
Modélisation des champs au sein des matériaux hétérogènes en utilisant XFEM: cas de l'argilite de MEUSE-HM

Senjun Wu¹, Naima Belayachi¹, Dashnor Hoxha¹

¹ Laboratoire PRISME, Polytech'Orléans, 8 rue Léonard de Vinci, 45072 Orléans Cedex 2, France

senjun.wu@etu.univ-orleans.fr, naima.belayachi@univ-orleans.fr,
dashnor.hoxha@univ-orleans.fr

RESUME. La modélisation des champs internes de contraintes et de déformations dans le cas de l'argilite de la Meuse-haute Marne est proposée dans ce papier avec XFEM. Cette technique aux progrès importants nous semble appropriée car sans remaillage dans le cas de microstructure complexe. Le géomatériau considéré révèle une microstructure polycristalline de grains en grains qui est modélisée ici par une tessellation de Voronoi. La disparité d'orientation, de taille des grains de cette représentation permet, via l'utilisation XFEM de déterminer les incompatibilités des déformations et des contraintes entre grains voisins de calcite /quartz ou d'argile donnant lieu à des gradients parfois très élevés qui peuvent être des sites d'initiation et de développement du comportement non linéaire.

ABSTRACT. Modelling the stresses-strains fields in the case of the Meuse-Haute Marne argillite with XFEM is proposed in this paper. This technique seems appropriate because no remeshing is needed even in cases of complex microstructures. The geomaterial considered here with a polycrystalline microstructure (grain to grain) is modeled by a Voronoi tessellation. The disparity of the orientation and the grain size of this representation allow determining the incompatibility of the deformations and stresses between neighbour grains of calcite/quartz or argillaceous by using the XEM. This incompatibility of the deformations and stresses sometimes give rise to very high gradients which can be the preferential sites of the initiation and development of nonlinear behavior.

MOTS-CLES. Microstructure de Voronoi, XFEM, Champs de contrainte, argilite

KEYWORDS. Voronoi microstructure, XFEM, stress-strain fields, argilite

1. Introduction

La compréhension du comportement des géomatériaux est nécessaire pour l'évaluation et la prédiction de leurs propriétés et de leur comportement. Ces matériaux hétérogènes sont généralement proposés dans différentes applications d'ingénierie dont depuis quelques années certaines liées à la problématique de stockages (stockage du CO₂, déchets nucléaires, déchets urbains). Le comportement des géomatériaux, utilisés dans ce cadre comme des barrières géologiques et/ou ouvrages, est un domaine d'études intensives tant expérimentales que théoriques et numériques.

L'argilite de Meuse Haute-Marne (M/HM), une roche formant en grande partie la couche du Callovo-Oxfordian du Laboratoire Souterrain de l'ANDRA à Bure, en particulier a été sujet de nombreuses études expérimentales au laboratoire et in situ pour comprendre les mécanismes qui gouvernent son comportement (Zhang and Rothfuchs 2006).

Ces études ont montrés que le comportement de l'argilite de M/HM est influencé fortement par sa structure hétérogène et son histoire géologique qui lui confèrent des propriétés mécaniques thermiques et hydriques tout à fait particulières : une résistance mécanique relativement importante, une perméabilité très faible et une sensibilité importante vis-à-vis de l'état hydrique. Le comportement de l'argilite de M/HM a été aussi sujet de plusieurs travaux de modélisations macroscopiques (Hoxha et al. 2007, Chiarrelli et al., 2004, Shao et al. 2006) ou microscopiques (Giraud et al. 2007, Abou Chakra et al. 2008).

Il est actuellement largement accepté que le comportement mésoscopique de l'argilite de M/HM est de type elasto-plasto-endommageable (Shao et al. 2006). Ce comportement est confirmé par différentes études expérimentales. Cependant, si le mécanisme plastique est généralement lié aux glissements au niveau des feuillettes argileuses, les mécanismes à l'origine de l'endommagement de cette roche sont actuellement mal connu. Certains auteurs citent comme mécanisme principal l'endommagement de la matrice argileuse et la décohésion des inclusions de quartz et de calcite (Hoxha et al. 2007), tandis que d'autres auteurs mettent en avance plus un endommagement de ces inclusions (Chiarelli et al. 2004).

Les modèles micromécaniques sont des outils bien adaptés pour faire le lien entre la structure des matériaux et leur réponse effective (Giraud et al. 2007, Abou-Chakra et al. 2008). Même si ce type d'approche a montré une très grande fiabilité à reproduire les résultats des essais expérimentaux, de part de leur méthodologie et de leur objectif, (rappelons qu'il s'agit des méthodes qui s'intéressent aux champs moyens au niveau d'un volume élémentaire) ils n'apportent pas de réponse à la question des mécanismes à l'origine du comportement endommageable ou viscoplastique au niveau microscopique. L'origine de ces phénomènes est à chercher non pas aux champs moyens mais aux niveaux des champs locaux de déformations et/ou contraintes qui méritent de ce fait d'être étudiés plus en détails. En effet, la

structure complexe de ce matériau conduit sous chargement mécanique, hydrique ou thermique à des champs très hétérogènes de contraintes et/ou de déformations et à des concentrations de ces champs aux contacts entre composants à propriétés contrastées. Ces zones de concentrations entraînant l'apparition et la croissance de surfaces libres, sont donc des sites de nucléation d'endommagement. Dans la microstructure matrice /interface /inclusion, les mécanismes d'amorçage sont différents selon que l'inclusion, l'interface ou la matrice rompt (Berveiller et al. 2001).

Dans une grande majorité des études numériques, l'accent est mis sur la modélisation de la croissance de fissures, et une multitude de stratégies de modélisation a été mise en place parmi lesquelles on peut distinguer le remaillage avec des techniques de plus en plus sophistiquées (Colombo et al. 2006) et les calculs basés sur les méthodes sans maillage (Belyschko and Black 1999, Moes et al. 1999). Ces dernières techniques s'affranchissent de la conformité du maillage avec les frontières naturelles des domaines des constituants de la microstructure d'un matériau, ouvrant ainsi de nombreuses possibilités de leur utilisation en pratique (Wu et al. 2010)

Ce papier est consacré à la reconstruction numérique, basée sur XFEM des champs internes (de déformations et de contraintes) de l'argilite de la Meuse/Haute Marne afin de mettre en évidence le rôle de l'hétérogénéité de la structure sur des éventuels mécanismes d'initiation et de développement de l'endommagement de ce matériau. L'argilite de M/HM est donc considéré comme un matériau polycristallin conforme aux observations révélant sa composition réelle (Yven et al. 2007). Ces observations montrent qu'à l'échelle mésoscopiques (quelques dizaines de microns à quelques millimètres) la structure de cette roche fait apparaître des grains d'argile (qui dans des échelles inférieures comprennent des paquets de feuillets d'argile et une porosité importante), ainsi que des grains de calcite et de quartz qui peuvent atteindre jusqu'à 43% du volume de la roche. Nous utilisons le paradigme de Voronoï pour générer une microstructure granulaire en forme d'une agglomération de grains de composition différente.

2. Modélisation numérique par XFEM

Si les premières applications de la méthode XFEM dans le domaine mécanique ont été liées à la description de la propagation des fissures aux milieux homogènes (Belyschko and Black 1999, Moes et al. 1999), très rapidement la méthode a été adoptée et développée aux problèmes liés à la description de l'évolution des microstructures contenant des discontinuités comme des inclusions et des vides (Sukumar et al. 2001). Le champ d'application de cette méthode ne cesse de s'élargir dans des domaines très diverses. Couplée avec les fonctions de niveau (Level Set Method, LSM), la technique a montré aussi son efficacité dans les approches d'homogénéisation numériques (Moes et al. 2003) pour le cas de bi-matériaux.

2.1 Principes de la méthode XFEM

La description détaillée de la méthode XFEM n'est pas objet de cette étude (pour une description plus complète le lecteur intéressé peut consulter les références Moes et al. 2003 et Wu et al. 2010 entre autre). Une description succincte de la méthode est néanmoins présentée ici pour faciliter la compréhension de l'approche.

XFEM est une extension de la Méthode aux Eléments Finis (MEF) qui utilise pour l'intégration des équations différentielles à résoudre un maillage régulier qui ne coïncide donc pas nécessairement aux frontières du domaine étudié. En revanche XFEM enrichit l'approximation de la fonction inconnue aux nœuds des éléments traversés par une interface, telle que cela devient:

$$u^{X-FEM} = \sum_{i \in I} N_i(x)u_i + \sum_J a_J N_J(x)F(x) \quad [1]$$

où I est l'ensemble des nœuds du maillage, u_i le degré de liberté classique du nœud i , N_i est la fonction de forme possédant la propriété de la partition de l'unité, J l'ensemble des nœuds enrichis, a_J représente les nouveaux degrés de liberté et $F(x)$ est la fonction d'enrichissement.

La fonction d'enrichissement choisie ici est sous la forme proposée par (Moes et al. 2003) :

$$F(x) = \sum_I |\phi_I N_I(x)| - \left| \sum_I \phi_I N_I(x) \right| \quad [2]$$

où $N_I(x)$ est la fonction de forme associée au nœud i , ϕ_I est la valeur nodale de la fonction de niveau. Ces fonctions de niveau permettent la description des frontières internes (interfaces des inclusions dans une matrice matérielle, fissures ou, comme il est le cas ici, la frontière entre deux matériaux). Cette technique des fonctions de niveau considère l'interface comme l'iso-zéro d'une fonction distance algébrique : la fonction a la valeur zéro sur la frontière, une valeur négative à l'intérieur du domaine limité par cette frontière, et positive à l'extérieur de ce domaine. Il est donc clair que cette fonction de niveau dépendra de la forme de la frontière considérée et dans la littérature plusieurs fonctions ont été utilisées (Sukumar et al. 2001). Dans le cas des frontières limitant un domaine polyédrique (comme il est le cas ici), la fonction de niveau utilisée est de la forme :

$$\phi(\underline{\mathbf{x}}) = \min_{\substack{\mathbf{x}_c^i \in \Omega_c^i \\ i=1,2,\dots,n}} \{ \|\underline{\mathbf{x}} - \underline{\mathbf{x}}_c^i\| - L \} \quad [3]$$

où L est la distance entre le centre $\underline{\mathbf{x}}_c^i$ (centre du grain de Voronoi) et $\underline{\mathbf{x}}_I$ ($\underline{\mathbf{x}}_I$

représente l'intersection entre $\{\underline{\mathbf{x}}_c^i - \underline{\mathbf{x}}\}$ et l'interface de l'inclusion), elle est définie par :

$$L = \left\| \underline{\mathbf{x}}_c^i - \underline{\mathbf{x}}_I \right\| \quad [4]$$

L'intégration, l'assemblage et la résolution du système des équations discrétisées est faite selon les mêmes règles de la MEF, en considérant néanmoins non seulement les inconnues nodales classiques mais aussi celles induites par le processus d'enrichissement d'interpolation.

La procédure d'homogénéisation en utilisant XFEM consiste alors à décrire la microstructure d'un volume élémentaire représentatif (VER) via les fonctions de niveau, d'appliquer sur ce VER des chargements tests et des conditions aux limites appropriées, de résoudre le problème ainsi formulé en utilisant la technique XFEM et finalement de calculer les champs moyens qui permettent d'identifier les coefficients de la matrice de rigidité effective. La validation de cette procédure dans le cas d'une structure matrice-inclusions et son application à quelques problèmes est présentée dans Wu et al. 2010.

2.2 La microstructure en grains de Voronoi et propriétés des constituants

Conformément aux observations microscopiques de l'argilite de M/HM (Yven et al. 2007) sa microstructure dans ce travail a été considérée comme étant une agglomération de grains, modélisée par des polyèdres (ou des polygones en 2D) en utilisant un algorithme classique de décomposition de Voronoi (Aurenhammer 1999). D'abord un jeu de points est tiré aléatoirement dans un espace unitaire, ces points constitueront les centres de grains et forment donc la base de décomposition de Voronoi. Le maillage régulier utilisé ici est réalisé avec un élément cubique à 8 nœuds d'une taille de 0.02272 mm de côté avec une division du VER de 44x44x44.

Dans le cas de l'argilite de M/HM il s'agit d'une structure composite à quatre phases : grain d'argile, de quartz, de calcite et des pores macroscopiques. Notons que la plupart de la porosité (~90% de la porosité ou 16% du volume de VER) est occluse dans les grains de l'argile et non visible à cette échelle. Les macropores ne présente qu'environ 10% de la porosité totale où environ 2% du volume du VER. Un exemple de réalisation 3D de cette microstructure est présenté sur la figure 1.a (300 grains en 3D). Dans la figure 1.b est présenté la structure interne selon un plan passant par le centre du volume et qui fait apparaître des macropores. Les couleurs de chaque grain correspondront aux différents constituants de l'argilite.

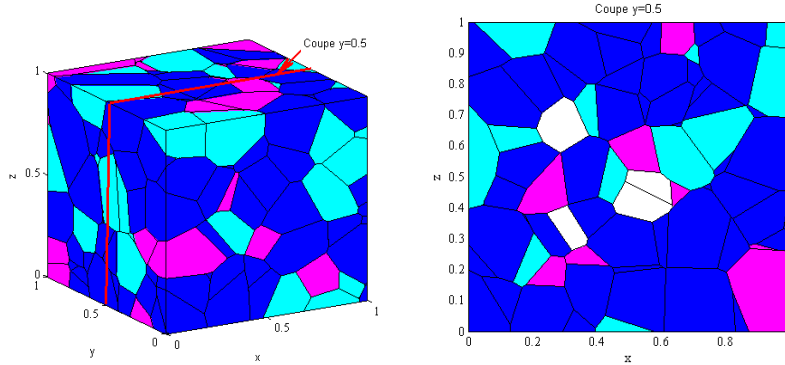


Figure 1. La microstructure polycristalline de l'argilite de M/HM générée par un algorithme de Voronoi: chaque couleur correspond à un composant de la structure : bleu-argile ; cyan – calcite ; magenta –quartz, blanc – vide.

Nous nous limitons dans le cadre de cette étude au comportement linéaire de la roche. Les propriétés élastiques des constituants sont indiquées dans le tableau 1 (Vu 2006).

Propriétés des	Calcite	Quartz	Matrice	Pores
Module d'Young	84000	96400	7600	0.1
Coefficient de	0.3	0.08	0.1	0.08
Fraction volumique	19%	15%	64%	2%

Tableau 1. Propriétés des différentes phases composant l'argilite.

3. Résultats et discussion

Les simulations numériques ont été réalisées en utilisant le code XFEM développé en MATLAB (Wu et al. 2010). Les conditions aux limites et le chargement mécanique sont ceux d'un test de compression uniaxial. Les déplacements sont fixés à $z=0$, et sur la face supérieure à $z=1$ mm, un chargement de -1000 N (en compression) est considéré. Le comportement de chaque grain de la microstructure est considéré comme élastique linéaire. Seuls les résultats du calcul 3D sont présentés ici. Pour cela les iso valeurs des champs de déplacements et des déformations suivant une coupe passant par le centre du VER (figure 2) ont été représentées sur les figures 2.a à 2.d, tandis que les champs des contraintes selon cette même coupe sur les figures 3.a à 3.d.

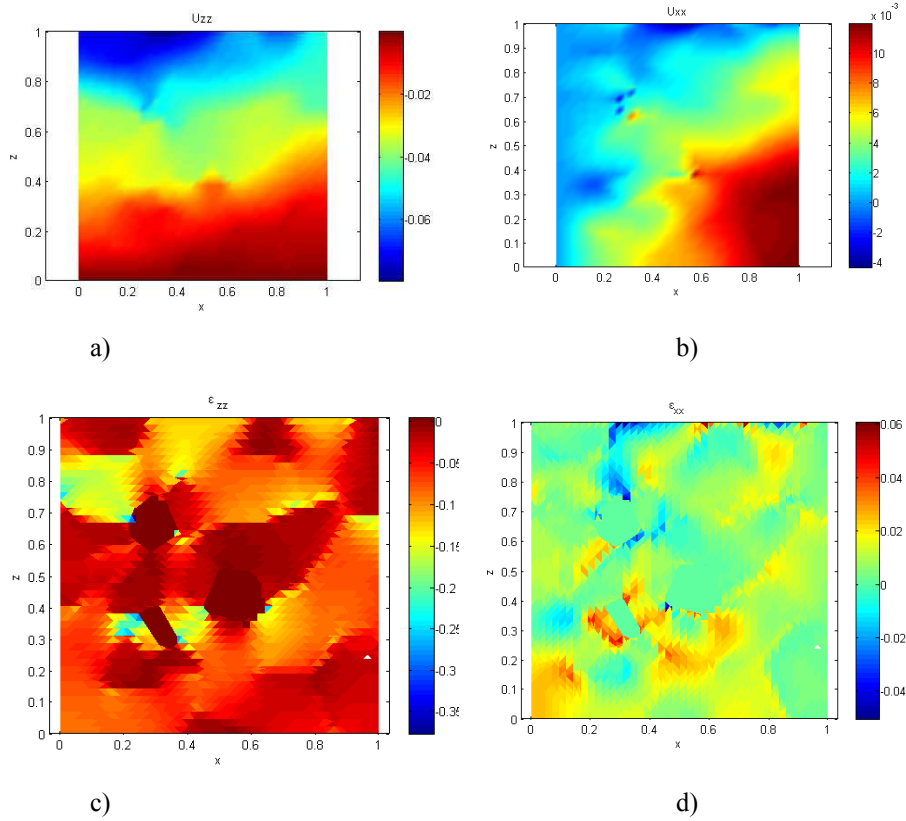


Figure 2. Champs de déplacements et de déformations dans le plan médian du VER.

Signalons que les iso-valeurs des déplacements sont construites à partir des valeurs nodales tandis que pour les déformations et les contraintes un traitement par éléments a été réalisé avec un découpage en sub-éléments linéaires, similaire à la technique d'intégration par sub-éléments.

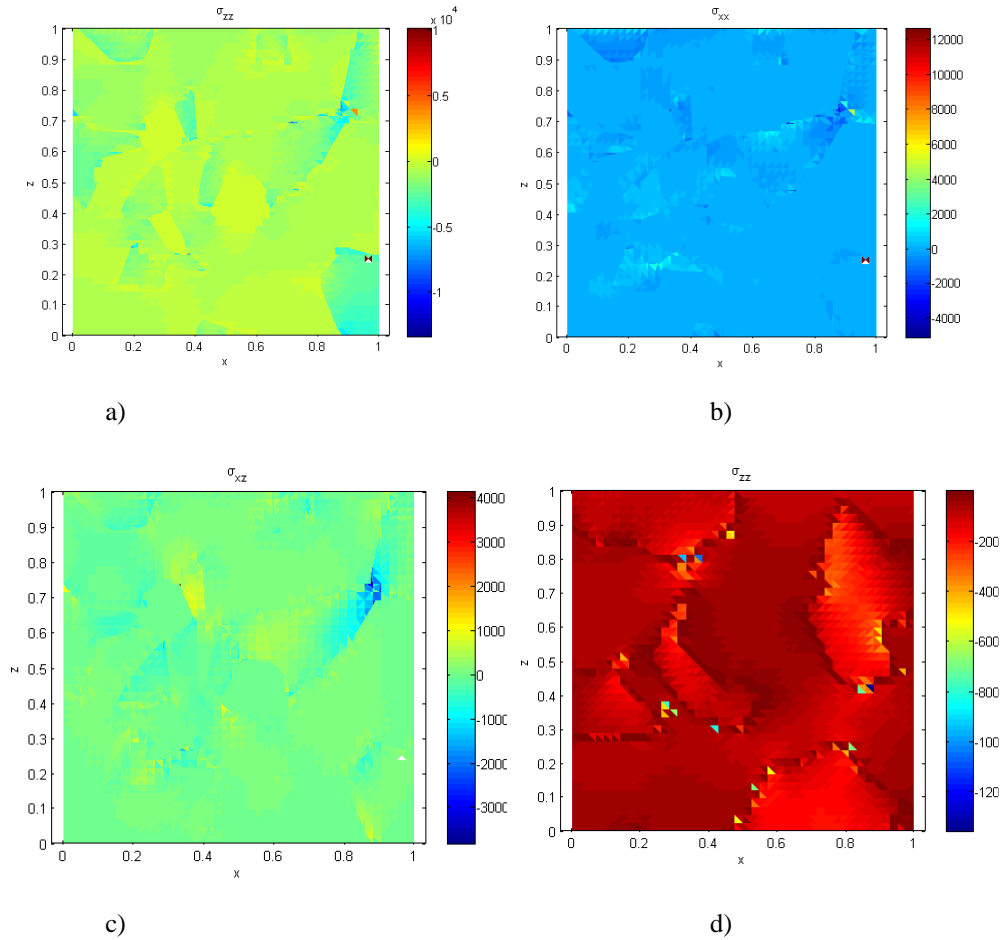


Figure 3. Champs des contraintes a-b-c dans le plan médian du VER ($y=0.5$) d – dans le plan $y=0$

Rappelons qu'un chargement vertical uniforme est appliqué sur la surface supérieure du VER. Malgré cette uniformité du chargement mécanique en contrainte, comme attendu, l'ensemble des champs présentés sur les figures 2 et 3 font état d'hétérogénéités importantes au sein de l'argilite en fonction de la distribution spatiale des composants, les régions constitués de grains d'argilite se déformant d'avantage. En conséquence, des forts gradients de déformations existent autour des grains de calcite et de quartz (fig. 2.c et 2.d). Ces gradients sont plus souvent associés avec des fortes courbures de frontières ou des contacts de plusieurs (3 ou plus) grains de propriétés différentes.

En terme de distribution de contraintes dans la roche cette hétérogénéité des déformations se traduit d'une part par des concentrations équivalentes des contraintes, et d'autre part par la naissance, notamment dans les frontières des grains, des contraintes de traction, dans un contexte, où, rappelons le, le chargement mécanique macroscopique est exclusivement de nature compressive. Ces contraintes de traction naissent principalement dans les contacts de grains de l'argile avec les grains de calcite et/ou du quartz (figures 3.a, 3.b et 3.d). Néanmoins cela ne se passe pas automatiquement dans tous les contacts de ce type et semble dépendre pas seulement du contact mais aussi de son entourage. A titre d'exemple on ne distingue pas de contrainte σ_{zz} de traction sur la figure 3.d alors qu'elles sont présentes sur la figure 3.a. Il est également important de noter que ce phénomène ne semble pas avoir une orientation préférentielle : il est observable aussi bien sur les frontières plus ou moins horizontales que sur les frontières inclinées. En même temps nous observons des contraintes de cisaillement importantes (figure 3.c) qui accompagnent les frontières des grains sujet à une contrainte de traction.

L'ensemble de ces résultats laisse penser que l'endommagement de l'argilite de M/HM est principalement, si non exclusivement, dû à l'hétérogénéité des champs de contraintes et de déformations, gouvernée par la structure fortement hétérogène de la roche. Dans ces conditions, l'application des théories de propagation de fissures au niveau macroscopique semble peu convenable.

4. Conclusion

La modélisation utilisant XFEM couplée aux fonctions de niveaux avec une représentation de Voronoi adaptée à la microstructure de l'argilite de ce travail fournit un ensemble complet pour décrire son comportement micromécanique. Cependant, des essais sont nécessaires afin de confirmer les performances d'une telle approche dont, par exemple des essais avec des observations microscopiques en cour du chargement concernant l'évolution de ces zones de localisation numériques. En outre, la modélisation doit être étendue à un comportement non linéaire des grains de la matrice et la prise en compte de l'endommagement à l'interface et ce, afin d'inclure des informations plus complexes des états de contraintes. Une étude de l'effet de taille des grains sera aussi importante dans la compréhension du comportement des grains à cette échelle.

5. Bibliographie

Abou-Chakra Guéry A; Cormery F; Shao J-F; Kondo D. A micromechanical model of elastoplastic and damage behaviour of a cohesive geomaterial. *Int. J. of Solids and structures*, 2008. **45**: p.1406-1429.

Aurenhammer F., Voronoï diagrams survey of a fundamental geometric data structure, ACM Computing Surveys (CSUR). 23 (1991) 345-405.

- Belyschko T. and Black T., Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1999, **45** : p.601-620.
- Berveiller M, Bretheau T, Fourgeres R. *Reppels sur les mécanismes de la plasticité et de l'endommagement* dans Homogénéisation en mécanique des matériaux 2. comportement non linéaire et problèmes ouverts. Paris : Hermès, 2001, p. 203-249.
- Colombo D, Giglio M. A methodology for automatic crack propagation modelling in planar and shell FE models. *Engineering Fracture Mechanics*, 2006, **73**: p. 490-504.
- Giraud A., Huynh Q. V., Hoxha D., Kondo D.: Application of results on Eshelby tensor to the determination of effective poroelastic properties of anisotropic rocks-like-composites. *International journal of solids and structures*, 2007. **44**: p. 3756-3772.
- Hoxha, D., et al., Saturated and unsaturated behaviour modelling of Meuse-Haute-Marne argillite. *International Journal of Plasticity*, 2007. **23**(5): p. 733-766.
- Moës, N., Dolbow, J. and Belytschko, T., A finite element method for crack growth without remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1999. **46**: p. 131-150.
- Moës N., Cloirec M., and Cartraud P. A computational approach to handle complex microstructure geometries, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2003, **192**: p.3163-3177.
- Shao J. F, Jia Y, Kondo D, Chiarelli A. S. Acoupled elastoplastic damage model for semi brittle materials and extension to unsaturated conditions. *Mechanics of materials*, 2006, **38**: p. 218-232.
- Sukumar, N., Chopp, D. L., Moës, N., and Belytschko, T., Modeling holes and inclusions by level sets in the extended finite-element method. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 2001, **190**: p. 6183-6200.
- Vu H. Q. Estimations des propriétés poromécaniques effectives des argilites : apport des méthodes d'homogénéisation. Thèse de l'Institut national polytechnique de Lorraine, 2006.
- Wu S., Belayachi N., Do D. P., Hoxha D., Modeling mechanical behavior of geomaterials by the extended finite-element method. Fifth international conference on Multiscale Materials Modeling MMM2010, Octobre 4-8, Germany.
- Yven B., Sammartino S., Geraud Y., Homand H., and Villieras F. Mineralogy, texture and porosity of Callovo-Oxfordian argillites of the Meuse/Haute-Marne region (Eastern Paris Basin), *Mémoires de la Société géologique de France*, 2007, **178**: p. 73-90.
- Zhang C. Rothfuchs T., Experimental study of the hydro-mechanical behaviour of the callovo-oxfordian argilite, *Applied Clay Science*, 2004, 26: p. 325-336.