

Les deux flux J_n^{gb+} et J_n^{gb-} à travers chacune des interfaces sont reliés aux vitesses non-matérielles par la relation :

$$J_n^{gb+/-} = -\rho_0^s V_n^{+/-} \quad (\text{II.21})$$

(ρ_0^s est la masse volumique du solide dans l'état de référence)

Le flux de masse de dissolution total qui est la somme des deux flux de masse à travers les deux interfaces, s'écrit alors :

$$J_n^{gb} = -\rho_0^s \dot{\lambda}d \quad (\text{II.22})$$

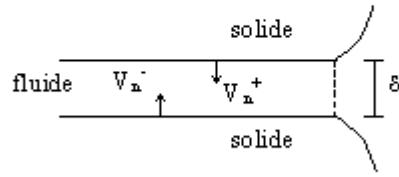


FIG. II.25 – Agrandissement de la zone de contact. Vitesses non-matérielles à travers les deux interfaces grain/fluide.

Par ailleurs, on rappelle que la conservation de masse dans la zone de contact, permet d'exprimer $J_r^{gb}(r)$ (voir équation I.15) qu'on suppose régi par la loi de Fick (équation I.11).

3.1.2 Les potentiels chimiques et les forces responsables du transfert en solution

On rappelle que la force entraînant la dissolution est la différence entre le potentiel chimique du solide et le potentiel du soluté dans le fluide :

$$[\mu_n^s(r) - \mu(r)]$$

Celle de la diffusion est la différence entre le potentiel chimique dans le fluide à la position r du contact celui du soluté dans le fluide à la position $r = a$, jonction interface-pore :

$$[\mu(r) - \mu(a)]$$

Explicitons les différents potentiels chimiques qui entrent dans l'expression de ces forces.

On rappelle que :

- Le potentiel chimique du solide (équation I.4) s'écrit :

$$\mu_n^s(r) = f^s - \sigma_n(r)/\rho^s \quad (\text{II.23})$$

- Le potentiel chimique du soluté à l'abscisse r est (équation I.7) :

$$\mu(r) = \mu_0 + \frac{kT}{\rho^s \Omega_s} \log \frac{C(r)}{C_0} \quad (\text{II.24})$$

- Le gradient $\mu(r) - \mu(a)$ peut s'exprimer de la même façon comme suit :

$$\mu(r) - \mu(a) = \frac{kT}{\Omega_s} \ln \frac{C(r)}{C(a)} \quad (\text{II.25})$$

On considère que la concentration du soluté reste constante dans le pore (système ouvert) égal à C_0 et on supposera aussi que $C_0 \equiv C(a)$. On peut remplacer le terme $\ln(C(r)/C(a))$ par $(C(r) - C(a))/C(a)$, en faisant l'hypothèse de concentrations variant peu. Connaissant $(C(r) - C(a))$ par son expression donnée à l'équation (I.17), on écrit l'équation (II.25) comme suit :

$$\mu(r) - \mu(a) = -\frac{kT}{\rho^s \Omega^s} \frac{\rho^s \dot{\lambda} d(a^2 - r^2)}{4\rho^f \delta D^{gb} C_0} \quad (\text{II.26})$$

Après avoir explicité ces termes on peut développer une expression de la force entraînant la dissolution, en y faisant maintenant apparaître les variations des quantités entre leur état d'équilibre et leur état courant. Le transfert en solution se déclenchant hors d'un état d'équilibre, ce choix est plus judicieux. La force entraînant la dissolution s'écrit alors :

$$\mu_n^s(r) - \mu(r) = \mu_n^s(r) - \mu_0 - (\mu(r) - \mu_0) \quad (\text{II.27})$$

En remplaçant $(\mu(r) - \mu_0)$ par $\mu(r) - \mu(a) + \mu(a) - \mu_0$ pour y faire apparaître la force entraînant la diffusion, et en utilisant les termes explicités précédemment, on trouve finalement :

$$\mu_n^s(r) - \mu(r) = (f^s - f_0^s) + \left(\frac{1}{\rho^s} - \frac{1}{\rho_0^s} \right) p - \frac{1}{\rho^s} (\sigma_n + p) + \frac{kT}{\rho^s \Omega^s} \frac{\rho^s \dot{\lambda} d(a^2 - r^2)}{4\rho^f \delta D^{gb} C_0} - \frac{kT}{\rho^s \Omega^s} \frac{C(a) - C_0}{C_0}, \quad (\text{II.28})$$

3.1.3 Loi cinétique

La loi cinétique relie le flux de masse et la force thermodynamique (Ghoussoub, 2000 [15], Heidug et Leroy, 1994 [27]). Cette loi permet d'établir un lien entre la force thermodynamique et le taux de raccourcissement du grain. La loi proposée par Lehner et Leroy, 2004 [41] s'écrit dans notre cas :

$$J_n^{gb} = -\rho^s K^{gb} (\rho^s \Omega^s / kT) [\mu_n^s(r) - \mu(r)] \quad (\text{II.29})$$

où K^{gb} est un coefficient phénoménologique calculé à partir de la relation donnée par Rimstidt et Barnes, 1984 [55]. En remplaçant J_n^{gb} par son expression dans (II.22), on obtient :

$$\mu_n^s(r) - \mu(r) = -\frac{\dot{\lambda} d}{K^{gb}} \left(\frac{kT}{\rho^s \Omega^s} \right) \quad (\text{II.30})$$

3.1.4 La contrainte normale intergranulaire, condition aux limites

La combinaison des équations (II.28) et (II.30) permet d'aboutir à une expression de la contrainte normale effective :

$$\frac{1}{\rho^s}(\sigma_n + p) = (f^s - f_0^s) + \left(\frac{1}{\rho^s} - \frac{1}{\rho_0^s} \right)p + \frac{kT}{\Omega^s} \left[\frac{\dot{\lambda}d}{\rho^s K^{gb}} + \frac{\dot{\lambda}d(a^2 - r^2)}{4\rho^f \delta D^{gb} C_0} - \frac{C(a) - C_0}{\rho^s C_0} \right] \quad (\text{II.31})$$

Cette expression peut être écrite en terme de densités d'énergie d'Helmholtz, noté ψ^s . On multiplie $\mu_n^s(r)$ par ρ^s et μ_0 par ρ_0^s . Cette multiplication permet d'avoir un terme en ψ^s qui est égal à $\rho^s f^s$. On a :

$$\sigma_n + p = (\psi^s - \psi_0^s) + \frac{kT}{\Omega^s} \left[\frac{\dot{\lambda}d}{K^{gb}} + \frac{\dot{\lambda}d(a^2 - r^2)}{4\rho^f \delta D^{gb} C_0} - \frac{C(a) - C_0}{C_0} \right] \quad (\text{II.32})$$

Si on note :

$$\begin{aligned} \tau_S &= \frac{d}{K^{gb}} \quad \text{et} \\ \tau_D &= \frac{\rho^s d^3}{32\rho^f \delta D^{gb} C_0} \end{aligned} \quad (\text{II.33})$$

les temps caractéristiques correspondant à la dissolution et à la diffusion, on écrit finalement :

$$\frac{\sigma_n + p}{kT/\Omega^s} = \frac{(\psi^s - \psi_0^s)}{kT/\Omega^s} + \dot{\lambda} \left[8 \left(\frac{a^2}{d^2} - \frac{r^2}{d^2} \right) \tau_D + \tau_S \right] - \frac{C(a) - C_0}{C_0} \quad (\text{II.34})$$

Dans la suite, nous verrons une analyse de la contribution de cette énergie. Si celle-ci est négligeable par rapport à la contrainte intergranulaire, cette dernière serait réduite à :

$$\sigma_n = -p + \dot{\lambda} \frac{kT}{\Omega_s} \left(\left[8 \left(\frac{a^2}{d^2} - \frac{r^2}{d^2} \right) \tau_D + \tau_S \right] - \frac{C(a) - C_0}{C_0} \right) \quad (\text{II.35})$$

3.2 Un modèle de transfert en solution intergranulaire

Le but de cette section est de dériver une loi de fluage pour la compaction d'un agrégat de sphères tronquées par transfert en solution, et d'étudier numériquement la validité d'un modèle approché, par la résolution du problème aux limites présenté dans le premier chapitre de cette partie.

3.2.1 Loi de fluage - Un modèle «exact»

On propose le modèle suivant, qui est basé sur la moyenne des quantités dans la zone de contact (donc une moyenne sur l'aire $a^2\pi$ de la zone de contact). La moyenne d'une quantité

A est notée \bar{A} tel que : $\bar{A} = \frac{1}{S} \int_S A.dS$

En faisant cette moyenne, le taux de raccourcissement devient :

$$\dot{\lambda} = \frac{-1}{4(a^2/d^2)\tau_D + \tau_S} \left\{ \frac{\bar{\psi}^s - \psi_0^s - \bar{\sigma}_n - p}{kT/\Omega^s} - \frac{C(a) - C_0}{C_0} \right\} \quad (\text{II.36})$$

(le développement analytique est donné en annexe C.)

3.2.2 Le modèle «approché»

Une hypothèse utilisée dans la littérature ([39, 41]) consiste à négliger les termes en énergie d’Helmholtz dans la force thermodynamique. Cette approximation équivaut à dire que la contribution de l’énergie d’Helmholtz dans la force est faible par rapport à la contrainte effective. Ce qui donnerait pour notre cas, le modèle approché suivant :

$$\dot{\lambda} \simeq \frac{1}{4(a^2/d^2)\tau_D + \tau_S} \left\{ \frac{\bar{\sigma}_n + p}{kT/\Omega^s} + \frac{C(a) - C_0}{C_0} \right\}, \quad (\text{II.37})$$

une loi de fluage par transfert en solution. Le terme entre accolades est la force thermodynamique entraînant le transfert en solution, constitué d’un terme mécanique et d’un terme associé à la diffusion.

3.2.3 Validation numérique du modèle approché

Pour tester la validité de cette approximation, on étudie à partir de l’expression exacte de la contrainte normale où apparaît l’énergie d’Helmholtz, la contribution de cette dernière.

En éliminant $\dot{\lambda}$ entre les équations (II.34) et (II.36), on obtient la distribution de la contrainte normale intergranulaire :

$$\sigma_n(r) = -p + \Delta\psi^s(r) - \frac{8 \left(\frac{a^2}{d^2} - \frac{r^2}{d^2} \right) \tau_D + \tau_S}{4 \frac{a^2}{d^2} \tau_D + \tau_S} \left[\overline{\Delta\psi^s} - \bar{\sigma}_n - p - \left(\frac{kT}{\Omega^s} \right) \frac{\Delta C}{C_0} \right] - \left(\frac{kT}{\Omega^s} \right) \frac{\Delta C}{C_0} \quad (\text{II.38})$$

On résoud le problème aux limites avec comme condition aux limites, sur l’interface $\partial\Omega^I$, l’expression de σ_n «approchée» (et la pression de fluide sur l’interface $\partial\Omega^{sf}$). Puis la solution de ce problème permet de calculer l’énergie d’Helmholtz puisque : $\psi^s = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\epsilon})$. On calcule la contrainte intergranulaire avec cette énergie d’Helmholtz et on compare les deux valeurs de $\sigma_n(r)$ entre les deux étapes.

Explicitons les différentes étapes :

- À la première itération, le problème est résolu avec une approximation de la condition aux limites qui consiste à prendre $\Delta\psi_0^s(r)$ et $\overline{\Delta\psi^s}$ égal à 0.

$$\sigma_n^0(r) = -p - \frac{8 \left(\frac{a^2}{d^2} - \frac{r^2}{d^2} \right) \tau_D + \tau_S}{4 \frac{a^2}{d^2} \tau_D + \tau_S} \left[-\bar{\sigma}_n - p - \left(\frac{kT}{\Omega^s} \right) \frac{\Delta C}{C_0} \right] - \left(\frac{kT}{\Omega^s} \right) \frac{\Delta C}{C_0}$$

avec $\bar{\sigma}_n$ la contrainte normale moyenne obtenue à partir de la relation D.4 en fonction de la contrainte macroscopique $\langle \sigma \rangle$:

$$\bar{\sigma}_n = \frac{1}{\pi} \frac{1}{a^2/d^2} (\langle \sigma \rangle + p)$$

dans cette expression, $\langle \sigma \rangle$ est la contrainte macroscopique (voir son calcul à l'annexe D). On peut la prendre comme étant la contrainte lithostatique agissant à 4km de profondeur. Dans les calculs élastiques, nous avons trouvé cette contrainte égale à $-88 \text{ } 10^6 \text{ Pa}$. Le calcul avec cette condition aux limites va donner la répartition des contraintes et des déformations du solide qui va donner l'énergie libre d'Helmholtz, obtenue par : $\psi^s = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\epsilon})$. À partir de la solution de ce premier problème, on calcule $\Delta\psi_0^s(r)$ et la moyenne sur la surface $\overline{\Delta\psi_0^s}$.

- À la deuxième itération, la condition aux limites est :

$$\sigma_n^1(r) = -p + \Delta\psi_0^s(r) - \frac{8 \left(\frac{a^2}{d^2} - \frac{r^2}{d^2} \right) \tau_D + \tau_S}{4 \frac{a^2}{d^2} \tau_D + \tau_S} \left[\overline{\Delta\psi_0^s} - \bar{\sigma}_n - p - \left(\frac{kT}{\Omega^s} \right) \frac{\Delta C}{C_0} \right] - \left(\frac{kT}{\Omega^s} \right) \frac{\Delta C}{C_0}$$

On résoud le problème et on calcule $\Delta\psi_1^s(r)$ et $\overline{\Delta\psi_1^s}$.

- on teste la convergence de l'approximation par la moyenne de la contrainte normale : si

$$\frac{\bar{\sigma}_n^1 - \bar{\sigma}_n^0}{\bar{\sigma}_n^0} < tol$$

alors la solution a convergé et l'approximation est bonne. Cela veut dire que l'influence de l'énergie d'Helmholtz est négligeable par rapport à la contrainte normale intergranulaire.

- Si non, on passe à la troisième itération, avec la condition aux limites

$$\sigma_n^2(r) = f(\Delta\psi_1^s(r), \overline{\Delta\psi_1^s})$$

... et ainsi de suite jusqu'à la convergence.

On évalue alors la différence entre les premières valeurs de $\bar{\sigma}_n^1$ et les dernières pour mesurer la correction apportée par l'énergie d'Helmholtz.

3.2.3.1 Les quantités et leurs valeurs

La résolution numérique du problème avec la condition aux limites σ_n , nécessite de donner les valeurs des quantités suivantes :

- 1. La profondeur :** D'après l'étude bibliographique, elle est comprise entre 3km et 7km pour le déclenchement du transfert en solution. On se place à 4km. La température y est donc de 400K si on prend la formule citée par Lehner et Leroy, 2004 [41] :

$$T = T_0 + T'[h]$$

où T_0 est la température à la surface de la terre. $T' = 30K/1000m$.

- 2. Les contraintes :** La pression de fluide à cette profondeur est de $p_f = 4 \times 1000 \times 10 = 40 \ 10^6 Pa$. La contrainte listhostatique est de $88 \ 10^6 Pa$ (voir données des calculs élastiques).
- 3. La variation de concentration :** $\Delta C = C(a) - C_0$ peut être prise égale à zéro, la variation de concentration étant supposée faible entre le contact et le pore.
- 4. La diffusivité apparente :** $D\delta$ a été déterminé expérimentalement. Les résultats sont résumés dans Gundersen et al. [11], qui donnent un intervalle entre 10^{-18} et $10^{-21} m^3 s^{-1}$. Dans le produit $D\delta$, l'épaisseur du contact δ doit être assez grande pour que le fluide ne soit pas adsorbé (donc supérieure à la taille d'une molécule $2.10^{-9}m$). Sa limite supérieure est liée à la rugosité de l'interface. La valeur de $2.10^{-18} m^3 s^{-1}$ sera choisie pour la diffusivité apparente.
- 5. Densité de masse du fluide :** Le matériau de référence est le quartz. Sa densité est égale à $2650 kg/m^3$.
- 6. Le diamètre :** Le diamètre du grain est pris entre 10^{-4} et $10^{-2}m$.
- 7. Constante phénoménologique :** Elle est donnée par la formule (Rimstidt et Barnes [55]) :

$$\log_{10} K^{gb} = \log_{10} \bar{V}^s + 1.174 - 0.002028 \times T - \frac{4158}{T}$$

avec \bar{V}^s est le volume molaire qui vaut pour le quartz $2.77 \ 10^{-5} m^3/mol$. Ce qui donne $K^{gb} = 2 \ 10^{-15} m/s$ pour la profondeur considérée.

3.2.3.2 Analyse dimensionnelle

Une valeur de référence pour les contraintes est introduite afin de rendre les valeurs adimensionnelles pour des raisons pratiques. Le principe de l'adimensionnalisation est le suivant : soit A une quantité physique, elle est remplacée par une quantité sans dimension \tilde{A} obtenue en divisant la quantité physique par une quantité de référence A_R . Il est judicieux de choisir comme quantité de référence pour les contraintes, le rapport :

$$\frac{kT}{\Omega^s}$$

qui apparaît dans l'équation II.38. Il a la dimension d'un travail par unité de masse, on peut le considérer comme un travail spécifique.

L'équation II.38 est rendue adimensionnelle en la divisant par la quantité de référence et devient alors :

$$\tilde{\sigma}_n(r) = -\tilde{p} + \widetilde{\Delta\psi^s}(r) - \frac{8 \left(\frac{a_2}{d^2} - \frac{r_2}{d^2} \right) \tau_D + \tau_S}{4 \frac{a_2}{d^2} \tau_D + \tau_S} \left[\widetilde{\Delta\psi^s} - \widetilde{\sigma}_n - \tilde{p} \right] \quad (\text{II.39})$$

Dans cette analyse on se fixe les valeurs des paramètres. Les valeurs sont données dans la table II.2.

3.2.3.3 Résultats

Les premiers résultats présentés et discutés ici correspondent aux valeurs données précédemment. On constatera que les temps caractéristiques sont du même ordre de grandeur, pour $d = 1. 10^{-3}m$. Il n'y a donc pas de processus dominant dans le cas présent. Dans ce cas, l'approximation converge assez vite (après 3 itérations si $tol = 1.10^{-6}$, 5 itérations si $tol = 1.10^{-9}$), et la contribution de l'énergie d'Helmholtz est faible dans la contrainte normale intergranulaire. La figure (II.26) représente la distribution de cette contrainte le long de l'interface à chaque itération, pour un calcul fait avec des éléments rectangulaires. La distance entre les courbes est très réduite, voire quasi-inexistante : la différence due à une variation de l'énergie d'Helmholtz est très faible (variation de $\Delta\psi(r)$ et $\overline{\Delta\psi}$ très faible) entre deux itérations.

La figure (II.27) montre la différence $\Delta\sigma_n = \sigma_{i+1} - \sigma_i$ à la i -ème itération. Elle n'est pas nulle au premier pas, puisque l'énergie d'Helmholtz passe d'une valeur nulle (la première approximation) à une valeur non nulle (calculée à partir de la première approximation). Elle devient nulle aux pas suivants, la variation de l'énergie d'Helmholtz étant très petite.

Le calcul avec des éléments triangulaires aboutit à la même conclusion (figure II.28).

Ce premier calcul nous permet de valider l'hypothèse de l'approximation en ψ : parmi les termes entrant dans la force thermodynamique, l'énergie d'Helmholtz est négligeable par rapport à la

Notations	Quantités	valeurs	unité	valeur adim
ρ^s	Densité de masse constante du solide	$0.2650 \cdot 10^4$	kg/m^3	-
ρ^f	densité de masse du fluide	1000	kg/m^3	-
kT/Ω^s	«contrainte de référence»	$149 \cdot 10^6$	Pa	-
$<\sigma>$	contrainte macroscopique	$88 \cdot 10^6$	Pa	0.6286
p	pression de fluide	$40 \cdot 10^6$	Pa	0.2587
T	Température	400	K	-
k	Constante de Boltzmann	$1.38 \cdot 10^{-23}$	J/K	-
Ω^s	Volume moléculaire du quartz	$3.7 \cdot 10^{-29}$	m^3	-
K_{gb}	Constante phénoménologique	$2 \cdot 10^{-15}$	m/s	-
C_0	Conc. d'équilibre pour le quartz dans l'eau	$5 \cdot 10^{-5}$		-
d	Diamètre	variable	m	-
τ_S	Temps caractéristique dissolution	$0.5 \cdot 10^{12}$	s	-
τ_D	Temps caractéristique diffusion	$0.8281 \cdot 10^{12}$	s	-
$D_{gb}\delta$	Diffusivité effective	$2 \cdot 10^{-18}$	m^3/s	-
λ	Facteur de raccourcissement du grain	0.7	-	-
E	Module d'Young	$82 \cdot 10^9$	Pa	550
μ	Coefficient de Poisson	0.2	-	-

TAB. II.2 – Tableau récapitulatif des paramètres utilisées dans l'analyse de l'approximation sur l'énergie d'Helmholtz

contrainte normale intergranulaire.

Il reste à déterminer le domaine de validation de cette approximation en faisant varier les différents paramètres tels que le diamètre ou le facteur de raccourcissement du grain, c'est-à-dire le niveau de dissolution de départ.

Par ailleurs, on constate que malgré l'existence d'une singularité en contraintes et en déformations au bord du contact, celle-ci n'a pas d'effet sur la contrainte normale intergranulaire, puisque justement l'énergie d'Helmholtz, sur laquelle se répercute cette singularité, reste négligeable dans l'expression de la contrainte intergranulaire. Les figures II.29 et II.30 montrent les isovaleurs de la contrainte normale et de la contrainte de cisaillement dans le solide, correspondant à l'ordre zéro de l'approximation de la condition aux limites σ_n (sans l'énergie d'Helmholtz). Le diamètre du grain est, dans le cas présenté, égal à $d = 1 \cdot 10^{-3}m$. Le gradient qu'on a constaté sur la distribution de la contrainte intergranulaire (fig. II.28) est retrouvé sur la figure II.29. En se concentrant sur la partie du solide qui se trouve près de la surface, on remarque que la contrainte normale est plus grande (en valeur absolue) du côté de l'axe de

symétrie, et diminue lorsqu'on va vers le pore.

La figure II.31 correspond aux déplacements des noeuds des éléments de l'interface (les valeurs données sont à normer par le diamètre du grain).

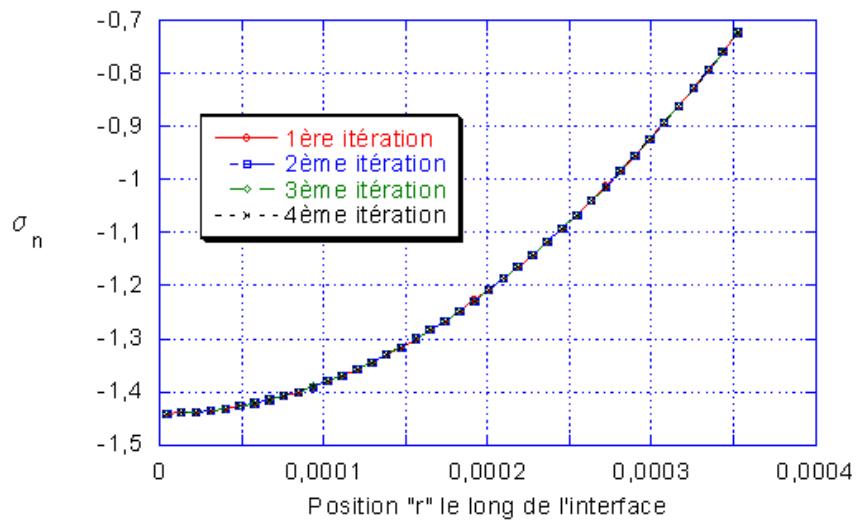


FIG. II.26 – Distribution de la contrainte intergranulaire à chaque itération

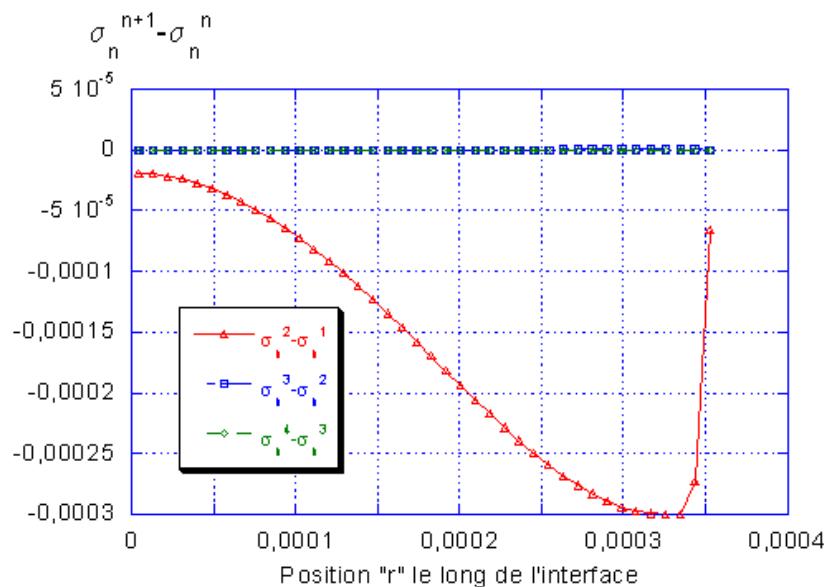


FIG. II.27 – La différence $\sigma_n^{i+1} - \sigma_n^i$ entre deux itérations.

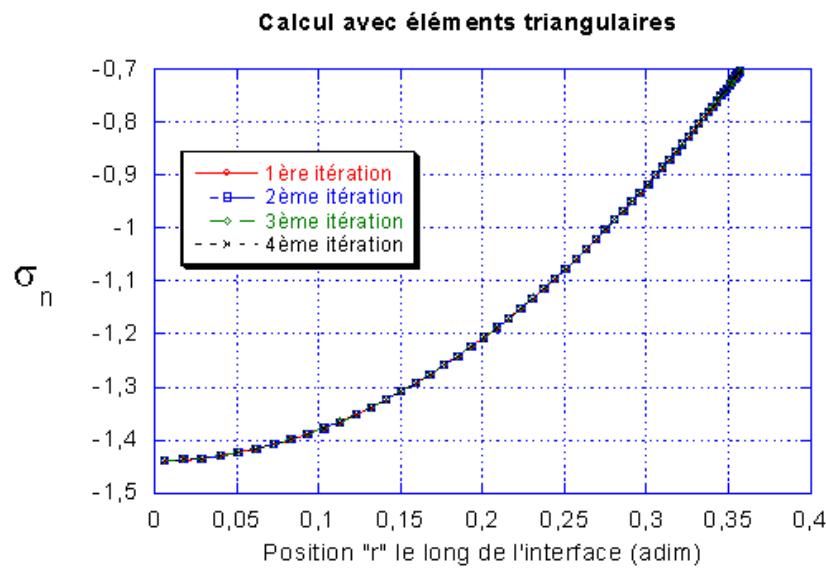


FIG. II.28 – Distribution de la contrainte intergranulaire à chaque itération (maillage avec des éléments triangulaires).

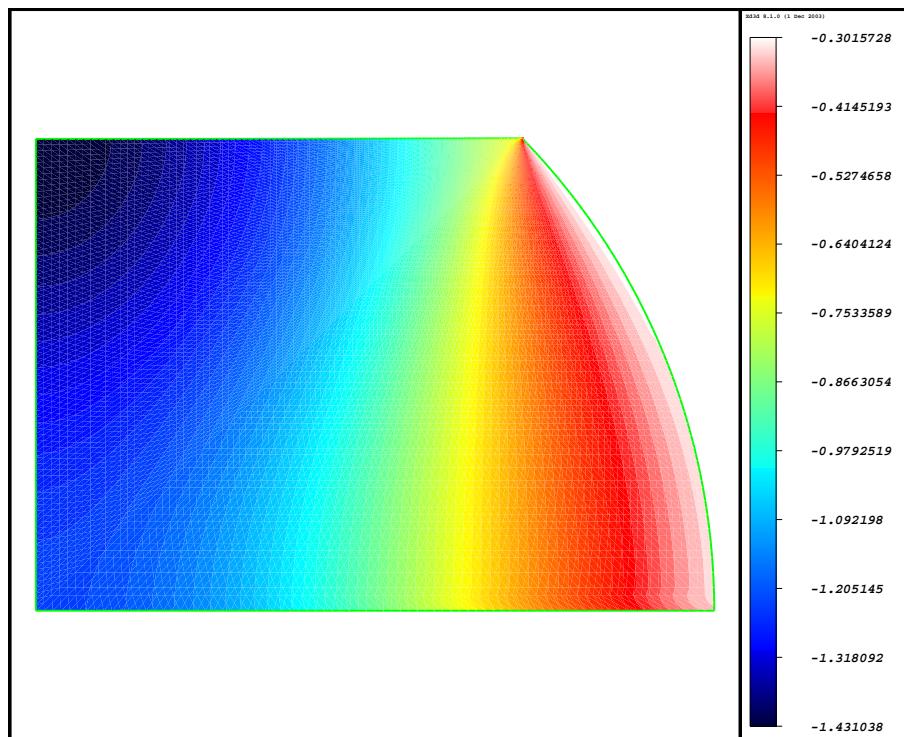


FIG. II.29 – Isovaleurs de la contrainte normale correspondant à la condition aux limites «approchée». Maillage radial avec éléments triangulaires.

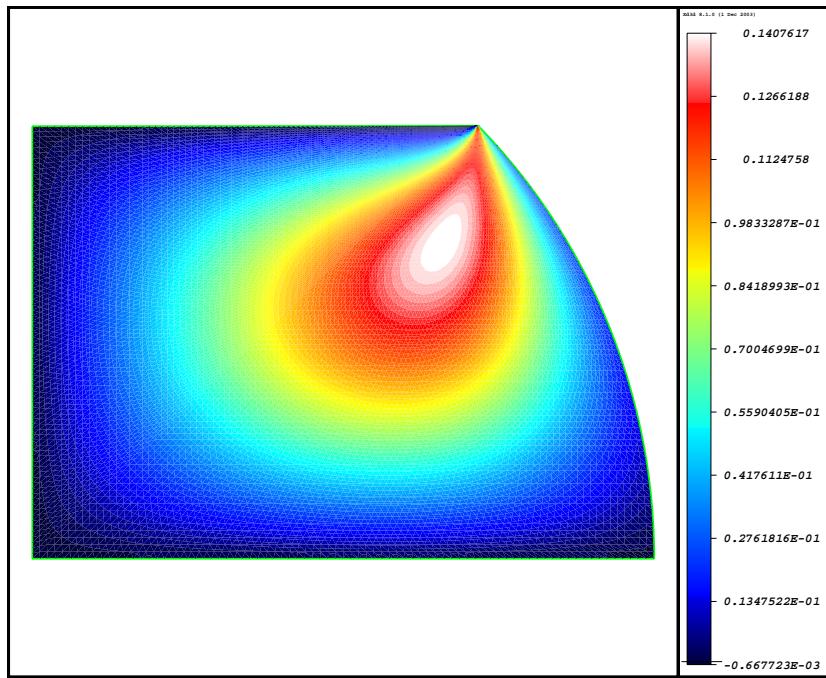


FIG. II.30 – Isovaleur de la contrainte de cisaillement correspondant à la condition aux limites «approchée». Maillage radial avec éléments triangulaires.

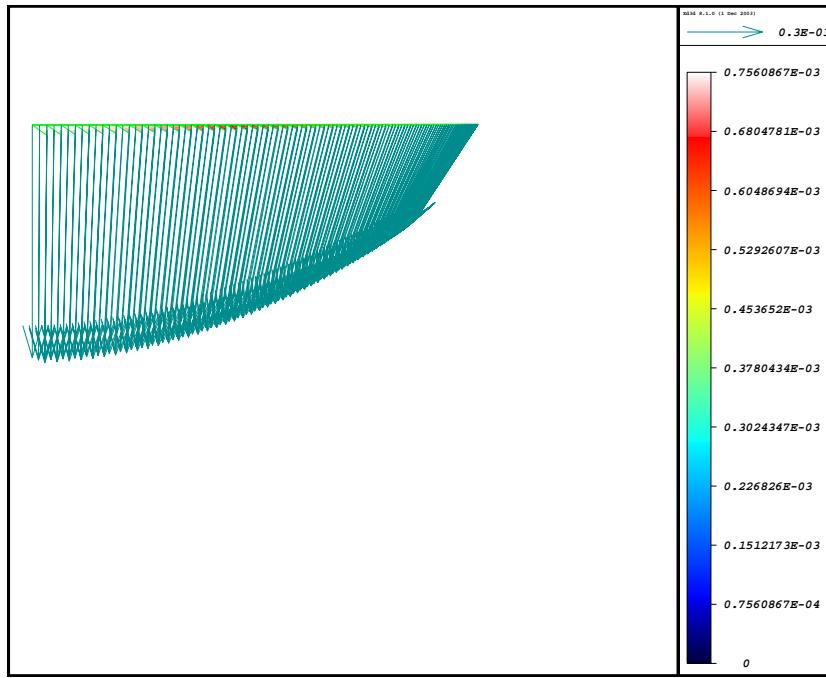


FIG. II.31 – Le déplacement de l'interface correspondant à la condition aux limites «approchée». Les flèches représentent le déplacement aux noeuds. Les valeurs sont adimensionnelles et sont à multiplier par le diamètre du grain pour avoir le déplacement en m .

3.2.3.4 Influence des paramètres sur la validité de l'approximation

Il est intéressant de faire varier le paramètre d pour étudier la validité de l'approximation en fonction des valeurs des temps caractéristiques propres à chacun des deux processus de dissolution et diffusion. Plus d est petit, plus le temps caractéristique de la diffusion est petit par rapport à celui de la dissolution (voir équation (II.33)). La longueur du chemin de diffusion est plus faible.

On constate que pour différentes valeurs de d variant entre les diamètres de grains $1 \cdot 10^{-4}$ et $1 \cdot 10^{-2}$, la convergence est atteinte dans tous les cas, c'est-à-dire que la contribution de l'énergie d'Helmholtz est toujours négligeable. La différence, est uniquement dans le nombre d'itérations avant la convergence (entre 5 et 6, une taille de grain plus grande nécessitant plus d'itérations avant la convergence). Cette étude paramétrique montre donc que quelles que soient les différences de valeurs entre les deux temps caractéristiques, quel que soit donc le processus limitant du transfert en solution, le modèle approché reste valable.

3.3 Étude de la compaction d'un agrégat de grain par transfert en solution

Après une étude et une évaluation de la contrainte normale agissant sur l'interface, on se tourne maintenant vers l'analyse de la compaction par transfert en solution. Les grains convergent à une vitesse $\dot{\lambda}$. Pour étudier ce qui se passe à mesure que la compaction par transfert en solution avance dans le temps, c'est-à-dire à mesure que le grain raccourcit, on actualise le facteur de racourcissement λ à chaque pas de temps, et on étudie l'influence sur la contrainte normale à l'interface. Quelle est l'évolution de la distribution de la contrainte normale à l'interface dans le temps, et en fonction des différents paramètres, en particulier les temps caractéristiques ? C'est ce dont nous allons discuter dans cette partie.

3.3.1 Le taux de convergence des grains

Le modèle approché validé par l'étude précédente, permet d'écrire la loi de fluage par transfert en solution suivante :

$$\dot{\lambda} \simeq \frac{1}{4(a^2/d^2)\tau_D + \tau_S} \left\{ \frac{\bar{\sigma}_n + p}{kT/\Omega^s} + \frac{C(a) - C_0}{C_0} \right\} \quad (\text{II.40})$$

Une première estimation du taux de convergence des grains peut être obtenue à partir de cette équation, pour des valeurs de d et λ choisies. La contrainte normale σ_n est déterminée comme précédemment à partir de l'équation II.39. Ensuite, on fait la moyenne des valeurs aux points d'intégration de surface, pour obtenir $\bar{\sigma}_n$. L'hypothèse avancée précédemment concernant la variation de concentration $C(a) - C_0$ est gardée.

Le calcul qui va être mené permettra d'étudier l'évolution du taux de convergence $\dot{\lambda}$ dans le temps, à mesure que la compaction avance, ainsi que l'effet de la différence entre les deux temps caractéristiques.

3.3.2 Actualisation du facteur de racourcissement du grain

À mesure que la compaction avance, le facteur de racourcissement du grain augmentera, et le grain se raccourcira.

$$\lambda_{t+1} = \lambda_t + \dot{\lambda} \times DT \quad (\text{II.41})$$

où DT est le pas de temps.

Choix du pas de temps

Le choix du pas de temps est lié à l'échelle de temps caractérisant le transfert en solution (on peut se référer aux temps caractéristiques) et du taux de convergence. Il ne doit pas être

supérieur aux deux temps caractéristiques de la diffusion et de la dissolution, et ne doit pas être trop grand pour permettre de suivre l'évolution dans le temps du raccourcissement des grains. Pendant la durée de la simulation, le pas de temps n'est pas fixe. On le fait varier en fonction de la variation du taux λ . Si celui-ci varie rapidement entre deux temps, on diminue le pas de temps. Le pas de temps est fixe pour toute la durée de la simulation.

3.3.3 Algorithme

Le schéma de calcul est explicite. L'algorithme de la simulation numérique de la compaction est donné ci-après :

1. Fixer une valeur initiale de $\lambda_{t(t=0)}$
2. Calculer la distribution de la contrainte normale à l'interface $\sigma_n(r)(t = 0)$ (éq.II.39) et sa moyenne
3. Calculer le taux $\dot{\lambda}_{t(t=0)}$ à partir de la formule II.40
4. Au deuxième pas de temps, actualiser λ_{t+1} par la formule (II.41), et actualiser le maillage
5. Recalculer la distribution de la contrainte normale à l'interface $\sigma_n(r)(t+1)$ et sa moyenne
6. Revenir au 3

3.3.4 Résultats

Les résultats de la simulation numérique de la compaction par transfert en solution sont discutés dans ce paragraphe. On prend une valeur initiale du facteur de raccourcissement λ qui vaut 0,97 (dissolution à peine commencée). Un facteur de raccourcissement de $\lambda = 0.97$ correspond à un rayon de la surface de contact égal à $a = 0.1215 \cdot 10^{-3}m$ pour $d = 1 \cdot 10^{-3}m$.

Pour une taille de grain donnée, on étudie l'évolution du raccourcissement de ce dernier dans le temps dû au transfert en solution, ainsi que l'état de contrainte dans le solide à mesure que le transfert en solution avance, et que la morphologie du grain change. On notera que pour des diamètres compris entre $1 \cdot 10^{-4}$ et $1 \cdot 10^{-2}m$, les taux de raccourcissement initiaux λ sont dans les ordres de grandeurs des taux de déformation dans la croûte terrestre, qui sont compris entre 10^{-10} et $10^{-16}s^{-1}$ [15]. On rappelle que la profondeur initiale est de 4km. On place ensuite l'agrégat dans un contexte géologique d'enfouissement, c'est-à-dire dans des conditions de températures et de pression qui varient en fonction de la profondeur.

L'évolution dans le temps du taux de convergence est donné à la figure II.32 pour les différentes tailles de grains étudiées. Dans tous les cas, le taux de convergence décroît (en valeur absolue) avec le temps, et il existe un laps de temps où ce taux varie rapidement. Au-delà de ce laps de temps, le taux de convergence devient constant dans le temps. La faible valeur du taux de convergence (par rapport au taux initial) dans cette phase de constance indique un arrêt de la

compaction de l'agrégat. Ce laps de temps est proportionnel à la taille du grain. Plus le grain est fin, plus le laps de temps est court, la compaction s'arrête donc plus tôt. Par ailleurs, le taux de convergence initial est plus élevé pour ce type de grain.

Le raccourcissement du grain (en %), calculé en pourcentage par rapport au facteur de raccourcissement initial ($\varepsilon(t) = (\lambda_{init} - \lambda_t)/\lambda_{init}$), est donné en fonction du temps à la figure II.35, pour différentes tailles de grain. Cette représentation permet de constater que la compaction du grain est plus importante lorsque ce dernier est plus fin (à un même temps donné). Ces résultats montrent que les agrégats constitués de gros grains se compactent plus lentement que ceux constitués de grains fins. Ce qui est conforme avec les observations de Houseknecht [32]. L'évolution du taux de convergence est également liée au temps caractéristique, puisque ce dernier est lié aux tailles de grain. On constate par exemple, que lorsque la distance caractéristique de la diffusion est plus grande et donc que le processus de diffusion est plus lent (ex. pour $d = 1. 10^{-2}m$), la compaction par transfert en solution se fait plus lentement, et le temps de stabilisation est plus grand (courbes *a* des figures II.32 et II.33). Et inversement, pour $d = 1. 10^{-4}m$, alors que la dissolution est le processus dominant, la compaction est plus rapide (courbes *d*).

Toujours à cette profondeur, l'évolution de l'état de contrainte local dans le grain avec le temps est maintenant étudié. On s'intéresse en particulier à la contrainte normale. Les isovaleurs sont tracées à la figure (II.36) pour $d = 1. 10^{-3}m$. On constate que plus le grain se compacte, plus le gradient entre le centre et le bord de la surface de contact est faible à l'interface. Ce qui se traduit par un dégradé plus visible sur la courbe (c), et une différence plus petite entre les deux valeurs extrêmes de la contrainte. Cette évolution de la contrainte normale dans le temps est la même en faisant varier la taille de grain (fig.II.37). Ces deux figures (II.36 et II.37) permettent également de constater que pour un même facteur de raccourcissement $\lambda = 0.826$ (fig.II.36b, et II.37c), le gradient est plus important lorsque la taille de grain est plus grande. Par ailleurs, ce raccourcissement du grain de 0.826 n'est atteint pour un grain grossier, qu'après un temps de 348 576 ans , comparé à 133 ans pour une taille de grain 10 × plus petite. Ce qui montre la lenteur de la convergence du grain pour une taille de grain plus importante.

En représentant la distribution de la contrainte normale à l'interface σ_n en fonction de la position dans l'interface et du temps (fig.II.38), on aboutit aux mêmes conclusions, à savoir que plus le grain est compacté, plus le module de la contrainte est faible et la variation le long de l'interface est petite. On aboutit après un certain temps à une phase de stabilisation de la contrainte normale, signe que la compaction s'arrête. La distribution parabolique de la contrainte normale à l'interface conforte les hypothèses émises dans la littérature [56]. La modification de cette distribution en fonction du rayon de la surface de contact est réaliste puisque plus son rayon est grand, plus le chemin de diffusion est long, et donc plus le gradient de concentration responsable du processus est faible.

Etudions maintenant l'évolution de la convergence du grain dans un contexte d'enfoncissement de l'agrégat, en faisant varier la température. Les quantités qui sont dépendantes de la température sont actualisées à chaque profondeur. Ces quantités sont le coefficient phénoménologique (qui dépend également de la pression), la concentration d'équilibre, donc les deux temps caractéristiques de la diffusion et de la dissolution. On constate sur les courbes de la figure II.33 que la différence entre les temps caractéristiques diminue lorsque l'agrégat s'enfonce. En général, le processus dominant reste le même, sauf lorsque la taille de grain est faible, et dans ce cas, les temps caractéristiques sont du même ordre de grandeur (fig.II.33c).

On notera en ce qui concerne les moyennes des contraintes normales que celles-ci tendent vers la valeur de la contrainte macroscopique (ceci peut être vérifié avec les valeurs du tableau II.2), à mesure que la compaction avance. En effet, dans la cellule unité (voir fig.D.1), le solide occupe une place plus grande lorsque λ diminue, et l'aire de la surface du solide aux points de contact tend vers celle de la surface d'application de la contrainte macroscopique, c'est-à-dire en réalité, le diamètre du grain.

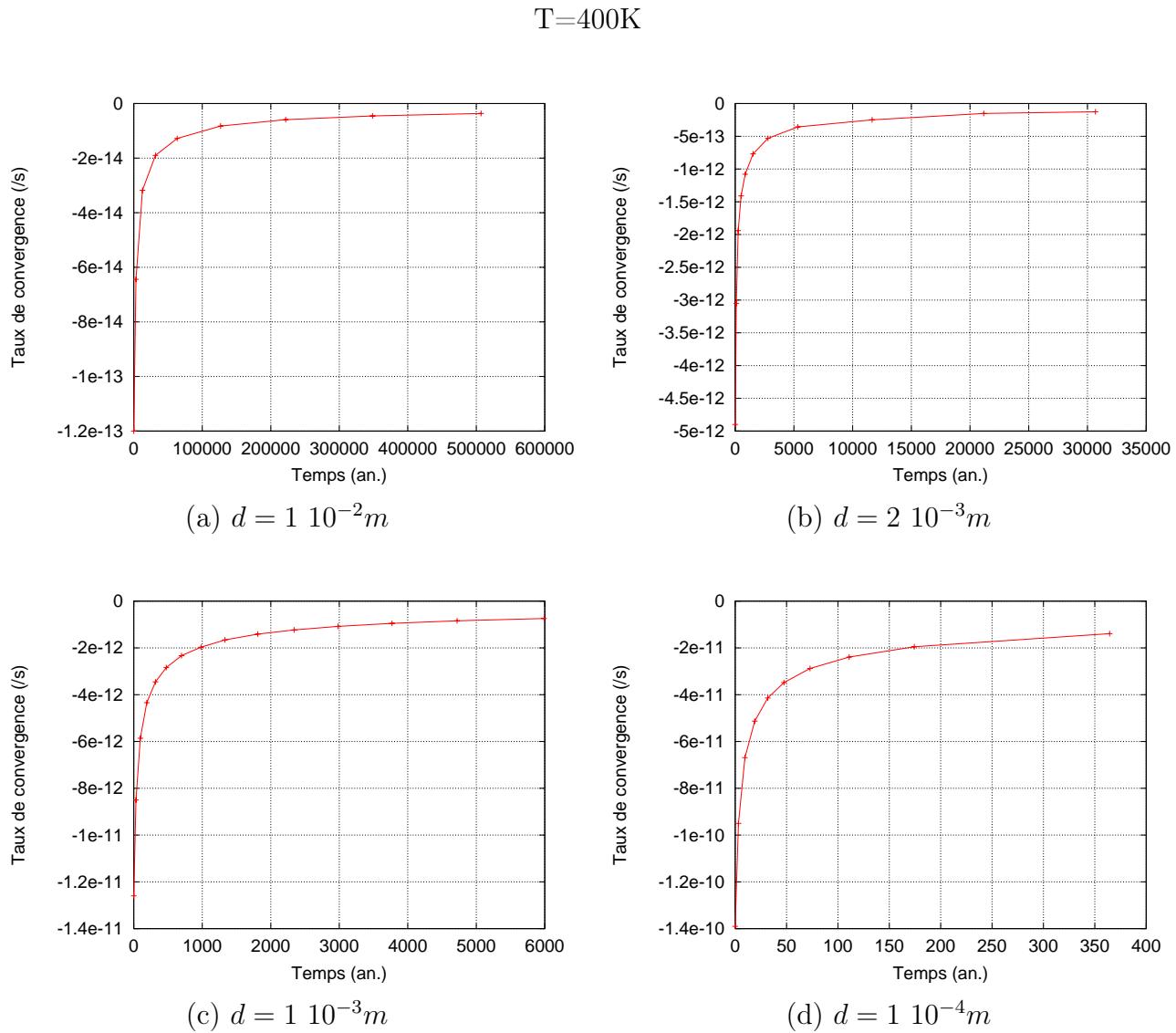


FIG. II.32 – Évolution du taux de convergence dans le temps pour différentes tailles de grain. Profondeur 4km, T=400K

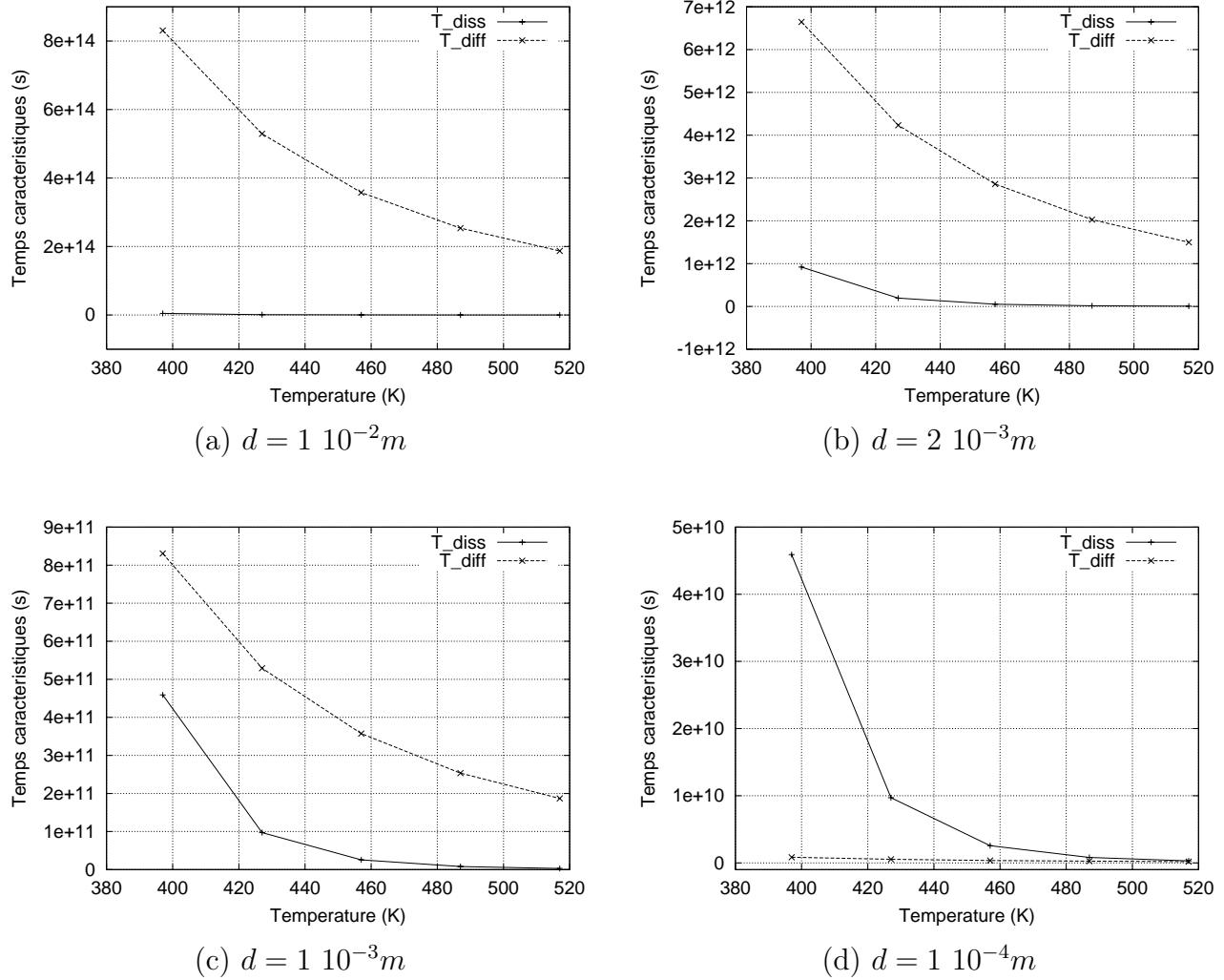


FIG. II.33 – Évolution des temps caractéristiques et de leur différence en fonction de la profondeur et de la taille de grain.

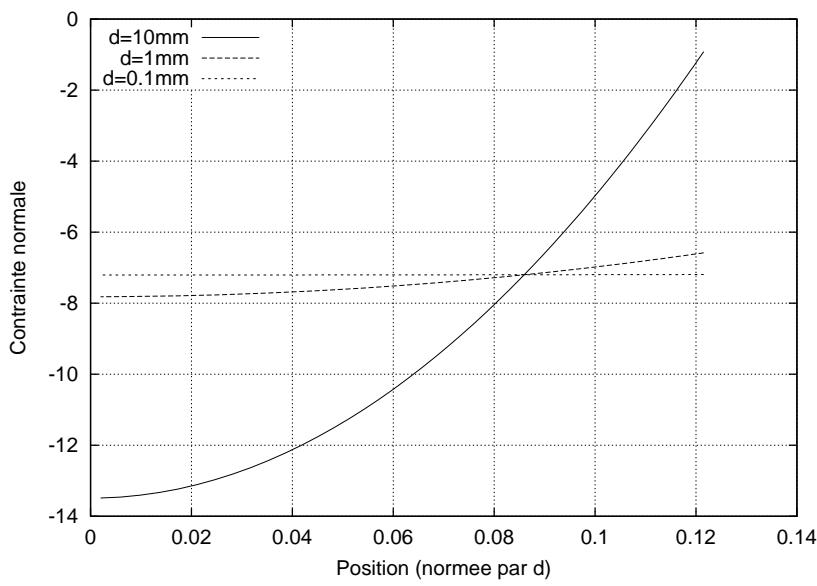


FIG. II.34 – Différentes distributions de la contrainte intergranulaire en fonction du diamètre du grain d .

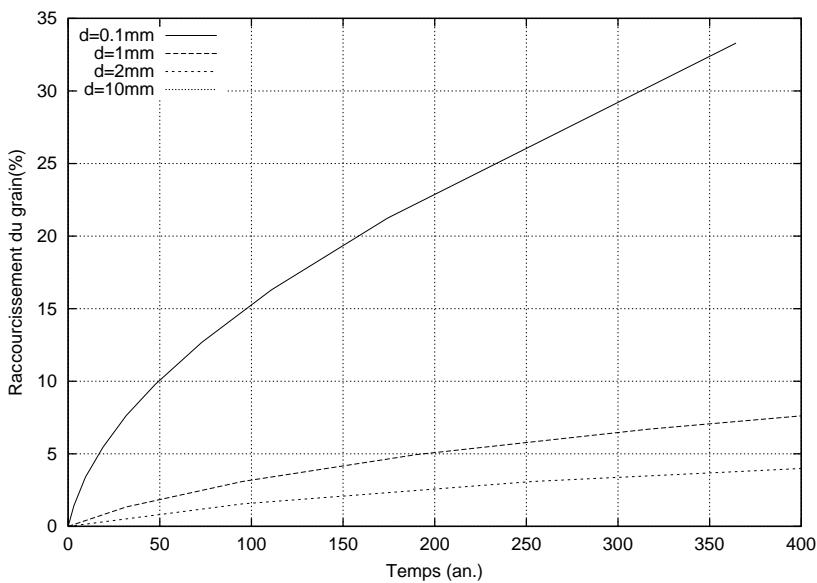


FIG. II.35 – Courbes de compaction, ou variation de la quantité de compaction dans le temps, pour différentes tailles de grain.

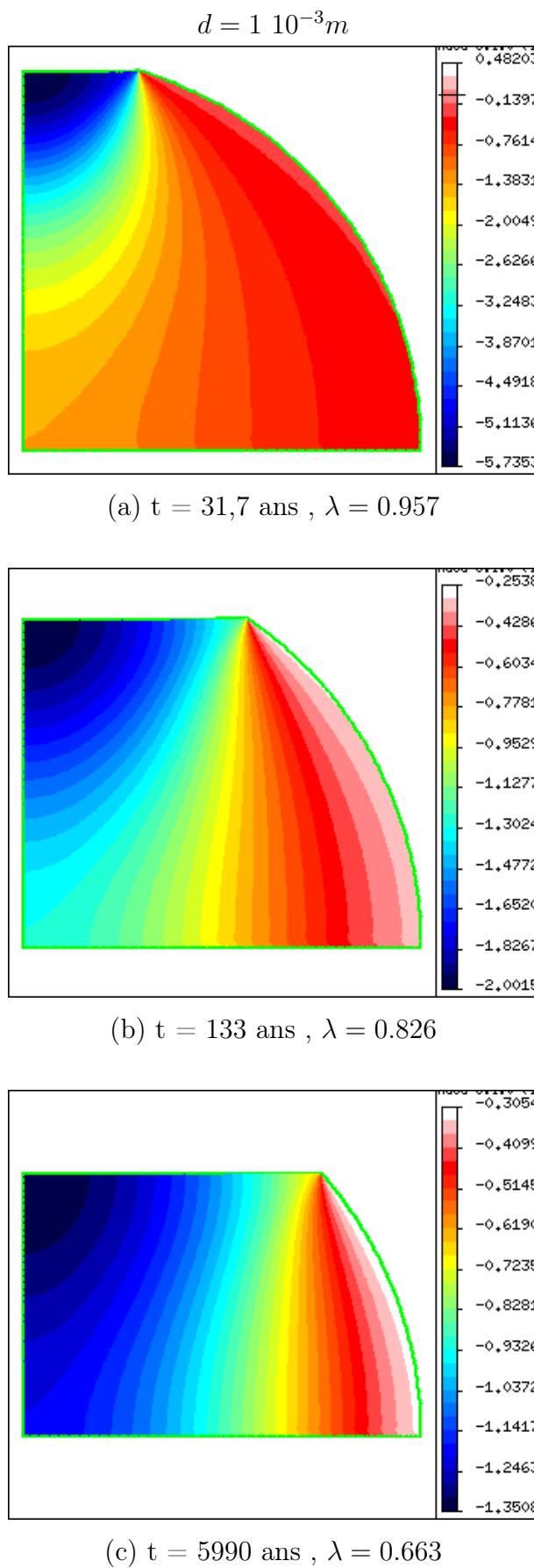


FIG. II.36 – Évolution de l'état de contrainte à mesure que le grain s'aplatit. Modification du gradient le long de l'interface à mesure que la compaction avance. $d = 1 \cdot 10^{-3} m$.

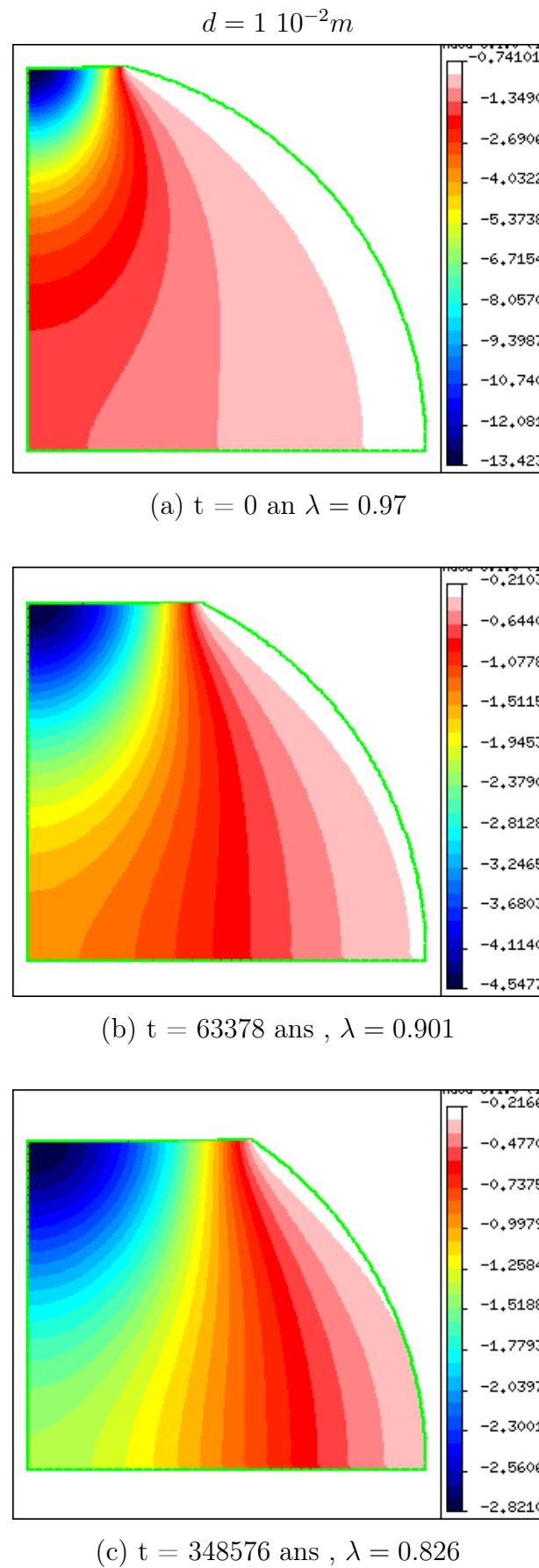


FIG. II.37 – Évolution de l'état de contrainte à mesure que le grain s'aplatit. Modification du gradient le long de l'interface à mesure que la compaction avance. $d = 1 \cdot 10^{-2} m$.

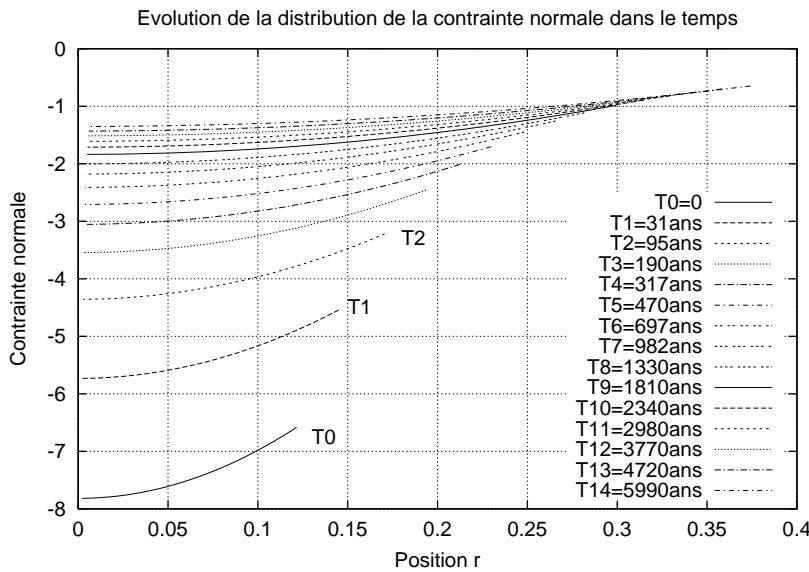


FIG. II.38 – Différentes distributions de la contrainte intergranulaire à des temps différents, et donc à des facteurs de racourcissement λ différents. $d = 1. 10^{-2}m$

3.4 Conclusions

Ce modèle de compaction par transfert en solution a pour caractéristique, la prise en compte de la diffusion le long du joint de grain. Une expression de la contrainte normale intergranulaire a été dérivée en combinant les équations de flux de masse, de la force thermodynamique et de la loi cinétique. Cette contrainte normale intergranulaire, notée σ_n , est la condition de chargement sur la surface de contact du grain. Elle est fonction du taux de convergence λ du grain, du gradient de concentration de soluté, et de l'énergie libre d'Helmholtz. Cette dernière peut être négligée selon les hypothèses d'approximation avancée dans la littérature [39]. Le modèle approché correspondant, a été validé dans cette section par une méthode numérique, en utilisant un algorithme explicite : le problème aux limites présenté au paragraphe 2.1 de ce chapitre est résolu, à la première itération, avec la condition aux limites approchée $\sigma_n|_0$; puis l'énergie d'Helmholtz calculée à partir des résultats de cette première itération est introduite dans $\sigma_n|_1$, condition aux limites à la deuxième itération. On a constaté qu'après 3 itérations (nombre variable selon la taille de grain et la tolérance fixée), le calcul a convergé, c'est-à-dire que la différence entre les premières valeurs de σ_n et les dernières, est assez faible pour que la correction apportée par l'énergie d'Helmholtz soit négligeable. Ce calcul a également montré que la distribution de la contrainte normale intergranulaire σ_n est parabolique.

L'étude de la compaction d'un agrégat de grain par transfert en solution a été faite à partir du modèle approché, en négligeant dans la loi de fluage, la contribution de l'énergie d'Helmholtz sur la force thermodynamique. On a constaté que le taux de compaction évolue plus rapide-

ment dans un premier temps, puis se stabilise. Ce «temps de stabilisation» est de l'ordre d'une centaine d'année pour un grain de taille 10^{-4} , et de l'ordre de 100 000 ans lorsque d vaut 10^{-2} . En général, la compaction est plus lente pour des grains plus gros (à une profondeur donnée). En outre, lorsque le grain se compacte, la variation de la contrainte intergranulaire le long de l'interface devient moins importante. La contrainte intergranulaire varie également en fonction de la taille du grain : plus la taille de grain est importante, plus la valeur maximale de la contrainte intergranulaire est grande ; le gradient devient également plus important.

Ces résultats ont montré qu'il est intéressant de faire varier la profondeur et donc la température et étudier l'évolution du taux de compaction avec la profondeur d'enfouissement. En effet, ce que nous voyons en somme, c'est qu'à une profondeur fixée, le grain se dissout et perd de la matière (leurs centres convergent) : à une vitesse d'abord rapide, puis qui devient constante dans le temps. Donc, le temps avancera mais ce taux restera le même. Mais d'un autre côté, plus le temps avance, plus ce grain va être enfoui. Si son taux de convergence reste constant à une profondeur donnée (il ne perd plus beaucoup de matière), il reste à savoir comment ce taux évolue en fonction de la profondeur. En faisant varier la profondeur, la contrainte macroscopique et la pression de fluide augmentent. Les conditions de chargement étant plus importantes, le taux de convergence est donc plus élevé.

Le modèle approché néglige l'énergie libre d'Helmholtz dans la force entraînant le transfert en solution. Cette énergie est dépendante de l'état de contrainte local dans le solide. L'approximation qui a été faite est pratique du point de vue calcul, puisque celui-ci devient explicite. Mais elle permet aussi de négliger l'effet d'une singularité en contrainte au bord de la surface de contact : la contribution de l'énergie d'Helmholtz dans le solide étant très faible, il en est de même de la contribution de la singularité, dans la force responsable du transfert en solution. Dans les cas où aucune des quantités entrant en compte dans la force thermodynamique (la contrainte agissant sur le solide, l'énergie d'Helmholtz ou la contribution chimique à la force thermodynamique) n'est négligeable, l'effet de la singularité due à la condition de chargement au point de jonction interface-pore pourrait jouer un rôle, par exemple en induisant une dissolution locale ou un poinçonnement.

ANALYSE DE STABILITÉ LINÉAIRE EN 3D D'UNE INTERFACE SOLIDE-FLUIDE SOUMISE AU TRANSFERT EN SOLUTION

Le transfert en solution induit des modifications de la morphologie du solide. Les travaux expérimentaux de den Brok et Morel, 2001 [9] ont montré que sur un cristal ayant la forme d'un parallélépipède percé d'un trou perpendiculairement à sa plus grande face, soumis à une contrainte verticale, et en contact avec un fluide sous-saturé, se sont développées des rugosités de surface, caractéristique d'une instabilité. Ces rugosités sont caractérisées par des rainures approximativement perpendiculaires à la direction de la contrainte de compression, sauf à proximité du trou (voir Chapitre I, section 3.2, fig I.16).

Nous allons faire l'étude de l'évolution dans le temps de cette morphologie en se fondant sur une analyse de stabilité linéaire (Slorovitz, 1989 voir [65] dans le cas d'instabilité due à la diffusion). Celle-ci consiste à ajouter à la géométrie de l'interface, de petites perturbations, qui sont inévitables en réalité (Heidug et Leroy, 1994 [27], Leroy et Heidug, 1994 [42]), et d'étudier leur évolution dans le temps. Si ces perturbations s'accentuent, l'équilibre est alors instable. C'est ce qu'on retrouve dans les résultats de Den Brok et Morel[9] : une perturbation de l'interface (telle qu'une rugosité) entraîne une concentration de contrainte aux creux de la rugosité, ce qui augmente la dissolution, qui à son tour accentue la rugosité. La géométrie de l'interface est donc instable, ainsi que l'équilibre thermodynamique de l'interface qui correspond à un arrêt de la dissolution.

Un des points importants d'une analyse de stabilité est la détermination des conditions critiques du déclenchement de l'instabilité, à partir d'un critère de stabilité, ainsi que la détermination des modes de perturbations les plus déstabilisants (Ghoussoub et Leroy, 2001 [16], Leroy et Heidug, 1994 [42]). L'effet de la contrainte appliquée, de la pression de fluide, du potentiel chimique et de la tension de surface a été étudié, et il s'est avéré que la tension de surface a un effet destabilisant.

L'objectif de cette étude est la recherche d'un critère exact d'instabilité relative au transfert en solution, pour des surfaces en 3D subissant un état de contrainte non-hydrostatique, et la recherche du mode dominant de l'instabilité. Le critère d'instabilité est ensuite appliqué au cas traité par den Brok et Morel [9] pour prédire l'orientation des sillons, la variation spatiale de la longueur d'onde et le taux de croissance du mode dominant d'instabilité.

Les différentes étapes de l'analyse sont la description de la perturbation infinitésimale appliquée à la géométrie, puis aux contraintes ; la linéarisation des conditions aux limites en se basant sur ces contraintes perturbées et en considérant uniquement les termes de premier ordre de la perturbation ; et la résolution du problème au premier ordre. La distribution des contraintes dans le solide en réponse aux perturbations est calculée par la méthode des vecteurs de Galerkin. Cette distribution est ensuite utilisée pour déterminer la force thermodynamique responsable du transfert en solution, utilisée dans la loi cinétique qui gouverne le phénomène. Cette dernière étape consiste en la linéarisation de la loi cinétique. Cette dernière permet enfin de déterminer le critère de stabilité.

1. Stabilité linéaire

On présente la structure générale des champs perturbés , puis la linéarisation des conditions aux limites pour poser les équations du problème au premier ordre.

1.1 Perturbation de la géométrie

Les perturbations sont obtenues par décomposition en modes normaux caractérisé par le vecteur polarisation \mathbf{k} .

$$f(\mathbf{y}, t) = \exp\left(\underbrace{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{y}}_{\text{Evolution spatiale}} + \underbrace{\lambda t}_{\text{Evolution temporelle}} \right) \quad (\text{III.1})$$

où λ est un scalaire (réel ou complexe) qui détermine la stabilité de la solution fondamentale définie par une interface plane. C'est l'exposant de stabilité ou encore le taux de croissance du mode normal. Le système est stable si la partie réelle de λ est négative, et instable si elle est positive. Si elle est nulle, la stabilité est neutre.

L'interface solide/fluide est idéalisée par une surface plane dans le plan (1,2) (fig.III.1). L'axe 3 est dirigée vers le fluide. Le point \mathbf{y} de cette interface a pour coordonnées (y^1, y^2, y^3) dans la base orthonormée $\{\mathbf{e}_i\}$. Assujettie à une perturbation d'amplitude infinitésimale, l'interface est décrite par la coordonnée contravariante y^3 comme suit :

$$y^3 = 0 + \varepsilon Y f(\mathbf{y}, t) \quad \text{avec } \varepsilon \ll 1 \quad \text{et} \quad \mathbf{k} = k_1 \mathbf{e}_1 + k_2 \mathbf{e}_2 \quad (\text{III.2})$$

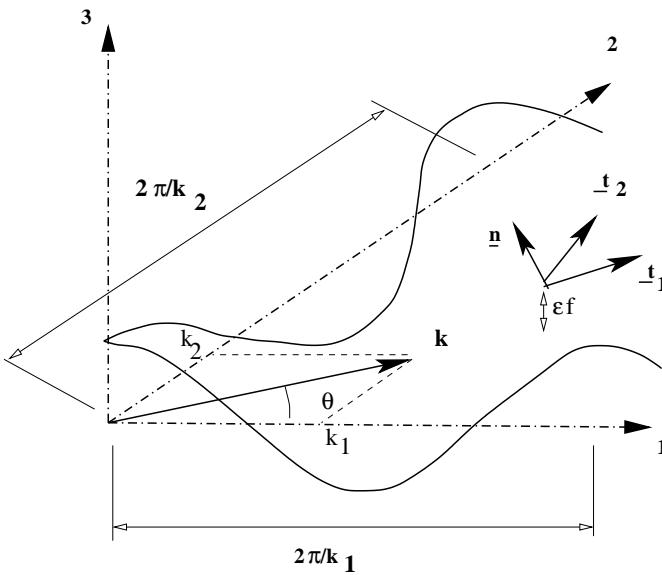


FIG. III.1 – La géométrie de l'interface perturbée entre la phase solide et la phase fluide.

avec $f(\mathbf{y}, t)$ donné à l'équation III.1 et i le nombre imaginaire pur. Lorsqu'il n'y a pas de perturbation ($\varepsilon = 0$), l'interface est plane. L'effet de la perturbation (en unités de Y) au premier ordre est une forme sinusoïdale définie par le vecteur de polarisation \mathbf{k} de norme $k = \sqrt{k_1^2 + k_2^2}$ faisant un angle θ avec l'axe 1 (fig.III.1), axe de contrainte principale.

1.2 Représentation d'une surface en 3D

On utilisera les notions de géométrie différentielle en 3D (Aris, 1989 [2]), pour définir les vecteurs tangent et normal à la surface, et pour définir la courbure.

Le vecteur tangent (covariant) s'écrit :

$$\mathbf{t}_\alpha \equiv \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial y^\alpha} = \mathbf{e}_\alpha + i\varepsilon Y k_\alpha f(\mathbf{y}, t) \mathbf{e}_3 \quad (\alpha = 1, 2) \quad (\text{III.3})$$

Le vecteur normal dirigé vers le fluide, est tel que le triplet $\{\mathbf{t}_\alpha, \mathbf{n}\}$ est une base directe normale orthonormée :

$$\mathbf{n} = \mathbf{e}_3 - i\varepsilon Y k_\alpha \mathbf{e}_\alpha f(\mathbf{y}, t) \quad (\text{III.4})$$

(avec sommation sur les indices répétés).

La courbure

La tension de surface est proportionnelle à la courbure. Le calcul de cette dernière nécessite la définition de la première et la deuxième forme fondamentale de la surface (voir Aris, 1989 [2]).

La première forme fondamentale correspond au tenseur métrique de la surface qui a pour composantes covariantes :

$$a_{\alpha\beta} \equiv \mathbf{t}_\alpha \mathbf{t}_\beta = \delta_{\alpha\beta} + o(\varepsilon^2), \quad (\text{III.5})$$

où $\delta_{\alpha\beta}$ est le symbole de Kronecker (qui vaut 1 si $\alpha = \beta$, zéro sinon). Le tenseur métrique, au second ordre de la perturbation, reste inchangé par rapport au métrique obtenu pour l'interface plane (ordre zéro). Les composantes contravariantes du tenseur métrique sont celles qui seront requises dans la suite, et ce sont les $\delta^{\alpha\beta}$, avec la même définition que le symbole de Kronecker, au second ordre en ε .

La deuxième forme fondamentale correspond au tenseur dont les composantes symétriques sont :

$$b_{\alpha\beta} \equiv \frac{\partial^2 \mathbf{y}}{\partial y^\alpha \partial y^\beta} \cdot \mathbf{n} = 0 + \varepsilon k_\alpha k_\beta Y f(\mathbf{y}, t) \quad (\text{III.6})$$

Ce tenseur appelé tenseur de courbure vaut 0 pour l'interface plane, et contient une correction de premier ordre en ε pour la géométrie perturbée.

La courbure moyenne est définie par l'expression suivante, [2] :

$$2H \equiv a^{\alpha\beta} b_{\alpha\beta}, \quad \text{donc}$$

$$2H = 0 - \varepsilon k^2 Y f(\mathbf{y}, t) \quad (\text{III.7})$$

1.3 Perturbation des autres champs

La perturbation de la géométrie induit une perturbation des autres champs tels que la contrainte, la déformation... On considère alors ces champs comme la somme d'une quantité correspondant à la solution fondamentale du problème et d'une autre correspondant à une petite perturbation :

$$A(\mathbf{x}, t) = A^0(\mathbf{x}) + \varepsilon \tilde{A}(\mathbf{x}) \exp(\lambda t) \quad (\text{III.8})$$

Le premier terme (du deuxième membre) varie dans l'espace mais non dans le temps, étant donné que la solution fondamentale (une interface parfaitement plane) est indépendante du temps. Le deuxième est dû à une perturbation qui varie exponentiellement dans le temps. Si la solution fondamentale ne dépend que de la coordonnée verticale x_3 , alors ces champs s'écrivent simplement :

$$A(\mathbf{x}, t) = A^0(\mathbf{x}) + \varepsilon \tilde{A}(x_3) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + \lambda t) \quad (\text{III.9})$$

correspondant à la décomposition classique en modes normaux. Cette structure générale est maintenant appliquée pour définir les problèmes à l'ordre zéro et au premier ordre, le dernier étant obtenu par linéarisation.

1.4 Linéarisation des conditions aux limites et des états initiaux de contraintes

Après avoir donné la forme des perturbations, nous allons écrire les conditions aux limites et appliquer ces perturbations aux contraintes pour obtenir une écriture linéarisée des conditions aux limites.

L'interface solide-fluide est le lieu de conditions de compatibilité de contraintes entre les deux phases, qui sont les conditions aux limites de notre problème. Le solide est soumis à une contrainte non-hydrostatique, tandis que le fluide, à une pression de pore p , constante dans l'espace et dans le temps, et ne tenant compte d'aucun effet de viscosité. L'interface fournit des effets de tension de surface qui sont isotropes. L'équilibre mécanique à l'interface s'écrit alors, selon les conditions de Laplace (voir J.Ghoussoub 2000 [15], Heidug et Leroy, 1994 [27]) :

$$[\![\sigma]\!]: \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} = -2H\gamma \quad (\text{III.10})$$

$$[\![\sigma]\!]: \mathbf{n} \otimes \mathbf{t}_\alpha + \mathbf{t}_\alpha \otimes \mathbf{n} = 0 \quad (\text{III.11})$$

Les termes entre crochets représentent les sauts de ces quantités à l'interface, c'est-à-dire la différence entre leurs valeurs (estimées à l'interface) dans la phase fluide, et celles dans la phase solide. Les notations tensorielles sont résumées comme suit, avec un système de coordonnées cartésiennes. Les deux points : entre deux tenseurs du second-ordre \mathbf{A} et \mathbf{B} résulte en un scalaire $A_{ij}B_{ij}$. Le produit tensoriel \otimes entre deux vecteurs \mathbf{a} et \mathbf{b} résulte en un tenseur de second ordre dont l'action sur un vecteur \mathbf{c} est le vecteur $\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{a}(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})$.

Ces conditions aux limites sont maintenant appliquées à la géométrie perturbée. La perturbation (III.8) est appliquée aux contraintes et au vecteur tangent et normal (III.3) et (III.4). On obtient, en regroupant les termes de même ordre en ε , et en négligeant les termes d'ordre supérieur à un,

$$[\![\sigma^0]\!]: \mathbf{n}^0 \otimes \mathbf{n}^0 + \varepsilon([\![\tilde{\sigma}]\!]: \mathbf{n}^0 \otimes \mathbf{n}^0 + [\![\sigma^0]\!]: 2\tilde{\mathbf{n}} \otimes \mathbf{n}^0) = -(2H^0 + \varepsilon 2\tilde{H})\gamma, \quad (\text{III.12})$$

$$[\![\sigma^0]\!]: (\mathbf{n}^0 \otimes \mathbf{t}_\alpha^0 + \mathbf{t}_\alpha^0 \otimes \mathbf{n}^0) + \varepsilon([\![\tilde{\sigma}]\!]: (\mathbf{n}^0 \otimes \mathbf{t}_\alpha^0 + \mathbf{t}_\alpha^0 \otimes \mathbf{n}^0) + 2[\![\sigma^0]\!]: (\tilde{\mathbf{n}} \otimes \mathbf{t}_\alpha^0 + \tilde{\mathbf{t}}_\alpha \otimes \mathbf{n}^0)) = 0$$

Le problème à l'ordre zéro résulte de la mise à zéro de la perturbation ($\varepsilon = 0$), et dans ce cas :

$$\sigma_{33}^0 = -p, \quad \sigma_{3\alpha}^0 = 0. \quad (\text{III.13})$$

Dans ces équations, les composantes de la contrainte dans le fluide ont été exprimées en fonction de la pression de fluide p , et celles du solide sont celles notées σ_{ij}^0 . Notons que seules

trois des six composantes de la contrainte sont définies par les conditions de Laplace. De plus, on suppose que l'état de contrainte est homogène dans le demi-espace occupé par le solide. Par ailleurs, les directions principales de la contrainte sont orientées dans le système de coordonnées introduit à la figure III.1. L'état de contrainte dans le solide s'écrit donc simplement :

$$\boldsymbol{\sigma}^0 = -p\mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 + \sum_{\alpha=1}^2 \sigma_\alpha^0 \mathbf{e}_\alpha \otimes \mathbf{e}_\alpha \quad (\text{III.14})$$

avec comme seules inconnues, les deux contraintes principales uniformes σ_α^0 . Ces contraintes étant indépendantes de la coordonnée x_α , la décomposition en modes normaux (III.9) est valable, et sera appliquée dans le reste de l'étude.

En revenant à l'équation III.12, et en prenant les termes proportionnels à ε , on obtient les équations du problème au premier ordre. Ces équations sont les conditions aux limites linéarisées :

$$\begin{aligned} \llbracket \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \rrbracket : \mathbf{n}^0 \otimes \mathbf{n}^0 + \llbracket \boldsymbol{\sigma}^0 \rrbracket : 2\tilde{\mathbf{n}} \otimes \mathbf{n}^0 &= -2\tilde{H}\gamma, \\ \llbracket \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \rrbracket : (\mathbf{n}^0 \otimes \mathbf{t}_\alpha^0 + \mathbf{t}_\alpha^0 \otimes \mathbf{n}^0) + 2\llbracket \boldsymbol{\sigma}^0 \rrbracket : (\tilde{\mathbf{n}} \otimes \mathbf{t}_\alpha^0 + \tilde{\mathbf{t}}_\alpha \otimes \mathbf{n}^0) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{III.15})$$

En remplaçant dans ces équations la solution fondamentale du problème d'ordre zéro (éq.(III.14), $\mathbf{n}^0 = \mathbf{e}^3$, $\mathbf{t}_\alpha^0 = \mathbf{e}^\alpha$), et les expressions des tangentes, de la normale et de la courbure au premier ordre de perturbation (éqs.III.3, III.4, et III.7), on obtient :

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{33} &= -k^2 Y \gamma f(\mathbf{y}, t), \\ \tilde{\sigma}_{\alpha 3} &= k_\alpha Y \bar{\sigma}_\alpha f(\mathbf{y}, t) \quad (\text{pas de sommation sur } \alpha), \end{aligned} \quad (\text{III.16})$$

où $\bar{\sigma}_\alpha$ est la contrainte effective $\sigma_\alpha + p$.

La solution du problème de premier ordre est l'état de contrainte 3D qui satisfait la condition aux limites III.15, et l'équilibre dans le solide. La recherche de cette solution est faite maintenant dans le paragraphe suivant.

1.5 Solution du problème élastique 3D de premier ordre

La solution d'un problème d'élasticité linéaire bien posé est unique. Pour certains de ces problèmes, des solutions analytiques existent. Il existe plusieurs méthodes pour construire ces solutions, et en particulier dans les cas 3D. Nous choisissons de suivre la méthode proposée par Fung, 1965 [12], basée sur les vecteurs de Galerkin, pour obtenir le champ de contrainte qui satisfait l'équilibre mécanique dans un solide dans un demi-espace, et les conditions de contrainte aux limites appropriées. On propose trois vecteurs de Galerkin, le premier qui satisfait la composante normale du vecteur traction sur l'interface solide-fluide, et les deux autres qui

équilibrivent ses composantes tangentielles. Leur superposition donne un champ de contraintes qui satisfait l'équilibre dans le solide et les conditions aux limites uniformes. Les deux composantes de la contrainte perturbée sur les interfaces solide-fluide, nécessaires pour l'analyse de stabilité, sont données ci-après après avoir substitué dans leurs expressions (E.14), les conditions aux limites III.16 (voir les détails à l'annexe E).

$$\begin{aligned}\tilde{\sigma}_{11} &= \{-k^2\gamma(2\nu + (1 - 2\nu)K_1^2) - 2k(K_1^2\bar{\sigma}_1(1 + \nu K_2^2) + \nu K_2^4\bar{\sigma}_2)\}Yf(\mathbf{y}, t), \\ \tilde{\sigma}_{22} &= \{-k^2\gamma(2\nu + (1 - 2\nu)K_2^2) - 2k(K_2^2\bar{\sigma}_2(1 + \nu K_1^2) + \nu K_1^4\bar{\sigma}_1)\}Yf(\mathbf{y}, t).\end{aligned}\quad (\text{III.17})$$

2. Analyse de stabilité linéaire pour la prediction de l'évolution de la morphologie par transfert en solution

La technique d'analyse de stabilité linéaire présentée dans la section précédente est maintenant appliquée à l'étude de l'évolution de la morphologie du demi-espace plan en contact avec le fluide. Les équations relatives au transfert en solution sont présentées avant de calculer l'exposant de stabilité. Le paragraphe final est dédié à l'analyse des résultats dont le principal est la direction du vecteur de polarisation de la perturbation.

2.1 Les équations du transfert en solution

L'évolution de l'interface solide-fluide est gouvernée par une loi cinétique linéaire qui relie le flux de masse migrant vers la phase fluide J_n (positive en cas de dissolution), à la force thermodynamique χ , par un coefficient phénoménologique \mathcal{L} (voir J. Ghoussoub, 2000 [15]) :

$$J_n = \mathcal{L}\chi \quad (\text{III.18})$$

Le flux de masse J_n est lui-même relié à la vitesse non-matérielle lagrangienne de propagation de l'interface, notée ici U_n par :

$$J_n = \rho U_n \quad (\text{III.19})$$

où ρ est la densité de masse courante. Une vitesse négative correspond à un rétrécissement du solide, et donc au processus de dissolution.

La force thermodynamique χ s'exprime en fonction de l'énergie libre d'Helmholtz, notée ici ψ , du potentiel chimique du soluté μ_s , et de la composante normale de la contrainte agissant sur le solide. En prenant en compte l'effet de la tension de surface, celle-ci vaut $p - 2H\gamma$. La force s'écrit alors :

$$\chi = \psi_s + \frac{p - 2H\gamma}{\rho} - \mu_s \quad (\text{III.20})$$

L'énergie libre d'Helmholtz spécifique s'exprime en fonction de la densité de référence du solide ρ_0 , et de l'état de contrainte et de déformation local dans le solide, et peut s'écrire en fonction uniquement des contraintes :

$$\psi_s = \frac{1}{2\rho_0} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2E\rho_0} ((1 + \nu)tr(\boldsymbol{\sigma}^2) - \nu(tr\boldsymbol{\sigma})^2) \quad (\text{III.21})$$

La densité de référence et la densité courante sont reliées entre elles par :

$$\frac{\rho_0}{\rho} = 1 + \frac{1 - 2\nu}{E} tr(\boldsymbol{\sigma}) \quad (\text{III.22})$$

En dépit de l'hypothèse des petites perturbations, la variation de la densité du matériau $(\rho - \rho_0)/\rho_0$ est du même ordre de grandeur que la variation relative de l'énergie libre d'Helmholtz, proche de l'équilibre thermodynamique ($\chi = 0$), comme discuté dans Leroy et Heidug, 1994 ([42]). La différence entre les densités courante et de référence est donc retenue dans la suite de l'analyse de stabilité linéaire.

2.2 L'exposant de stabilité

La loi cinétique (III.18) donne la seule échelle de temps du problème et sa linéarisation amène à la définition de l'exposant de stabilité en fonction de la contrainte et de la perturbation de la géométrie.

Pour cela, la linéarisation de la force thermodynamique (III.20) et donc de l'énergie libre d'Helmholtz (III.21), de la densité (III.22) et de la courbure (III.7) est nécessaire, et se fait en appliquant la perturbation sur les contraintes et la géométrie, présentée précédemment. Respectivement, on a :

$$\tilde{J}_n = \mathcal{L}\tilde{\chi} \quad (\text{III.23})$$

$$\tilde{\chi} = \tilde{\psi}_s - \frac{\tilde{\rho}p}{\rho^2} - \frac{\gamma}{\rho}(2\tilde{H}) \quad (\text{III.24})$$

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_s = \frac{1}{E\rho_0} & (\tilde{\sigma}_{11}(\bar{\sigma}_{11} - \nu\bar{\sigma}_{22} - (1 - 2\nu)p) + \tilde{\sigma}_{22}(\bar{\sigma}_{22} - \nu\bar{\sigma}_{11} - (1 - 2\nu)p) \\ & - \tilde{\sigma}_{33}(\bar{\sigma}_{11} + \nu\bar{\sigma}_{22} + (1 - 2\nu)p)) \end{aligned} \quad (\text{III.25})$$

$$\frac{\tilde{\rho}}{\rho^2} = -\frac{1 - 2\nu}{E\rho_0} (\tilde{\sigma}_{11} + \tilde{\sigma}_{22} + \tilde{\sigma}_{33}) \quad (\text{III.26})$$

La linéarisation de l'équation (III.19) reliant flux de masse à la vitesse non-matérielle donne :

$$\tilde{J}_n = -\rho\lambda Y f(\mathbf{y}, t) \quad (\text{III.27})$$

La combinaison de toutes ces expressions permet de déterminer l'expression de l'exposant de stabilité, (en ayant pris le soin de remplacer les quantités perturbées par leurs expressions respectives) :

$$\frac{\lambda \rho Y}{\mathcal{L}} = -k^2 \frac{\gamma Y}{\rho} \left\{ 1 - \frac{1-2\nu}{E\rho_0} [\bar{\sigma}_{11}(\nu + K_1^2 - \nu K_2^2) + \bar{\sigma}_{22}(\nu - \nu K_1^2 + K_2^2)] \right\} \text{III.28)$$

$$+ k \frac{2Y}{E\rho_0} \{ \bar{\sigma}_{11}^2 K_1^2 (1 + \nu K_2^2 - \nu^2 K_1^2) + \bar{\sigma}_{22}^2 K_2^2 (1 + \nu K_1^2 - \nu^2 K_2^2) - \bar{\sigma}_{11} \bar{\sigma}_{22} 2K_1^2 K_2^2 \nu (1 + \nu) \}$$

Les composantes des contraintes étant petites comparées au module élastique, on peut simplifier l'expression précédente, en négligeant les termes en $\bar{\sigma}_{\alpha\beta}/E$, et en introduisant un exposant de stabilité adimensionnel Λ . L'expression simplifiée est obtenue en remplaçant l'unité de longueur de la perturbation Y par γ/E , qui apparaît comme la seule longueur caractéristique du problème, et en remplaçant ainsi kY par une valeur adimensionnelle k . La contrainte $\sigma_{\alpha\beta}$ est normalisée par E pour avoir une contrainte adimensionnelle. On obtient :

$$\Lambda \equiv \frac{\lambda \rho^2 \gamma}{\mathcal{L} E^2} = -k^2 + 2kF(\bar{\sigma}_{\alpha\beta}, K_\delta) \quad \text{avec} \quad (\text{III.29})$$

$$F(\bar{\sigma}_{\alpha\beta}, K_\delta) = \bar{\sigma}_{11}^2 K_1^2 (1 + \nu K_2^2 - \nu^2 K_1^2) + \bar{\sigma}_{22}^2 K_2^2 (1 + \nu K_1^2 - \nu^2 K_2^2) - \bar{\sigma}_{11} \bar{\sigma}_{22} 2K_1^2 K_2^2 \nu (1 + \nu)$$

où cette fois k et $\bar{\sigma}_{\alpha\beta}$ sont adimensionnels.

On notera que l'exposant de stabilité est un nombre réel, donc qu'aucune instabilité du type ondulatoire ne peut se produire.

2.3 Résultats de l'analyse de stabilité

L'exposant de stabilité adimensionnel (III.29) est composé de deux termes, dont le premier est toujours négatif, proportionnel au carré du nombre d'onde, et lié à la tension de surface. Le deuxième est toujours positif pour la perturbation dominante¹ – un fait que nous établirons dans la suite de cette section –, fonction de la contrainte effective et proportionnel au nombre d'onde. Comme pour l'analyse de stabilité 2D (voir J. Ghoussoub 2002 [15]), le système est toujours stable ($\Lambda < 0$) pour de grands nombres d'onde et de petites longueurs d'onde, dû à la tension de surface (le premier terme est lié à la tension de surface). Le facteur déstabilisant est la contrainte effective.

Le mode dominant (taux de croissance maximum), est maintenant étudié en fonction de son nombre d'onde adimensionnel k_M et l'orientation du vecteur de polarisation dans le plan (1-2) θ_M . Pour toute perturbation, θ est l'angle par rapport à l'axe 1, et en conséquence $K_1 = \cos(\theta)$ et $K_2 = \sin(\theta)$. Le mode dominant de perturbation est caractérisé par :

$$\Lambda_M(k_M, \theta_M) : \quad \frac{\partial \Lambda}{\partial k} = 0, \quad \frac{\partial \Lambda}{\partial \theta} = 0 \quad (\text{III.30})$$

¹pour lequel le nombre d'onde k correspond à une valeur maximale de l'exposant de stabilité λ

La première équation donne le nombre d'onde adimensionnel dominant :

$$k_M = F(\bar{\sigma}_{\alpha\beta}, \theta_M), \quad (\text{III.31})$$

en terme de la contrainte effective et de l'angle θ , qui est déterminé par la deuxième condition dans (III.30) :

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial \theta} = \frac{\partial F}{\partial \theta}(F(\bar{\sigma}_{\alpha\beta}, \theta_M)) = \\ 2K_1 K_2 (\bar{\sigma}_{11}, \bar{\sigma}_{22}) \left[\begin{array}{cc} -1 - \nu K_2^2 + \nu(1 + 2\nu)K_1^2 & -\nu(1 + \nu)(K_1^2 - K_2^2) \\ -\nu(1 + \nu)(K_1^2 - K_2^2) & 1 + \nu K_1^2 - \nu(1 + 2\nu)K_2^2 \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \bar{\sigma}_{11} \\ \bar{\sigma}_{22} \end{array} \right\} = 0 \quad (\text{III.32})$$

avec deux solutions évidentes dues au premier terme en $K_1 K_2$:

$$\theta \equiv 0(\text{mod}\pi), \quad \theta \equiv \pi/2(\text{mod}\pi) \quad (\text{III.33})$$

La forme quadratique en $\{\bar{\sigma}_{11}, \bar{\sigma}_{22}\}$ pourrait également fournir d'autres solutions. Le déterminant de cette forme quadratique est $-(1 - \nu^2)^2$, un scalaire négatif, indépendant de θ . Ce résultat n'est pas inattendu puisqu'on est dans l'hypothèse d'isotropie de la surface : il n'y donc aucun état de contrainte qui fait que la forme quadratique fournit des solutions à l'équation III.32. Par conséquent, les deux solutions données en III.33 sont les seules.

L'étape suivante est de déterminer l'orientation du vecteur qui correspond au maximum de l'exposant de stabilité. Ce maximum est basé sur le signe de

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \theta^2}(\bar{\sigma}_{\alpha\beta}, \theta_M), \quad (\text{III.34})$$

et donc du signe de l'expression suivante :

$$(K_1^2 - K_2^2)(\bar{\sigma}_{11}, \bar{\sigma}_{22}) \left[\begin{array}{cc} -1 - \nu K_2^2 + \nu(1 + 2\nu)K_1^2 & -\nu(1 + \nu)(K_1^2 - K_2^2) \\ -\nu(1 + \nu)(K_1^2 - K_2^2) & 1 + \nu K_1^2 - \nu(1 + 2\nu)K_2^2 \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \bar{\sigma}_{11} \\ \bar{\sigma}_{22} \end{array} \right\} = 0 \quad (\text{III.35})$$

avec les deux valeurs de θ données en (III.33). Deux contributions déterminent ici le signe de cette expression. La première est due au premier terme ($K_1^2 - K_2^2$) qui est égal à 1 ou -1 pour θ égal à 0 ou $\pi/2$, respectivement. La deuxième est due à la forme quadratique. Elle devient :

$$-(1 + \nu)(\bar{\sigma}_{11} - \bar{\sigma}_{22})((\bar{\sigma}_{11} + \bar{\sigma}_{22}) - 2\nu\bar{\sigma}_{11}) \text{ pour } \theta = 0, \quad (\text{III.36})$$

et

$$-(1 + \nu)(\bar{\sigma}_{22} - \bar{\sigma}_{11})((\bar{\sigma}_{11} + \bar{\sigma}_{22}) - 2\nu\bar{\sigma}_{22}) \text{ pour } \theta = \pi/2. \quad (\text{III.37})$$

Le signe de ces expressions peut être discuté en fonction des contraintes principales. Si $\bar{\sigma}_{22}$ est la contrainte principale de compression majeure, alors l'expression III.37 est négative. Le

matériau considéré dans les expériences sur les instabilités étant fragile en tension, nous nous limiterons dans cette discussion aux états de contraintes de compression.

Le principal résultat est que l'instabilité dominante est donc une onde dont le front est perpendiculaire à la direction de la contrainte effective de compression maximale. Le nombre d'onde correspondant est $k_M = F(\sigma_{\alpha\beta})$ et le taux de croissance, $\Lambda_M = F^2$. Les conditions de stabilité neutre sont définies par $\Lambda_M = 0$ qui requiert que la fonction F , définie en III.29 soit également zéro². Ceci est possible, uniquement si le vecteur contrainte $(\bar{\sigma}_{11}, \bar{\sigma}_{22})$ est nul, correspondant à une condition de contrainte hydrostatique dans le solide : $\sigma_{11} = \sigma_{22} = -p$, égale à celle dans le fluide. Tout autre état de contrainte amènera à une instabilité de surface.

3. Application aux expérimentations de den Brok et Morel

Le critère de stabilité, obtenu pour un état de contrainte homogène, est maintenant appliqué en tant que critère local aux essais menés par den Brok et Morel, 2001 [9]. Nous reprendrons une description synthétique de ces travaux, avant de présenter les résultats d'un calcul élément fini que nous avons mené sur une plaque trouée, notamment l'état de contrainte homogène dans cette plaque.

3.1 Les essais de den Brok et Morel

Ces essais sont menés sur des monocristaux d'aluns ($K.al[So_4]_2 \cdot 12H_2O$), qui sont, selon les auteurs, élastiques-fragiles à température ambiante, et peuvent supporter une contrainte maximale de compression de $20MPa$. Ces cristaux sont réputés pour être hautement solubles. Ils sont plongés dans une solution sous-saturée (afin de déclencher de la dissolution), bien mélangée pour s'assurer que la concentration de soluté est bien uniforme dans tout le récipient. De dimension $4 \times 6 \times 10$ mm, chacune des plaques (au nombre de 2) est trouée sur sa face la plus large (6×10 mm), dans le but de créer un gradient en contrainte autour du trou, lors de la compression des cristaux dans la direction perpendiculaire à la plus petite face (4×10 mm). Un des deux échantillons est soumis à une contrainte de compression de l'ordre de quelques MPa , tandis que le second supporte une compression négligeable de l'ordre de $10^{-2}MPa$. Après dissolution, les deux échantillons présentent sur leurs faces libres (non contraintes) des rainures : fines et constituées tel un réseau anastomosé pour l'échantillon non contraint (avec des

²On remarquera que cette fonction vaut $(1 - \nu 2)\bar{\sigma}_{11}^2$ pour $\theta = 0$. Cette valeur est celle obtenue avec une analyse directe de stabilité 2D dans laquelle la contrainte de compression maximale est dans le plan de l'étude. C'est cette expression simplifiée que seara utilisée dans la section suivante, lors de l'analyse numérique.

longueurs d'onde de l'ordre du μm), plus marquées pour l'échantillon soumis à une contrainte de compression. Pour ce dernier, les rainures sont orientées perpendiculairement à la direction de la contrainte principale maximale ; les longueurs d'ondes sont de l'ordre de $20\mu m$, et diminuent lorsque la contrainte augmente. Ces marques disparaissent quelques heures après la décharge de l'échantillon, pour redevenir comme la structure anastomosée décrite plus haut. Cette réversibilité confirme que les observations ne sont pas dues à des structures de dislocations, mais à une énergie élastique (voir Chapitre I, paragraphe 3.2).

Les rainures décrites précédemment n'ont pas la forme de la fonction trigonométrique lisse utilisée dans la construction des modes normaux dans notre analyse de stabilité. Les régions de dissolution présentent une structure ressemblant à des ondes sinusoïdales, mais il n'y a pas de région de déposition rapide. Ceci est probablement dû à la différence entre les deux temps caractéristiques entre dissolution et précipitation (Lehner et Leroy, 2004 [41]). Cette différence ne peut être capturée par la loi cinétique linéaire, considérée dans notre analyse. Néanmoins, nous pouvons essayer de suivre les étapes de den Brok et Morel dans le paragraphe suivant, et utiliser le critère de stabilité linéaire précédent, en tant que condition locale – en supposant qu'en tout point, l'instabilité peut être analysée en considérant un demi-espace infini –, pour interpréter les observations expérimentales décrites ici.

3.2 Les prédictions d'instabilité

Les calculs éléments finis ont été faits sur un quart de la plaque pour des raisons de symétrie, en faisant l'hypothèse de contraintes planes, la pression de fluide étant négligée par rapport à la contrainte verticale due au chargement. La figure III.2 présente les isocontours de la contrainte verticale adimensionnelle σ_{22} , variant entre -0.66×10^{-3} et 1.1×10^{-4} . La contrainte nominale étant de -2.5×10^{-4} correspondant au $5MPa$ des essais. On constate sur cette figure que le long de l'axe horizontal de symétrie, la concentration de contrainte près du trou vaut trois fois la contrainte appliquée, et que le long de l'axe vertical de symétrie, elle vaut l'opposé de la contrainte appliquée, donc positive (résultats classiques pour une plaque élastique, voir par ex. Timoshenko [69]). On notera que cet état de contrainte n'est certainement pas représentatif de ce qui se passe dans la nature, dans le cas de l'étude du transfert en solution, dans quel cas il n'y a pas d'état de tension. Nous restreindrons donc notre analyse sur les états de contraintes en compression. La figure III.3 représente, sur cet état de contrainte σ_{22} , les directions des contraintes de compression maximale. Elles varient sur cette figure entre 0 et 95° . La partie supérieure de l'échantillon a un état de contrainte peut affecté par la présence du trou : la direction principale de la contrainte est verticale (90°). À gauche du trou, la direction principale est de 95° , c'est-à-dire légèrement inclinée vers le trou. Les isocontours varient autour du trou en réponse aux conditions de bords libres du trou.

La première comparaison entre notre prédiction et les observations de den Brok et Morel

concerne l'orientation des rainures (figure I.16, Chapitre I). La normale aux rayures est à peu près à 95° . La figure III.3 est cohérente avec ces observations, puisque la direction principale (dans laquelle est orientée le mode dominant d'instabilité) est de 95° , à gauche du trou. L'orientation change autour du trou, et vaut zéro sur la partie supérieure du trou, ce qui est cohérent avec les observations.

Par ailleurs, la longueur d'onde de l'instabilité, calculée pour une tension de surface $\gamma = 5 \times 10^{-2} Pa.m$ et un module d'Young E égal à 20 GPa, est représentée à la figure III.4, avec des valeurs variant entre 50 et 500 μm (malgré le fait que la longueur d'onde maximale calculée atteigne 7000 μm au-dessus du trou). Cet intervalle est choisi afin de mieux représenter la distribution à gauche du trou et de pouvoir comparer avec les observations expérimentales. On constate qu'on est dans le même ordre de grandeur de longueur d'onde (250 μm à gauche du trou) que celle observée expérimentalement. Les grandes longueurs d'ondes (7000 μm) au-dessus du trou, dues au faible régime de contrainte, ne sont cependant pas observées dans les essais, ni les petites (50 μm ou moins), qui se trouvent être près du trou, dans la région de contrainte de compression élevée.

Cette non-variation des longueurs d'ondes avec l'état de contrainte a été déjà discutée par den Brok et Morel, 2001. Le taux de croissance du mode dominant d'instabilité dépend pourtant de l'état de contrainte. La figure III.5 représente la distribution du taux de croissance adimensionnel sous forme d'isocontours variant entre 0 et 0.01×10^{-12} . Le choix de cette limite supérieure permet d'observer le gradient sur tout le domaine, même si en réalité, le taux de croissance atteint un maximum de 0.18×10^{-12} près du trou. La valeur exacte du taux de croissance importe peu, ce qui importe c'est sa variation relative sur la surface. Si on normalise le maximum à 1, on constate que vers la surface libre de l'échantillon, à gauche, le taux de croissance est de 3×10^{-3} . Une variation de trois ordres de grandeur ne peut passer inaperçue en laboratoire, et n'a pas été reportée par den Brok et Morel (2001). Il peut donc être conclu que l'évolution de la morphologie de la surface sur ces cristaux comprimés, est plus complexe que ce que décrit une analyse de stabilité linéaire.

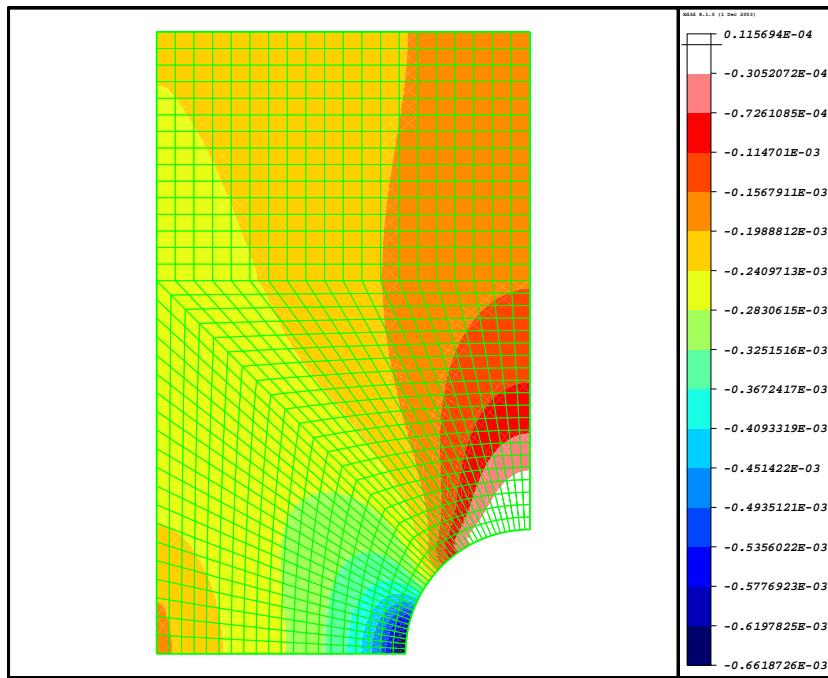


FIG. III.2 – Isocontours des contraintes verticales $\bar{\sigma}_{22}$, en adimensionnel.

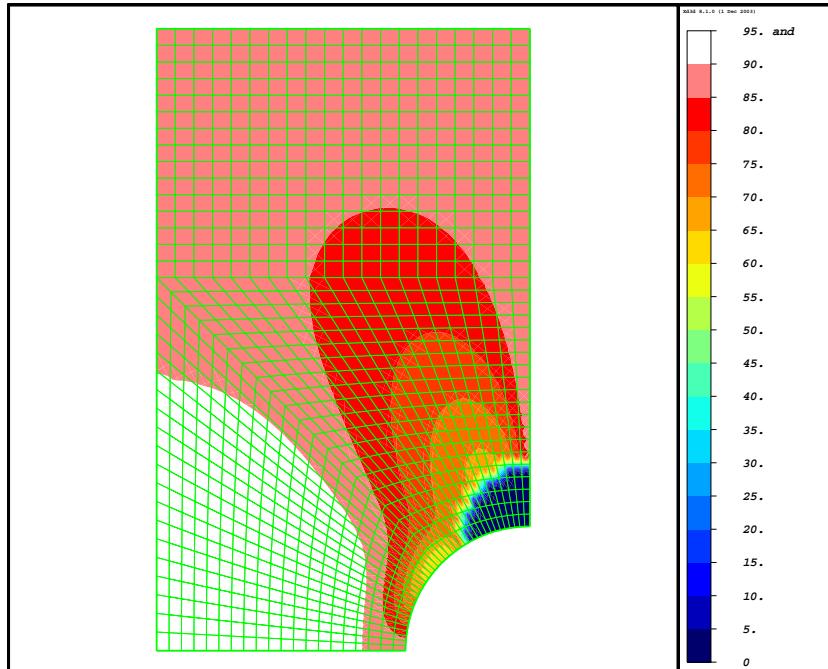


FIG. III.3 – Angle de la direction de la contrainte de compression maximale.

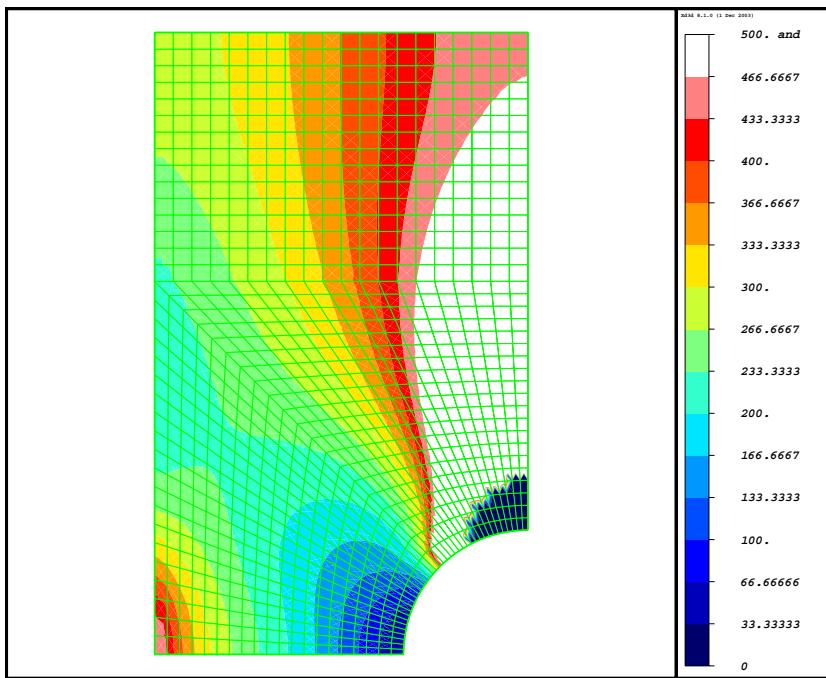


FIG. III.4 – Distribution des longueurs d'ondes sur la surface.

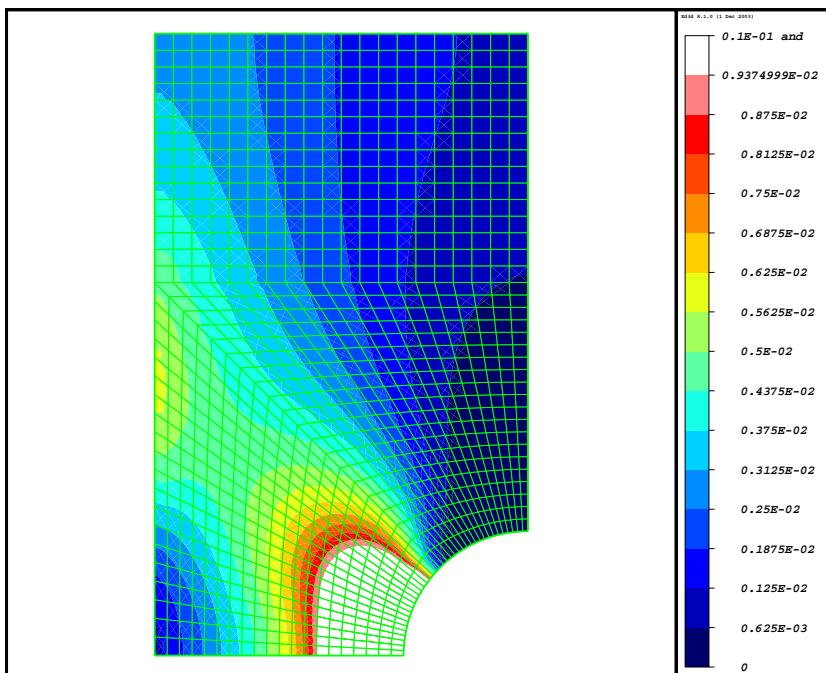


FIG. III.5 – Distribution du taux de croissance dominant $\Lambda \times 10^{12}$.

4. Conclusion

Le premier objectif de cette étude a été de démontrer que l'instabilité de la surface, prédicta par une analyse de linéaire 3D et une décomposition en modes normaux, aboutit à des modes dominants, dont le vecteur de polarisation est dirigé parallèlement à la contrainte de compression maximale. L'instabilité de la surface est ainsi un marqueur de l'état local de contrainte. Cette conclusion nous a amené à appliquer ce critère local de stabilité à l'interprétation des résultats expérimentaux de den Brok et Morel, 2001 [9]. Il a été montré que les rainures qu'ils ont observées sont orientées de la même façon que le mode dominant d'instabilité, malgré l'hypothèse d'une isotropie dans le plan, qui n'est certainement pas appropriée à un cristal. Malgré tout, les gradients des longueurs d'ondes, ainsi que le taux de croissance ne coïncident pas avec les observations. Ce qui suggère une évolution de la morphologie plus complexe, comme celle non-linéaire dans le temps.

Les effets de non-linéarité dans le temps ont été étudiés par J. Ghoussoub, 2000 [15], et Ghoussoub et Leroy, 2001 [16]. Les simulations numériques ont montré que les instabilités évoluent avec le temps, jusqu'à augmenter les concentrations de contraintes au fond des «creux» des rainures. L'analyse de stabilité linéaire peut alors prédire la longueur d'onde générale de la morphologie. Mais à une échelle sub-microscopique, chaque sillon peut aboutir au développement d'un puits dont la direction est perpendiculaire à la surface libre du cristal. Ces observations n'ont pas été reportées, même si le temps caractéristique du déclenchement d'une dissolution rapide et localisée peut être plus grand que la durée des essais. Les effets non-linéaires dans le temps ne sont donc pas les causes des non-conformités dont nous avons parlé précédemment, qui restent ouvertes à des interprétations. On espère que d'autres essais seront conduits pour mieux nous éclairer sur la physique de l'évolution de la morphologie de surface – avec si possible une pression de fluide de confinement pour assurer une contrainte de compression sur tout l'échantillon.

Conclusion générale et perspectives

Cette thèse fait partie d'une voie de recherche qui a pour but d'apporter une contribution à l'étude du transfert en solution en tant que mécanisme responsable de la compaction des roches sédimentaires. Elle traite notamment de la modélisation numérique de ce phénomène à l'échelle de l'agrégat de grains.

On a mis en oeuvre par la simulation numérique un modèle de compaction qui utilise une structure d'interface intergranulaire en îles et chenaux, lieu de dissolution et transport de matières vers le fluide des pores. Le modèle d'étude est constitué de deux grains en contact, modélisés par des sphères tronquées, qui sont soumis à une contrainte effective de compression. Chacun des deux grains, subit sur sa surface de contact une contrainte normale σ_n , qui est fonction des variables relatives à la dissolution et à la diffusion dans le joint de grain.

Un premier problème aux limites a été résolu, par la méthode analytique puis par la méthode des éléments finis. Il s'agit d'une sphère tronquée soumise à une densité de force sur sa surface de troncature, et à une pression de pore sur sa face «latérale». Ce calcul a montré l'existence d'une singularité en contrainte, au bord de la surface de chargement. La contrainte de cisaillement qui devrait être nulle partout à la surface, est différente de zéro au dernier point de cette surface (à la jonction entre la surface de contact et le pore). La valeur de la contrainte de cisaillement en ce point est du même ordre de grandeur que la force appliquée, et elle est négative ($-10^7 Pa$). Cette singularité est due aux conditions aux limites. La sphère tronquée étant chargée sur sa face supérieure par une densité de force qui est plus grande en intensité que la pression de pore, la condition de chargement est discontinue. Cette discontinuité est à l'origine de la singularité. La géométrie de la sphère tronquée induit donc une singularité en contrainte au bord de la surface de contact.

Dans ce calcul, les résultats obtenus par la méthode des éléments finis concordent avec les prédictions de l'approche analytique. Bien que l'utilisation des deux types d'éléments finis (quadrangulaires 9 noeuds, et triangulaires 6 noeuds) donne pour chaque cas de bons résultats, le maillage radial constitué d'éléments triangulaires reste tout de même le mieux adapté à notre problème. En effet, il permet de capturer la dépendance en θ (coordonnée polaire) de la distri-

bution des contraintes sur tout le solide. La discontinuité du champ de contrainte à la surface des éléments finis de continuité C^0 , induit une oscillation des contraintes calculées sur cette surface. Une discussion sur le lissage des contraintes obtenues par la méthode des éléments finis a abouti au choix d'une approximation des contraintes sur un seul point de Gauss de surface.

On étudie dans un deuxième temps, la compaction d'un agrégat de grain par transfert en solution. L'agrégat de grain est modélisé par un empilement périodique de sphères tronquées. On se base sur un modèle de transfert en solution à l'échelle du grain (Lehner, 1995 [39], Lehner et Leroy, 2004 [41]). Le modèle est amélioré en faisant une approximation sur l'énergie libre d'Helmholtz, qui entre en compte dans la force thermodynamique responsable du transfert en solution. Ce modèle «approché» est testé par l'intermédiaire d'un problème aux limites, résolu par la méthode des éléments finis, et dont la géométrie est constituée par un huitième de la sphère tronquée (pour des raisons de symétrie). Une expression de la contrainte normale intergranulaire, condition aux limites du problème, a été dérivée. Elle est fonction du taux de convergence des deux grains en contact, d'un terme d'énergie d'Helmholtz, et du gradient de concentration de soluté (contribution de la diffusion). Un algorithme explicite est proposé pour tester l'approximation qui consiste à négliger l'énergie d'Helmholtz. Le problème est résolu avec cette première approximation. On calcule l'énergie d'Helmholtz à partir des contraintes et déformations, solutions du problème, et on introduit cette valeur dans la condition aux limites pour la deuxième itération de calcul. Ce calcul a montré que la correction apportée par l'énergie d'Helmholtz est faible, et a ainsi validé le modèle approché.

La résolution de ce problème aux limites a permis également d'avoir la distribution de la contrainte normale. Celle-ci est parabolique, ce qui confirme les hypothèses avancées dans la littérature [56].

Dans ce problème, on a fait l'hypothèse d'un contact plat, pour assurer la périodicité de l'empilement des grains. Cette condition est incompatible avec les conditions de forces spécifiées sur ce contact. La surface de contact est donc «bombée» dans la configuration de référence (non chargée) et sa forme est inconnue. Une nouvelle configuration de référence, sur laquelle le contact est plat, a été introduite par une analyse de perturbation géométrique, et la détermination de σ et ϵ s'est faite à partir de cette configuration de référence connue. Le déplacement obtenu permet d'estimer la forme du contact dans la configuration de référence.

Après la validation de ce modèle approché, on a appliqué ce dernier à l'étude de la compaction d'un empilement de grains. La compaction est étudiée en fixant un taux de convergence des grains intial ($\dot{\lambda}$). Ce taux est déterminé par la loi de fluage. Pour une taille de grain et un facteur de raccourcissement donnés, on calcule $\dot{\lambda}$, puis on le fait varier à chaque pas de temps, à mesure que le facteur de raccourcissement du grain augmente. On constate qu'après un certain

laps de temps, le taux de convergence se stabilise. Ceci est un signe que la compaction s'arrête. Ce temps de stabilisation est plus grand lorsque la taille des grains est plus importante. Cette simulation a aussi permis d'étudier l'influence de la taille de grain et du taux de raccourcissement du grain (λ) sur la distribution de la contrainte normale intergranulaire. On constate que plus le grain est petit, moins la distribution de la contrainte normale est parabolique. On constate que le gradient de concentration de soluté dans le fluide intergranulaire est plus faible. Les résultats de cette simulation de la compaction sont cohérents avec les résultats des travaux d'observations antérieurs [32].

Le troisième chapitre de cette thèse, a consisté en une analyse de stabilité en 3D de la morphologie de l'interface solide/fluide. Les prédictions de cette analyse ont été comparées aux observations expérimentales de den Brok et Morel, 2001 [9]. Leurs essais sur un cristal cubique troué, subissant une compression uniaxiale et du transfert en solution sur ses faces libres, ont montré une modification de la morphologie de l'interface : des rayures parallèles aux trajectoires des contraintes autour du trou. Notre analyse de stabilité linéaire a permis de démontrer que la perturbation dominante a un vecteur de polarisation parallèle à la contrainte compressive maximale. La résolution par élément fini d'un problème de plaque troué soumise à une compression, permet de déterminer les directions des contraintes principales, et donc celles des modes dominants. Ces simulations ont montré que les modes dominants sont bien orientées de la même façon que les rainures observées par den Brok et Morel [9]. Les prédictions sont donc cohérentes avec les observations expérimentales.

À l'issue de ce travail, les points suivants apparaissent comme perspectives d'études. Ce travail peut être enrichi en considérant un système avec redéposition sur le contact solide/pore. Ensuite, il est intéressant de faire une étude plus fine sur le contact entre grains, notamment :

- Quelle géométrie du modèle de grain pourrait-on adopter, au point de jonction entre la surface de contact et le pore ? (On pourrait envisager un raccordement entre la surface plane du contact et l'arc de cercle de l'interface grain/pore, qui contribuerait à éviter la discontinuité de la géométrie.)
- Quelle est la dynamique de la structure en îles et chenaux ?

Par ailleurs, le passage entre les différentes échelles reste une voie de recherche à exploiter, notamment le passage entre l'échelle de l'interface solide/fluide dans le joint de grain et l'échelle du grain. Il serait également intéressant de se concentrer sur le passage vers l'échelle du bassin sédimentaire.

Au niveau expérimental, des essais pourraient être menés afin d'enrichir les observations concernant l'instabilité de surface due au transfert en solution.

DOUBLE LINÉARISATION

L'écriture des équations d'équilibre sur la nouvelle configuration de référence, appelée configuration de référence perturbée est possible grâce aux hypothèses de petites perturbations posées. On aura donc à passer de la configuration courante Ω_t à la configuration de référence Ω_0 , puis de la configuration de référence Ω_0 à la configuration de référence perturbée Ω_* . C'est pour cela que nous l'avons appelé la "double linéarisation".

L'équation d'équilibre s'écrit : sur la configuration de référence :

$$\int_{\Omega_t} \boldsymbol{\sigma} : \nabla^s \boldsymbol{\delta u} \, dV_t = \int_{\partial\Omega_t^{sf}} -\mathbf{n}^{sf} \cdot P_f \cdot \boldsymbol{\delta u} \, dS_t + \int_{\partial\Omega_t^I} \mathbf{n}^I \cdot F \cdot \boldsymbol{\delta u} \, dS_t \quad (\text{A.1})$$

où \mathbf{u} est champ de déplacement, inconnu du problème

$\boldsymbol{\delta u}$ est le champ de déplacement admissible virtuel

∇^s est la partie symétrique du gradient dans Ω_t

$$\nabla^s \boldsymbol{\delta u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} (\mathbf{grad} \boldsymbol{\delta u}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{grad} \boldsymbol{\delta u}(\mathbf{x}, t)^T)$$

\mathbf{grad} est le gradient dans Ω_t

a.

Double linéarisation de la puissance des efforts intérieurs : $\int_{\Omega_t} \boldsymbol{\sigma} : \nabla^s \boldsymbol{\delta u} \, dV_t$ sur Ω_t

- **Les gradients des transformations \mathbf{F}_p et \mathbf{F}_u** On rappelle :

$$\boldsymbol{\eta} \xrightarrow{\mathbf{F}_p} \mathbf{X} \quad ; \quad \mathbf{X} \xrightarrow{\mathbf{F}_u} \mathbf{x}$$

et :

$$\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X} \quad (\text{A.2})$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{X} - \boldsymbol{\eta} \quad (\text{A.3})$$

- Première transformation : de Ω_0 à Ω_t

$$\begin{aligned}
 \mathbf{grad}\delta\boldsymbol{u}(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{F}_u^{-1} \cdot \nabla_0 \delta\boldsymbol{u}(\mathbf{X}, t) \\
 &= (\mathbb{I} - \nabla\boldsymbol{u}(\mathbf{X}, t)) \nabla_0 \delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\eta}, t) \\
 &\simeq \nabla_0 \delta\boldsymbol{u}(\mathbf{X}, t) \quad (\text{au premier ordre})
 \end{aligned} \tag{A.4}$$

avec ∇_0 :gradient sur Ω_0 .

- Deuxième transformation : de Ω_* à Ω_0

$$\begin{aligned}
 \nabla_0 \delta\boldsymbol{u}(\mathbf{X}, t) &= \mathbf{F}_p^{-1} \cdot \nabla_* \delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\eta}, t) \\
 &= (\mathbb{I} - \nabla\boldsymbol{p}(\boldsymbol{\eta}, t)) \nabla_* \delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\eta}, t) \\
 &\simeq \nabla_* \delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\eta}, t) \quad (\text{au premier ordre})
 \end{aligned} \tag{A.5}$$

avec ∇_* :gradient sur Ω_* .

- La partie symétrique du gradient s'écrit donc sur Ω_0 et ensuite Ω_* :

$$\begin{aligned}
 \nabla^s \delta\boldsymbol{u}(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{2} (\mathbf{grad}\delta\boldsymbol{u}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{grad}\delta\boldsymbol{u}(\mathbf{x}, t)^T) \\
 &\simeq \frac{1}{2} (\nabla_0 \delta\boldsymbol{u}(\mathbf{X}, t) + \nabla_0 \delta\boldsymbol{u}(\mathbf{X}, t)^T) = \nabla_0^s \delta\boldsymbol{u}(\mathbf{X}, t) \\
 \text{aussi } &\simeq \frac{1}{2} (\nabla_* \delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\eta}, t) + \nabla_* \delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\eta}, t)^T) = \nabla_*^s \delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\eta}, t)
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

• L'intégrale de volume

- Première transformation : de Ω_0 à Ω_t

$$\int_{\Omega_t} \underline{\underline{\sigma}} : \nabla^s \delta\boldsymbol{u} dV_t = \int_{\Omega_0} \underline{\underline{\sigma}} : \nabla_0^s \delta\boldsymbol{u} J(\mathbf{X}, t) dV_0 \tag{A.7}$$

Or

$$\begin{aligned}
 J(\mathbf{X}, t) &= \det \mathbf{F}_u = \det(\mathbb{I} + \nabla\boldsymbol{u}(\mathbf{X}, t)) \\
 &\simeq 1 + \text{tr} \nabla\boldsymbol{u}(\mathbf{X}, t) \quad (\text{au premier ordre})
 \end{aligned}$$

Il vient :

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega_t} \underline{\underline{\sigma}} : \nabla^s \delta\boldsymbol{u} dV_t &= \int_{\Omega_0} \underline{\underline{\sigma}} : \nabla_0^s \delta\boldsymbol{u} (1 + \text{tr} \nabla\boldsymbol{u}(\mathbf{X}, t)) dV_0 \\
 &\simeq \int_{\Omega_0} \underline{\underline{\sigma}} : \nabla_0^s \delta\boldsymbol{u} dV_0 \quad (\text{au premier ordre})
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

- Deuxième transformation : de Ω_0 à Ω_*

Le même raisonnement avec

$$J(\boldsymbol{\eta}, t) = \det \mathbf{F}_p \simeq 1 + \text{tr} \boldsymbol{\nabla}_p(\boldsymbol{\eta}, t) \quad (\text{au premier ordre})$$

conduit à

$$\int_{\Omega_0} \underline{\underline{\underline{\sigma}}} : \boldsymbol{\nabla}_0^s \delta \mathbf{u} \, dV_0 = \int_{\Omega_*} \underline{\underline{\underline{\sigma}}} : \boldsymbol{\nabla}_* \delta \mathbf{u} \, dV_* \quad (\text{A.9})$$

b.

Double linéarisation de la puissance des efforts extérieurs (Conditions aux limites)

$$\text{sur } \partial\Omega_t \int_{\partial\Omega_t^{sf}} -\mathbf{n}^{sf} \cdot P_f \cdot \delta \mathbf{u} \, dS + \int_{\partial\Omega_t^I} \mathbf{n}^I \cdot F \cdot \delta \mathbf{u} \, dS$$

- Transformation entre Ω_t et Ω_0 :

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \delta \mathbf{u}(\Phi(\mathbf{X}, t)) \simeq \delta \mathbf{u}(\mathbf{X}, t) \quad (\text{A.10})$$

$$\mathbf{n}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{n}(\Phi(\mathbf{X}, t)) \simeq \mathbf{n}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{N}(\mathbf{X}, t) \quad (\text{A.11})$$

de par l'hypothèse des petites perturbations.

- Transformation entre Ω_0 et Ω_* :

Le même raisonnement aboutit à :

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{X}, t) \simeq \delta \mathbf{u}(\boldsymbol{\eta}, t) \quad (\text{A.12})$$

$$\mathbf{N}(\mathbf{X}, t) \simeq \mathbf{N}(\boldsymbol{\eta}, t) \quad (\text{A.13})$$

- Finalement après les deux linéarisations, on aboutit pour la puissance des efforts extérieurs qui s'écrit :

$$\begin{aligned} & \int_{\partial\Omega_t^{sf}} -\mathbf{n}^{sf} \cdot P_f \cdot \delta \mathbf{u} \, dS + \int_{\partial\Omega_t^I} \mathbf{n}^I \cdot F \cdot \delta \mathbf{u} \, dS = \\ & \int_{\partial\Omega_*^{sf}} -\mathbf{n}_*^{sf} \cdot P_f \cdot \delta \mathbf{u} \, dS_* + \int_{\partial\Omega_*^I} \mathbf{n}_*^I \cdot F \cdot \delta \mathbf{u} \, dS_* \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

c.

Le principe des travaux virtuels s'écrit finalement sur la configuration de référence perturbée, après deux linéarisations :

$$\int_{\Omega_*} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\nabla}_*^s \delta \mathbf{u} \, dV_* = \int_{\partial\Omega_*^{sf}} -\mathbf{n}_*^{sf} \cdot P_f \cdot \delta \mathbf{u} \, dS_* + \int_{\partial\Omega_*^I} \mathbf{n}_*^I \cdot F \cdot \underline{\delta \mathbf{u}} \, dS_* \quad (\text{A.15})$$

LES MÉTHODES DE LISSAGE DES CONTRAINTES OBTENUES PAR LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS

Du fait de à la discontinuité des dérivées des fonctions de forme sur les interfaces des éléments de continuité C⁰, le champ de contrainte élément fini est discontinu. Ces discontinuités constituent des erreurs qui se traduisent par des oscillations autour de la solution exacte. La solution serait de construire un champ de contrainte lissé à partir des contraintes données par la méthode des éléments finis.

Les méthodes de lissage :

Elles peuvent être globales (la recherche des contraintes lissées se fait une fois pour toute sur tout le domaine) ou locales (la recherche des contraintes lissées se fait sur chaque élément individuellement). Les contraintes lissées sont obtenues en minimisant au sens des moindres carrés la distance entre le champ lissé (continu) et le champ solution éléments finis. Le principe est de minimiser la fonctionnelle :

$$\chi = \iint (\sigma - g)^2 dx dy$$

où $g(x, y)$ est la contrainte lissée $g(x, y) = a_{00} + a_{10}x + a_{01}y + a_{11}xy + a_{20}x^2 + \dots$

σ est la contrainte non lissée, solution élément fini

Il faut donc résoudre l'équation $\frac{\partial \chi}{\partial a_{ij}} = 0$. La résolution de cette équation se fait par une discrétisation en éléments finis (une deuxième, après celle qui a permis de trouver σ). Les inconnues sont les contraintes lissées aux nœuds $\tilde{\sigma}_i$ et g devient sur le domaine de calcul :

$$g(\xi, \eta) = \sum_{i=1,n} \tilde{N}_i \tilde{\sigma}_i$$

pour tout point (ξ, η) à l'intérieur d'un élément, où \tilde{N}_i sont les fonctions de forme de lissage au nœud i (différentes des fonctions de forme N_i de l'approximation élément fini du problème) et

n le nombre de noeuds par élément.

Le problème revient à minimiser la fonctionnelle :

$$\chi = \sum_{j=1,ne} \iint (\sigma(\xi, \eta) - g(\xi, \eta))^2 \det(\mathbf{J}) d\xi d\eta$$

où ne est le nombre total d'élément

$$\frac{\partial \chi}{\partial \tilde{\sigma}_i} = 0$$

Dans la méthode globale, les matrices élémentaires $[S]^e$ et le vecteur élémentaire $\{F\}^e$ de lissage résultant de la forme matricielle de l'équation, sont assemblés avant la résolution du système d'équation. Ensuite on résoud de la façon usuelle pour avoir $\tilde{\sigma}_1, \tilde{\sigma}_2 \dots \tilde{\sigma}_p$ les contraintes lissées à tous les noeuds du domaine.

Pour la méthode locale, au lieu de résoudre l'équation sur tout le domaine élément fini pour avoir les inconnues $\tilde{\sigma}_1, \tilde{\sigma}_2 \dots \tilde{\sigma}_p$ sur tous les noeuds du domaine, on l'écrit et résoud sur chaque élément : $[S]^e \{\tilde{\sigma}\} = \{F\}^e$

Si on utilise une intégration numérique, les intégrales contenues dans les matrices et les vecteurs élémentaires sont évaluées aux points de Gauss de l'élément. Les contraintes lissées aux noeuds de l'élément sont obtenues en fonction des contraintes solutions EF aux points de Gauss de l'élément.

On a donc aux noeuds partagés par plusieurs éléments, plusieurs valeurs de contraintes. Une moyenne des contributions de chaque élément connecté au noeud est donc calculée.

ÉLÉMENT DE CALCUL DE L'APPROXIMATION DE LA FORCE THERMODYNAMIQUE

Expression du taux de raccourcissement en fonction des termes moyennés sur la surface

En fonction des termes moyens, l'équation II.30 s'écrit :

$$\dot{\lambda}d = -K^{gb} \times \frac{\rho^s \Omega^s}{kT} [\bar{\mu}_n^s - \bar{\mu}] \quad (\text{C.1})$$

De même, l'équation (II.26) donne :

$$\dot{\lambda}d = (8\rho^f \delta D^{gb} C_{eq}) \times \frac{\rho^s \Omega^s}{kT} [\bar{\mu} - \mu(a)] \quad (\text{C.2})$$

En faisant rentrer les deux temps caractéristiques introduits dans le paragraphe 3.2 on obtient :

$$\dot{\lambda}d = -\rho^s \frac{d}{\tau_S} \times \frac{\rho^s \Omega^s}{kT} [\bar{\mu}_n^s - \bar{\mu}] \quad (\text{C.3})$$

et

$$\dot{\lambda}d = \frac{d^3 \rho^s}{4a^2 \tau_D} \times \frac{\rho^s \Omega^s}{kT} [\bar{\mu} - \mu(a)] \quad (\text{C.4})$$

Ce qui donne :

$$[\bar{\mu}_n^s - \bar{\mu}] = \frac{\dot{\lambda}d}{-\rho^s \frac{d}{\tau_S} \times \frac{\rho^s \Omega^s}{kT}} \quad (\text{C.5})$$

et

$$[\bar{\mu} - \mu(a)] = \frac{\dot{\lambda}d}{\frac{d^3 \rho^s}{4a^2 \tau_D} \times \frac{\rho^s \Omega^s}{kT}} \quad (\text{C.6})$$

En combinant les deux équations précédentes, on obtient la force thermodynamique totale

(dissolution+diffusion) :

$$\begin{aligned}
 [\bar{\mu}_n^s - \bar{\mu}] + [\bar{\mu} - \mu(a)] &= \dot{\lambda} d \times \frac{kT}{\rho^s \Omega_s} \left[\frac{1}{\frac{\rho^s d}{\tau_S}} + \frac{1}{\frac{d^3 \rho^s}{4a^2 \tau_D}} \right] \\
 &= \dot{\lambda} \frac{kT}{\rho^s \Omega_s} \left[\tau_S + \frac{4a^2}{d^2} \tau_D \right] \\
 &= [\bar{\mu}_n^s - \mu(a)]
 \end{aligned} \tag{C.7}$$

Si on remplace $[\bar{\mu}_n^s - \mu(a)]$ du dernier membre par l'expression suivante :

$$[\bar{\mu}_n^s - \mu_0] - [\mu(a) - \mu_0] = \left[(\bar{f}^s - f_0^s) + \left(\frac{1}{\rho^s} - \frac{1}{\rho_0^s} \right) p - \frac{1}{\rho^s} (\bar{\sigma}_n + p) \right] - \left[\frac{kT}{\rho^s \Omega_s} \frac{C(a) - C_0}{C_0} \right] \tag{C.8}$$

on obtient, en combinant les deux dernières équations et en introduisant la densité d'énergie $\psi^s = \rho^s f^s$:

$$\dot{\lambda} = \frac{-1}{4(a^2/d^2)\tau_D + \tau_S} \left\{ \frac{\bar{\psi}^s - \psi_0^s - \bar{\sigma}_n - p}{kT/\Omega^s} - \frac{C(a) - C_0}{C_0} \right\} \tag{C.9}$$

CONTRAINTE MACROSCOPIQUE - MOYENNAGE DES CONTRAINTES

Pour établir le lien entre le transfert en solution à l'échelle de l'interface grain-grain et la compaction d'un agrégat par transfert en solution, on cherche une relation entre les variables à l'échelle microscopique, l'échelle à laquelle on a travaillé dans les problèmes aux limites précédent, et les variables macroscopiques. Cette relation est obtenue par une méthode de moyennage de contraintes, dont les grandes lignes sont évoquées dans Lehner et Leroy, 2004 [41] nécessitant la considération de la cellule unitaire de la figure D.1. On détermine donc une expression entre la contrainte macroscopique et la contrainte intergranulaire dépendant des variables microscopiques.

La contrainte macroscopique totale notée $\langle \sigma \rangle$ est la somme des contraintes macroscopiques partielles ou “contraintes moyennes” dans chaque phase :

$$\langle \sigma \rangle = \langle \sigma_{ij} \rangle_s + \langle \sigma_{ij} \rangle_f \quad (\text{D.1})$$

avec

$$\langle \sigma \rangle_\alpha = \frac{1}{V} \int_{V_\alpha} \sigma_{ij} dv \quad (\text{D.2})$$

où $\alpha = s$ ou f et $V = V_s + V_f$ le volume d'une cellule unitaire..

Les contraintes macroscopiques partielles ou contraintes moyennes pour chaque phase sont déterminées dans cette annexe.

– pour le fluide :

puisque la pression de fluide est constante dans le pore, on a :

$$\langle \sigma_{ij} \rangle_f = \frac{1}{V} \int_{V_f} -p_f \delta_{ij} dv = -p_f \delta_{ij} \Phi$$

où Φ est la porosité de l'aggrégat, $\Phi = V_f/V$.

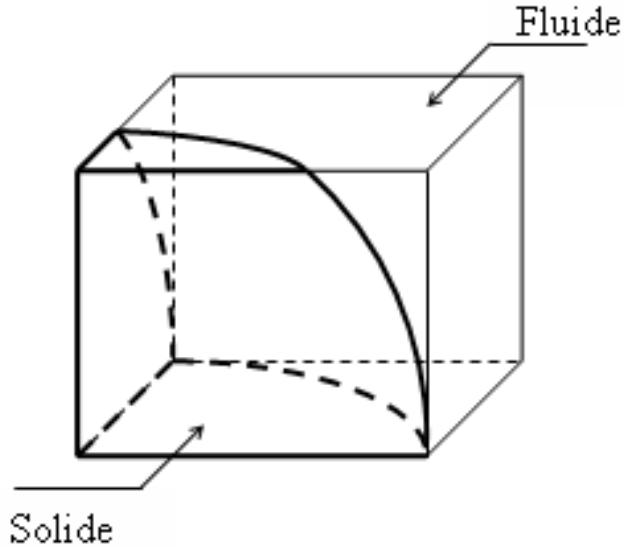


FIG. D.1 – La cellule unitaire

– pour le solide :

On sait que

$$(\sigma_{ij}x_k)_{,j} = \sigma_{ij,j}x_k + \sigma_{ij}\delta_{ij}$$

et comme, à l'équilibre on a $\sigma_{ij,j} = 0$, on obtient :

$$(\sigma_{ij}x_k)_{,j} = \sigma_{ik}$$

Alors, en utilisant la symétrie du tenseur σ ,

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_{ik}x_j + \sigma_{jk}x_i)_{,k}$$

et

$$\int_{V_s} \sigma_{ij} dv = \int_{V_s} \frac{1}{2}(\sigma_{ik}x_j + \sigma_{jk}x_i)_{,k} dv$$

En appliquant le théorème de la divergence (transformant l'intégrale de volume en intégrale de surface), on a :

$$\int_{V_s} \sigma_{ij} dv = \int_{\partial V_s} \frac{1}{2}(\sigma_{ik}x_j + \sigma_{jk}x_i)n_k dv$$

Et comme le tenseur de contrainte est symétrique, on a

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{V} \int_{\partial V_s} \sigma_{ik}x_j n_k dS$$

avec $\partial V_s = \partial\Omega^{sf} \cup \partial\Omega^I$, n_k une composante de la normale à ∂V_s et x_j une composante d'un vecteur position dans un repère cartésien fixe.

Sur l'interface solide/fluide $\partial\Omega^{sf}$, la contrainte est due à la pression de fluide (normale à la surface), tandis que sur l'interface entre les deux grains $\partial\Omega^I$, on a la contrainte normale à l'interface σ_n . En écrivant l'intégrale sur chaque interface, et en rajoutant et en soustrayant un même terme fonction de p_f , on obtient :

$$\begin{aligned} V < \sigma_{ij} >_s &= \int_{\partial\Omega^I} (x_j n_i^I)_S \sigma_n dS + \int_{\partial\Omega_{sf}} -p_f (n_i x_j)_S dS \\ &\quad + \int_{\partial\Omega^I} -p_f (n_i x_j) dS - \int_{\partial\Omega^I} -p_f (n_i x_j) dS \\ ()_S &= \text{partie symétrique} \end{aligned}$$

En combinant :

$$V < \sigma_{ij} >_s = \int_{\partial\Omega^I} (x_j n_i^I)_S (\sigma_n + p_f) dS + \int_{\partial V_s} -p_f ((n_i x_j)) dS$$

et en appliquant le théorème de la divergence au deuxième terme du second membre, on a :

$$V < \sigma_{ij} >_s = \int_{\partial\Omega^I} (x_j n_i)_S (\sigma_n + p_f) dS - p_f \delta_{ij} V_s$$

Etant donné la porosité Φ donnée par $\Phi = V_f/V$, on a finalement :

$$< \sigma_{ij} >_s = \frac{1}{V} \int_{\partial\Omega^I} (x_j n_i^I)_S (\sigma_n + p_f) dS - (1 - \Phi) p_f \delta_{ij}$$

La contrainte macroscopique totale est la somme de contraintes partielles déterminées précédemment :

$$< \sigma > = < \sigma_{ij} >_s + < \sigma_{ij} >_f$$

On a donc au final :

$$< \sigma > = -p_f \delta_{ij} + \frac{1}{V} \int_{\partial\Omega^I} (x_j n_i^I)_S (\sigma_n + p_f) dS$$

La direction principale de la contrainte macroscopique est perpendiculaire à l'interface intergranulaire. On peut donner la relation précédente en fonction des contraintes principales, puisque les seules composantes non-nulles de la contrainte sont les composantes normales (hypothèse de l'interface plane).

$$< \sigma > = -p_f + \frac{1}{V} \int_{\partial\Omega^I} (x_I n^I)_S (\sigma_n + p_f) dS$$

où x_I est le vecteur position dans le repère cartésien, n^I , la normale à l'interface grain-grain.

L'indice I fait référence à l'axe perpendiculaire à l'interface (dans notre cas 2 ou y).

On établit la relation entre ($\langle \sigma \rangle + p_f$) et ($\sigma_n + p_f$) dans le cas de la cellule unitaire que nous considérons.

Pour une sphère tronquée, si on a un arrangement régulier dont les centres des sphères se trouvent sur les axes orthogonaux, le volume est un parallélépipède avec une base rectangulaire de dimension $d \times d$ et une hauteur λd . Le volume d'un quart de grain est :

$$V = \lambda \frac{d^3}{4}$$

Dans l'intégrale, l'aire élémentaire est circulaire, et pour un quart de grain, θ varie de 0 à π , on a :

Alors,

$$\langle \sigma \rangle = -p_f + \frac{2\pi}{d^2} \int_0^a (\sigma_n + p_f) r dr \quad (\text{D.3})$$

avec

$$a = \frac{d}{2} \sqrt{1 - \lambda^2}$$

En explicitant l'intégrale on a :

$$\langle \sigma \rangle + p_f = \frac{\pi a^2}{d^2} (\sigma_n + p_f) \quad (\text{D.4})$$

LES VECTEURS DE GALERKIN

Cette annexe présente la formulation des conditions d'équilibre dans le volume et des conditions aux limites (sur l'interface) avec les vecteurs de Galerkin. Une expression connue du déplacement en fonction du vecteur de Galerkin \mathbf{F} s'écrit (Fung, 1965 [12]) :

$$2Gu_i = 2(1 - \nu)F_{i,jj} - F_{j,ji} \quad (\text{E.1})$$

La formulation des contraintes avec les vecteurs de Galerkin dérive de cette équation, en appliquant les relations entre déplacement, déformation et contrainte en élasticité, pour aboutir à :

$$\sigma_{ij} = \left[\delta_{ij}\nu\nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \right] F_{k,k} + (1 - \nu)\nabla^2(F_{i,j} + F_{j,i}), \quad (\text{E.2})$$

où ∇^2 est l'opérateur Laplacien. L'équilibre est satisfait si (en négligeant les effets de gravité) :

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad (\text{E.3})$$

$$\begin{aligned} \sigma_{ij,j} &= \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \nu \nabla^2 - \frac{\partial^3}{\partial x_i \partial x_j \partial x_j} \right] F_{k,k} + (1 - \nu)\nabla^2(F_{i,jj} + F_{j,ij}) \\ &= \nabla^2 F_{j,ji} - \nabla^2 \frac{\partial}{\partial x_i} F_{k,k} + (1 - \nu)\nabla^2 F_{i,jj} \\ &= (1 - \nu)\nabla^4 F_i \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

où ∇^4 est le bi-Laplacien ($\nabla^2 \nabla^2$). La vérification de (E.3) implique celle de (E.4) :

$$\nabla^4 F_i = 0 \quad (\text{E.5})$$

La solution de (E.5) peut être de la forme suivante :

$$F_i = (A_i + B_i x_3 k) \psi(\mathbf{x}), \quad (\text{E.6})$$

où A_i et B_i sont deux constantes et ψ est une fonction inconnue du vecteur position. Ceci implique que pour vérifier la condition d'équilibre, ψ doit vérifier

$$\nabla^2\psi = 0 \quad (\text{E.7})$$

On peut suggérer comme solution de cette dernière équation la fonction :

$$\psi(\mathbf{x}) = \exp(\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{x}) \text{ avec } \boldsymbol{\omega} = (ik_1, ik_2, k), \quad (\text{E.8})$$

pour s'assurer que ψ tend vers 0 lorsque x_3 tend vers $-\infty$.

Le problème d'équilibre est donc réduit à la détermination de trois paires de scalaires (A_i, B_i) à partir des conditions aux limites à l'interface solide-fluide.

Dans le cas étudié par Fung [12] (p.195), ces conditions aux limites sont que les composantes tangentielles du vecteur de traction ($\sigma_{\alpha 3}$) sont nulles. Seule la composante σ_{33} ne l'est pas.

$$\begin{aligned} 0 = \sigma_{\alpha 3} &= -ik_\alpha k^2 [2\nu B_3 + A_3] \psi(x_1, x_2, 0), \\ \sigma_{33} &= k_3 [(1 - 2\nu)B_3 - A_3] \psi(x_1, x_2, 0), \end{aligned} \quad (\text{E.9})$$

Le vecteur F_3 est donc le seul considéré. Les solutions sont dans ce cas :

$$\begin{aligned} A_3 &= 2\nu B_3, \\ \sigma_{33} &= k_3 B_3 \psi(x_1, x_2, 0), \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

Dans notre cas, pour prendre en compte le cisaillement induit par la tension de surface, on modifie la solution de Fung en superposant la contribution de deux vecteurs de Galerkin F_α (du même type qu'en E.6) qui obéissent aux conditions aux limites suivantes :

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha 3} &= [kk_\alpha k_\beta (A_\beta + B_\beta) + (1 - \nu)2B_\alpha k_3] \psi(x_1, x_2, 0) \\ 0 = \sigma_{33} &= -ik_\beta k_2 [(1 - \nu)2B_\beta + A_\beta] \psi(x_1, x_2, 0) \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

La résolution de ce système d'équations donne

$$A_\beta = -2B_\beta(1 - \nu) \quad (\text{E.12})$$

et

$$B_\beta = \frac{1}{2k^5(1 - \nu)} [2(1 - \nu)\delta_{\alpha\beta}k^2 + (1 - 2\nu)(k_\alpha k_\beta - k^2\delta_{\alpha\beta})] \sigma_{\alpha 3}. \quad (\text{E.13})$$

En superposant les trois vecteurs de Galerkin du type (E.6) avec les scalaires définis en (E.10), (E.12) and (E.13), on obtient un champ de contrainte en 3D qui satisfait l'équilibre dans le volume et toute condition aux limites de contrainte à l'interface solide-fluide. Pour l'analyse de stabilité nous avons besoin de σ_{11} and σ_{22} , calculés à partir de (E.2) :

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= \sigma_{33}(2\nu + (1 - 2\nu)K_1^2) + 2iK_2\sigma_{13} + 2i\nu K_2^2 K_\alpha \sigma_{3\alpha}, \\ \sigma_{22} &= \sigma_{33}(2\nu + (1 - 2\nu)K_2^2) + 2iK_2\sigma_{23} + 2i\nu K_1^2 K_\alpha \sigma_{3\alpha}, \end{aligned} \quad (\text{E.14})$$

où K_α remplace k_α/k .

Bibliographie

- [1] N. Alcantar, J. Israelachvili, and J. Boles. Forces and ionic transport between mica surfaces : Implications for pressure solution. *Geochemica et Cosmochimica Acta*, 67(7) :1289–1304, 2003.
- [2] R. Aris. *Vectors, Tensors, and the basic Equations of Fluid Mechanics*. Dover Publications, New-York, 1989.
- [3] J. Barlow. Optimal stress locations in finite element models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 10 :243–251, 1976.
- [4] R.C.G. Bathrust. Diagenetic fabric in some British Dinantian limestones. *Liverpool and Manchester Geology*, 2 :11–36, 1958.
- [5] R.M. Bowen and J.C. Wiese. Diffusion in mixtures of elastic materials. *International Journal of Engineering Science*, 7 :689–722, 1969.
- [6] J.S. Chester, S.C. Lenz, F.M. Chester, and R.A. Lang. Mechanisms of compaction of quartz sand at diagenetic conditions. *Earth and Planetary Science Letters*, 220 :435–451, 2004.
- [7] C.-H. Chiu and H. Gao. Stress singularities along a cycloid rough surface. *International Journal of Solids and Structures*, 30(21) :2983–3012, 1993.
- [8] R.L. Coble. A model for boundary diffusion controlled creep in polycrystalline materials. *Journal of Applied Physics*, 34 :1679–1682, 1963.
- [9] S.W.J. den Brok and J. Morel. The effect of elastic strain on the microstructure of free surfaces of stressed minerals in contact with an aqueous solution. *Geophysical Research Letters*, 28(4) :603–606, 2001.
- [10] G. Dhatt and G. Touzot. *Une présentation de la méthode des éléments finis*, 2ème édition. Éditions Maloine, Paris, 1984.

- [11] E.Gundersen, F. Renard, D.K. Dysthe, K. Bjorlykke, and B. Jamtveit. Coupling between pressure solution creep and diffusive mass transport in porous rocks. *J. Geophys. Res.*, 107 :1–19, 2002.
- [12] Y.C. Fung. *Foundations of solid mechanics*. Prentice Hall, Inc., New Jersey, 1965.
- [13] H. Gao. A boundary perturbation analysis for elastic inclusions and interfaces. *International Journal of Solids and Structures*, 28(6) :703–725, 1991.
- [14] H. Gao. Stress analysis of holes in anisotropic elastic solids : conformal mapping and boundary perturbation. *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, 45 :149–168, 1992.
- [15] J. Ghoussoub. *Modélisation du mécanisme de déformation, transfert en solution, à l'échelle du joint de grain*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 2000.
- [16] J. Ghoussoub and Y.M. Leroy. Solid-fluid phase transformation within grain boundaries during compaction by pressure solution. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49 :2385–2430, 2001.
- [17] J.W. Gibbs. On the equilibrium of heterogeneous substances. In *The scientific Papers of J. Willard Gibbs*. Vol 1. Dover Publications, New York, 1961.
- [18] J.-P Gratier. Experimental pressure solution of halite by an indenter technique. *Geophysical Research Letters*, 20(15) :1647–1650, 1993a.
- [19] J.-P. Gratier. Le fluage des roches par dissolution-cristallisation sous contrainte dans la croûte supérieure. *Bulletin de la Société Géologique de France*, 164(2) :267–287, 1993b.
- [20] J.-P. Gratier, F. Renard, and P. Labaume. How pressure solution creep and fracturing processes interact in the upper crust to make it behave in both a brittle and viscous manner. *Journal of Structural Geology*, 21 :1189–1197, 1991.
- [21] J.P. Gratier and R. Guiguet. Experimental pressure solution deposition on quartz grain : the crucial effect of the nature of the fluid. *Journal of Structural Geology*, 8 :189–200, 1986.
- [22] J.P. Gratier, L. Jenatton, D. Tisserand, and R. Guiguet. Indenter studies of the swelling, creep and pressure solution of pure argillite. *Applied Clay Science*, 26 :459–472, 2004.
- [23] A.J. Gratz. Solution-transfer compaction of quartzites : Progress toward a rate law. *Geology*, 19 :901–904, 1991.
- [24] S.R. De Groot and P. Mazur. *Non-equilibrium Thermodynamics*. Dover Publications, New-York, 1984.
- [25] J. Guerrigues. *La méthode des éléments finis*. École Supérieure de Mécanique de Marseille, 2002.

- [26] W. He, A. Hajash, and D. Sparks. Creep compaction of quartz aggregates : effects of pore-fluid flow – combined experimental and theoretical studies. *American Journal of Sciences*, 303 :73–93, 2003.
- [27] W.K. Heidug and Y.M. Leroy. Geometrical evolution of stressed and curved solid-fluid phase boundary.transformation kinetics. *Journal of Geophysical Research*, 99(B1) :505–515, 1994.
- [28] R. Hellmann, P.J.N. Renders, J-P. Gratier, and R. Guiguet. Experimental pressure solution compaction of chalk in aqueous solutions. Part 1. Deformation behavior and chemistry. In Roland Hellmann and Scott A. Wood, editors, *Walter-Rock Interactions, Ore deposits, and Environmental Geochemistry : A tribute to David A. Crerar*, pages 129–152. The Geochemical Society, Amsterdam, 2002.
- [29] E. Hinton and J. S. Campbell. Local and global smoothing of discontinuous finite element functions using a least-squares method. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 8 :461–480, 1974.
- [30] D.W. Houseknecht. Influence of grain size and temperature on intergranular pressure solution, quartz cementation, and porosity in a quartzose sandstone. *Journal of Sedimentary Petrology*, 54(2) :0348–0361, 1984.
- [31] D.W. Houseknecht. Assessing the relative importance of compaction processes and cementation to reduction of porosity in sandstones. *The American Association of Petroleum Geologists Bulletin*, 71 :633–642, 1987.
- [32] D.W. Houseknecht. Intergranular pressure solution in four quartzose sandstones. *Journal of Sedimentary Petrology*, 58(2) :228–246, 1988.
- [33] T.J. Hugues. *The finite element method - Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. Prentice Hall, Inc., New Jersey, 1987.
- [34] D. Koehn, J. Arnold, B. Jamtveit, and A. Malthe-Sorensen. Free surface dissolution of stresses solids. *Journal of the Virtual Explorer*, 14, 2003.
- [35] P. Labaume and I. Moretti. Diagenesis-dependance of cataclastic thrust fault zone sealing in sandstones. Example from the Bolivian Sub-Andean zone. *Journal of Structural Geology*, 23 :1659–1675, 2001.
- [36] P. Labaume, S. Sheppard, and I. Moretti. Structure and hydraulic behaviour of cataclastic thrust fault zones in sandstones, Sub-Andean zone, Bolivia. *Journal of Geochemical Exploration*, 69-70 :487–492, 2000.
- [37] P. Labaume, S. Sheppard, and I. Moretti. Fluid flow in cataclastic thrust fault zones in sandstones, Sub-Andean zone, southern Bolivia. *Tectonophysics*, 340 :141–172, 2001.

- [38] F.K. Lehner. Thermodynamics of rock deformation by pressure solution. In D.J. Barber and P.G. Merredith, editors, Deformation Processes in Minerals, Ceramics and Rocks, pages 296–333. Unwin Hyman, London, 1990.
- [39] F.K. Lehner. A model for intergranular pressure solution in open systems. Tectonophysics, 245 :153–170, 1995.
- [40] F.K. Lehner and J. Bataille. Nonequilibrium thermodynamics of pressure solution. PAGEOPH, 122 :53–85, 1984/85.
- [41] F.K. Lehner and Y.M. Leroy. Sandstone compaction by intergranular pressure solution. In Y. Guéguen and M. Boutea, editors, Mechanics of Fluid-Saturated Rocks, pages 115–168. Amsterdam, 2004.
- [42] Y.M. Leroy and W.K. Heidug. Geometrical evolution of stressed and curved solid-fluid phase boundary.stability of cylindrical pores. Journal of Geophysical Research, 99(B1) :517–530, 1994.
- [43] D. Leythaeuser, O. Borromeo, F. Mosca, R. di Primio, M. Radke, and R.G. Schaefer. Pressure solution in carbonate source rocks and its control on petroleum generation and migration. Marine and Petroleum Geology, 1é(7) :717–733, 1995.
- [44] K.W. Liu. Deep-burial diagenesis of the siliciclastic ordovician natal group, south africa. Sedimentary Geology, 154 :177–189, 2003.
- [45] R. Marfil, M. Scherer, and M.J. Turrero. Diagenesis processes influencing porosity in sandstones from the Triassic Buntsandstein of the Iberian Range, Spain. Sedimentary Geology, 105 :203–219, 1996.
- [46] Ph. Mestat and P. Humbert. Référentiel de tests pour la vérification de la programmation des lois de comportement dans les logiciel d’éléments finis. Bulletin des Laboratoires des Ponts et Chaussées, 230 :23–38, 2001.
- [47] C. Misbah, F. Renard, J.P. Gratier, and K. Kassner. Dynamics of a dissolution front for solids under stress. Geophysical Research Letters, 31, 2004.
- [48] J. Morel and S.W.J. den Brok. Increase in dissolution rate of sodium chlorate induced by elastic strain. Journal of Crystal Growth, 222 :637–644, 2001.
- [49] N.I. Muskhelichvili. Some basic problems of the mathematical theory of elasticity : fundamental equations plane theory of elasticity, torsion and bending. Noordhoff, Groningen, 1953.
- [50] A.R. Niemeijer, C.J. Spiers, and B.Bos. Compaction creep of quartz sand at 400-600 ° C : experimental evidence for dissolution-controlled pressure solution. Earth and Planetary Science Letters, 195 :261–275, 2002.

- [51] R. Raj. Creep in polycrystalline aggregates by matter transport through a liquid phase. *Journal of Geophysical Research*, 87(B6) :4731–4739, 1982.
- [52] F. Renard, D.K. Dysthe, J. Feder, B. Bjørlykke, and B. Jamtveit. Enhanced pressure solution creep rates induced by clay particles : Experimental evidence in salt aggregates. *Geophysical Research Letters*, 28 :1295–1298, 2001.
- [53] F. Renard, J.P. Gratier, and B. Jamtveit. Kinetics of crack-sealing, intergranular pressure solution, and compaction around active faults. *Journal of Structural Geology*, 22 :1395–1407, 2000.
- [54] F. Renard, A. Park, P. Ortoleva, and J.-P. Gratier. An integrated model for transitional pressure solution in sandstones. *Tectonophysics*, 312 :97–115, 1999.
- [55] J.D. Rimstidt and H.L. Barnes. The kinetics of silica-water reactions. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 44 :1683–1699, 1980.
- [56] P.-Y. F. Robin. Pressure solution at grain-to-grain contacts. *Geochemica et Cosmochimica Acta*, 42 :1383–1389, 1978.
- [57] E.H. Rutter. The kinetics of rock deformation by pressure solution. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, 283 :203–219, 1976.
- [58] J. Salençon. *Mécanique des milieux continus (Tomes I, II et III)*. Éditions de l’École Polytechnique, Palaiseau, 2000.
- [59] P.M.T.M. Schutjens. *Intergranular pressure solution in halite aggregates and quartz sands : an experimental investigation*. PhD thesis, Université d’Utrecht, 1991.
- [60] P.M.T.M Schutjens and C.J. Spiers. Intergranular pressure solution in NaCl : Grain-to-grain contact experiments under the optical microscope. *Oil and Gas Science and Technology - Rev. IFP*, 54(6) :729–750, 1999.
- [61] H.A. Sheldon, J.W. Wheeler, R.H. Worden, and M.J. Cheadle. An analyse of the roles of stress, temperature, and ph in chemical compaction of sandstones. *Journal of Sedimentary Research*, 73(1) :64–71, 2003.
- [62] I. Shimizu. Kinetics of pressure solution creep in quartz : theoretical considerations. *Tectonophysics*, 245 :121–134, 1995.
- [63] C.J. Spiers and P.M.T.M. Schutjens. Densification of crystalline aggregates by fluid-phase diffusional creep. In D.J. Barber and P.G. Merredith, editors, *Deformation Processes in Minerals, Ceramics and Rocks*, pages 296–333. Unwin Hyman, London, 1990.
- [64] C.J. Spiers, P.M.T.M. Schutjens, R. Brzesowsky, and C. Peach. Experimental determination of constitutive parameters governing creep of rocksalt by pressure solution. In R.J. Knipe and E.H. Rutter, editors, *Deformation Mechanisms, Rheology and Tectonics*, pages 215–227. The Geological Society, London, 1990.

- [65] D.J. Srolovitz. On the stability of surfaces of stresses solids. *Acta Metallica*, 32(2) :621–625, 1989.
- [66] R. Tada, R. Maliva, and R. Siever. A new mechanism for pressure solution in porous quartzose sandstone. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 51 :2295–2301, 1987.
- [67] R. Tada and R. Siever. Experimental knife-edge pressure solution of halite. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 50 :29–36, 1986.
- [68] N. Takeno, T. Ishido, and J.W. Pritchett. Alteration zonation of silica minerals in geo-thermal system – A numerical simulation based on reaction-transport model. Proceedings 20th New Zealand Geothermal Workshop, pages 259–264, 1998.
- [69] S. Timoshenko and J.N. Goodier. Théorie de l'élasticité. Béranger, Paris : Liège, 1948.
- [70] C.-T. Wang. Applied elasticity. McGraw-Hill, New-York, 1953.
- [71] P.K. Weyl. Pressure solution and the force of crystallization – A phenomenological theory. Journal of Geophysical Research, 64 :2001–2025, 1959.
- [72] R.P. Wintsch and K. Yi. Dissolution and replacement creep : a significant deformation mechanism in mid-crustal rocks. Journal of Structural Geology, 24 :1179–1193, 2002.
- [73] P. Wriggers. Computational contact mechanics. John Wiley, Chichester, 2002.
- [74] X.-S. Yang. Pressure solution in sedimentary basins : effect of temperature gradient. Earth and Planetary Science Letters, 176 :233–243, 2000.
- [75] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, and J. M. Too. Reduced integration technique in general analysis of plates and shells. Internat. J. Numer. Methods Engrg., 3 :275–290, 1971.
- [76] O. C. Zienkiewicz and J. Z. Zhu. The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates – I : The recovery technique. Internat. J. Numer. Methods Engrg., 33 :1331–1364, 1992.
- [77] Zlamal. Superconvergence and reduced integration in the finite element method. Math.Comp., 32 :663–685, 1978.