

Modélisation micromécanique du comportement élastoplastique endommageable de l'argile du Callovo-Oxfordien

Ariane Abou-Chakra Guéry

Laboratoire de Mécanique de Lille, UMR 8107, 59655 Villeneuve d'Ascq, France

RESUME. Cette étude est consacrée au développement et à la validation d'une approche d'homogénéisation non linéaire appliquée au comportement mécanique de l'argilite du Callovo-Oxfordien. Le matériau est modélisé comme un composite à trois phases constitué d'une matrice élastoplastique et d'inclusions élastiques linéaires et élastiques endommageables. La loi constitutive macroscopique est obtenue à l'aide d'une adaptation de la méthode incrémentale de Hill, 1965. Cette approche aboutit à la construction de l'opérateur tangent macroscopique du matériau qui dépend du comportement local non linéaire des phases. Compte tenu de la morphologie matrice/inclusion de la microstructure de l'argilite du Callovo-Oxfordien, un schéma d'homogénéisation de type Mori-Tanaka est utilisé pour la résolution du problème de localisation. Le modèle ainsi développé est appliqué à la prédiction des réponses macroscopiques contrainte-déformation de l'argilite du Callovo-Oxfordien sous différents trajets de chargement.

MOTS-CLÉS : Geomatériaux ; Homogénéisation non linéaire ; Plasticité et endommagement.

ABSTRACT. The present study is devoted to the development and validation of a non linear homogenization approach of the mechanical behavior of Callovo-Oxfordian clays. The material is modelled as an heterogeneous one composed of an elastoplastic clay matrix and of linear elastic or elastic damage inclusions. The macroscopic constitutive law is obtained by adaptating the Hill-type incremental method (Hill, 1965). The approach leads to the formulation of the macroscopic tangent operator of the material by considering the non linear local behavior of each phase. Due to the matrix/inclusion morphology of the microstructure of the hard clay, a Mori-Tanaka scheme is considered for the localization step. The developed model is applied for the prediction of the macroscopic stress-strain responses of hard clays..

KEYWORDS : Geomaterials, nonlinear Homogenization ,Plasticity and Damage.

1. INTRODUCTION

Cette étude, menée en collaboration avec l'Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs (Andra), est motivée par la problématique du stockage des déchets radioactifs à haute activité et à vie longue. Elle vise à mettre en place un modèle prédictif du comportement mécanique de l'argilite du Callovo-Oxfordien, milieu géologique choisi pour un éventuel stockage. Plus précisément, il s'agit de formuler un modèle de comportement en utilisant les méthodes d'homogénéisation non linéaire. Ce modèle ainsi construit aura l'avantage, par rapport aux modélisations macroscopiques existantes (voir par exemple (Chiarelli *et al.*, 2003)), de prendre en compte les mécanismes microstructuraux de déformations en plus de l'évolution du cortège minéralogique avec la profondeur. Pour répondre à cet objectif, on propose une modélisation par changement d'échelle basée sur une adaptation de la méthode incrémentale de Hill, 1965. Par rapport aux travaux existants sur cette approche (Chaboche *et al.*, 2005) et (Doghri *et al.*, 2005), la particularité de cette étude tient dans la prise en compte pour la

matrice argileuse de la plasticité dilatante non associée combinée à l'élasticité endommageable des inclusions minéralogiques du matériau.

2. MICROSTRUCTURE DE L'ARGILE DU CALLOVO-OXFORDIEN

La figure 1 montre une microstructure typique de l'argile du Callovo-Oxfordien. Le matériau s'organise sous forme de grains de quartz (23 à 25%) et de calcite (20 à 27%) bien individualisés et disséminés dans une matrice argileuse (environ 45%-50%). Les grains de calcite et de quartz sont de forme plus ou moins arrondie et ont des dimensions variant entre 10 et 40 μm . Les minéraux argileux sont quant à eux groupés en amas de quelques microns qui épousent très fortement la forme des grains qu'ils entourent.

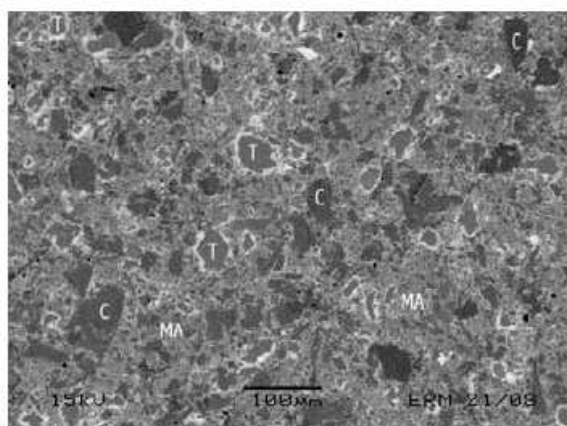


Figure 1 : Micrographie d'une structure typique de l'argilite de l'Est: grains de calcite (C), grains de quartz (tectosilicates) (T) et matrice argileuse (MA).

D'autres observations microstructurales (Chiarelli *et al.*, 2003) mettent en évidence de nombreux minéraux argileux extrudés. Ceci serait dû à un mouvement relatif entre les feuillets qui aurait ainsi provoqué l'apparition de déformations plastiques résiduelles observées au cours d'essais macroscopiques dans les directions axiales et latérales après décharge.

Une autre observation intéressante réside dans la présence de microfissures intergranulaires qui serait dû au processus de décohésion aux interfaces grains/matrice. Des fractures transgranulaires ont été remarquées à l'intérieur des grains principalement visible dans la calcite où on observe un ensemble de microfissures en réseaux dont la distribution est quasi isotrope. Dans ce qui suit, nous négligerons la microfissuration par décohésion autour du grain, de sorte à supposer que seul le constituant calcite a un comportement mécanique élastique endommageable. L'endommagement induit par la microfissuration mis en évidence peut ainsi expliquer la dégradation des modules observée dans les essais macroscopiques.

3. COMPORTEMENT LOCAL DES CONSTITUANTS

Une première étape dans l'approche par changement d'échelle réside dans la caractérisation et la modélisation du comportement de chaque constituant. Basés sur les observations microstructurales, brièvement décrites dans le paragraphe précédent, la matrice argileuse est modélisée comme une phase élastoplastique alors que les grains de quartz sont considérés élastiques et le comportement des grains

calcite décrit au moyen d'un model élastique endommageable. En ce qui concerne la phase calcite une attention particulière est portée sur la prise en compte de effets unilatéraux liés à une possible fermeture des microfissures.

3.1. COMPORTEMENT ELASTOPLASTIQUE DE LA PHASE ARGILEUSE

Pour la modélisation de la phase élastoplastique, on retient un modèle non associé de type (Drucker *et al.*, 1952) avec un écrouissage isotrope. L'énergie libre s'écrit classiquement comme étant la somme de l'énergie élastique et de l'énergie stockée lors du chargement isotrope $W^\gamma(\gamma^p)$:

$$W(\underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\underline{\varepsilon}}^p, \gamma^p) = \frac{1}{2}(\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^p) : C : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^p) + W^\gamma(\gamma^p) \quad [\text{Eq. 1}]$$

où $\underline{\underline{\varepsilon}}^p$ est la déformation plastique et γ^p la variable d'écrouissage. C est le module d'élasticité pour la matrice isotrope et vaut: $C = 3kJ + 2\mu K$, où k et μ représentent respectivement les modules de compressibilité et de cisaillement; J et K sont respectivement les opérateurs sphériques et déviatoriques définis par $J = \frac{1}{3}\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}}$ et $K = I - J$. $\underline{\underline{1}}$ est le tenseur identité du second ordre et I le tenseur identité d'ordre quatre.

Afin de rendre compte de la sensibilité à la contrainte moyenne, un critère de type Drucker-Prager est considéré:

$$f(\underline{\underline{\sigma}}, \gamma^p) = q + \alpha^p(\gamma^p)(p - c_p) \quad [\text{Eq. 2}]$$

où $p = \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}})/3$ et $q = \sqrt{\frac{3}{2}\underline{\underline{s}} : \underline{\underline{s}}}$; $\underline{\underline{s}}$ étant le déviateur de contrainte. En accord avec les données expérimentales, nous avons choisi une forme exponentielle de la forme:

$$\alpha^p(\gamma^p) = \alpha_m^p - (\alpha_m^p - \alpha_0^p)e^{-b\gamma^p} \quad [\text{Eq. 3}]$$

Pour décrire les effets de dilatance de la matrice, le potentiel plastique de la forme suivante est adopté:

$$g(\underline{\underline{\sigma}}, \gamma^p) = q + \beta^p(\gamma^p)p \quad [\text{Eq. 4}]$$

dans laquelle β^p est le paramètre de dilatance de la forme:

$$\beta^p(\gamma^p) = \beta_m^p - (\beta_m^p - \beta_0^p)e^{-b'\gamma^p} \quad [\text{Eq. 5}]$$

La forme incrémentale des équations constitutives prend alors la forme suivante:

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = L : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \quad [\text{Eq. 6}]$$

où l'opérateur tangent L est obtenu en suivant la démarche classique en plasticité:

$$L = 3k_1J + 2k_2K - 2k_3\underline{\underline{n}} \otimes \underline{\underline{1}} - 2k_4\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{n}} - 2k_5\underline{\underline{n}} \otimes \underline{\underline{n}} \quad [\text{Eq. 7}]$$

avec les paramètres k_i , $i=1...5$, donnés:

$$k_1 = k \left(1 - \frac{\alpha^p \beta^p}{h} \right), \quad k_2 = \mu, \quad k_3 = \frac{\mu}{h} \sqrt{\frac{2}{3}} \alpha^p k, \quad k_4 = \frac{\mu}{h} \sqrt{\frac{2}{3}} \beta^p k \quad \text{et} \quad k_5 = \frac{6\mu}{h}.$$

On a également:

$$n = \frac{\underline{\underline{s}}}{\sqrt{\underline{\underline{s}} : \underline{\underline{s}}}} \text{ et } h = \alpha^p \beta^p k + 3\mu - (p - c_p) \frac{d\alpha^p}{d\gamma^p}.$$

3.2. COMPORTEMENT ELASTIQUE ENDOMMAGEABLE DE LA PHASE CALCITE

L'objectif de ce paragraphe est de formuler un modèle d'endommagement isotrope prenant en compte les effets unilatéraux causés par la fermeture des microfissures. Une forme quadratique a été choisie classiquement pour le potentiel thermodynamique (ou énergie libre) :

$$W(\underline{\underline{\varepsilon}}, d) = \frac{1}{2} \underline{\underline{\varepsilon}} : C(d) : \underline{\underline{\varepsilon}} \quad [\text{Eq. 8}]$$

où d est un paramètre scalaire positif et croissant qui caractérise l'état de dégradation des grains de calcite. En raison des effets unilatéraux induits par l'ouverture/fermeture des fissures, $C(d)$, tenseur de rigidité élastique, dépend de manière cruciale de l'état ouvert ou fermé des défauts existant dans le matériau. En prenant en compte la condition mathématique de continuité sur le potentiel W ((Curnier *et al.*, 1995) et (Weleman *et al.*, 2003)) et en accord avec des considérations micromécaniques, on montre que:

$$C(d) = \begin{cases} 3K(d)J + 2G(d)K & \text{si } \text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) > 0 \\ 3K_0(d)J + 2G(d)K & \text{si } \text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) \leq 0 \end{cases} \quad [\text{Eq. 9}]$$

Afin d'apporter une base physique au modèle, nous avons choisi $K(d)$ et $G(d)$ respectivement les modules de compressibilité et cisaillement à partir des résultats établis en micromécanique pour les milieux microfissurés par (Ponte-Castaneda *et al.*, 1995). Ces résultats ont l'intérêt de prendre en compte non seulement les interactions entre les microfissures mais aussi leur distribution spatiale, considérée ici isotrope.

La fonction de seuil f est choisie sous la forme:

$$f(F^d, d) = F^d - H(d) \quad [\text{Eq. 10}]$$

où F^d est la force thermodynamique associée à d et obtenue par dérivation du potentiel thermodynamique par rapport à la variable d et où H est un scalaire strictement positif:

$$\begin{cases} H(d) = H_0(1 + \eta d) \\ \text{avec } H_0 > 0 \text{ et } \eta > 0 \end{cases} \quad [\text{Eq. 11}]$$

On en déduit la forme incrémentale de la loi d'endommagement:

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = L : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \quad [\text{Eq. 12}]$$

où L représente l'opérateur tangent du modèle décrivant la réponse locale des grains de calcite:

$$L = 3k_1 J + 2k_2 K - 2k_3 (\underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{e}}) - 2k_4 \underline{\underline{e}} \otimes \underline{\underline{e}} \quad [\text{Eq. 13}]$$

$\underline{\underline{e}}$ représente la partie déviatorique du tenseur de déformation $\underline{\underline{\varepsilon}}$.

$$k_2 = G(d), \quad k_4 = -\frac{2(G'(d))^2}{h},$$

$$\begin{cases} k_1 = K(d) - \frac{(K'(d)tr\underline{\underline{\varepsilon}})^2}{h}, & k_3 = -\frac{2G'(d)K'(d)}{h} & \text{si } tr(\underline{\underline{\varepsilon}}) > 0 \\ k_1 = K_0, & k_3 = 0 & \text{si } tr(\underline{\underline{\varepsilon}}) \leq 0 \end{cases}$$

avec $h = H_0\eta + K''(d)tr\underline{\underline{\varepsilon}}\delta + G''(d)e$

4. APPROCHE INCREMENTALE

L'objectif de ce paragraphe est de formuler la loi constitutive macroscopique de l'argilite du Callovo-Oxfordien à partir de l'approche incrémentale de (Hill, 1965). La loi de comportement locale est considérée sous la forme incrémentale suivante:

$$\forall \underline{\underline{x}} \in (r), \dot{\underline{\underline{\sigma}}}(\underline{\underline{x}}) = L_r : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}(\underline{\underline{x}}) \quad [\text{Eq. 14}]$$

De façon à pouvoir utiliser la solution du problème de l'inclusion équivalente d'Eshelby, on néglige classiquement dans [Eq. 14] l'hétérogénéité du champs de déformation plastique autour et dans l'inclusion et on considère que chaque phase (r) (avec $r=0$ qui correspond à la matrice élastoplastique, $r=1$ à la phase calcite et $r=2$ à la phase quartz.) a un module uniforme L_r . On démontre alors que l'incrément de contrainte macroscopique s'écrit:

$$\dot{\underline{\underline{\sigma}}} = L^{hom} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}, \text{ avec } L^{hom} = \sum_r f_r L_r : A_r, r = 0, 2 \quad [\text{Eq. 15}]$$

où A_r est le tenseur de localisation des déformations correspondant à la phase (r); il relie le taux de déformation macroscopique au taux de déformation local de la phase (r). On a adopté dans cette étude le schéma de (Mori *et al.*, 1973):

Le tenseur $P_{I_r}^0$ dépend de la géométrie sphérique de l'inclusion (r) et de l'opérateur tangent L_0 . Les grains de calcite et de quartz ayant la même morphologie, on notera $P_{I_1}^0 = P_{I_2}^0 = P_I^0$. Le tenseur $P_{I_r}^0$ est classiquement relié au tenseur d'Eshelby S^E par: $P_I^0 = S^E(L_0) : L_0^{-1}$.

On notera que l'approche incrémentale conduit à une réponse éloignée de la solution de référence donnée par éléments finis, dans le cadre d'une hypothèse d'homogénéisation périodique. Une amélioration des résultats peut être obtenue en adoptant comme dans (Doghri *et al.*, 2003) une version isotrope dans laquelle le tenseur d'Eshelby est évalué à partir d'une approximation isotrope des modules tangents.

Dans le cas d'une matrice de type Drucker-Prager, nous avons recours à la méthode d'isotropisation générale décrit dans (Bornert *et al.*, 2001):

$$L_0^{iso} = (J :: L_0)J + \frac{1}{5}(K :: L_0)K \quad [\text{Eq. 16}]$$

En remplaçant L_0 par son expression [Eq. 7] dans [Eq. 16], on a en charge plastique:

$$L_0^{iso} = 3k_T J + 2\mu_T K \quad [\text{Eq. 17}]$$

$$k_T = k(1 - \frac{k\alpha^p \beta^p}{h}) \text{ et } \mu_T = \mu(1 - \frac{3\mu}{5h})$$

5. CALIBRATION ET VALIDATION EXPERIMENTALE DU MODELE

L'objectif de cette dernière partie est de tester l'aptitude du modèle formulé à prédire le comportement mécanique de l'argilite du Callovo-Oxfordien et à reproduire son comportement sous différents trajets de chargement et pour différentes fractions volumiques d'inclusions minérales.

Une première étape consiste à déterminer les paramètres du modèle proposé: 6 coefficients élastiques, 7 paramètres impliqués dans le comportement de la matrice argileuse et 2 pour caractériser l'évolution de l'endommagement dans les grains de calcite. L'identification des paramètres a été réalisée par calage sur la courbe de compression simple à la profondeur 466.8m [Fig. 2]. Les valeurs retenues à l'issue de cette procédure sont les suivantes avec les notations précédemment explicitées: $E_0 = 3GPa$, $\nu_0 = 0.3$, $\alpha_0^p = 0.05$, $\alpha_m^p = 0.95$, $b = 300$, $\beta_0^p = -1.8$, $\beta_3^p = 0.3$, $b' = 400$, $c_p = 14$, $E_1 = 95GPa$, $\nu_1 = 0.27$, $h = 0.001$, $\eta = 150$, $E_2 = 101GPa$, $\nu_2 = 0.06$.

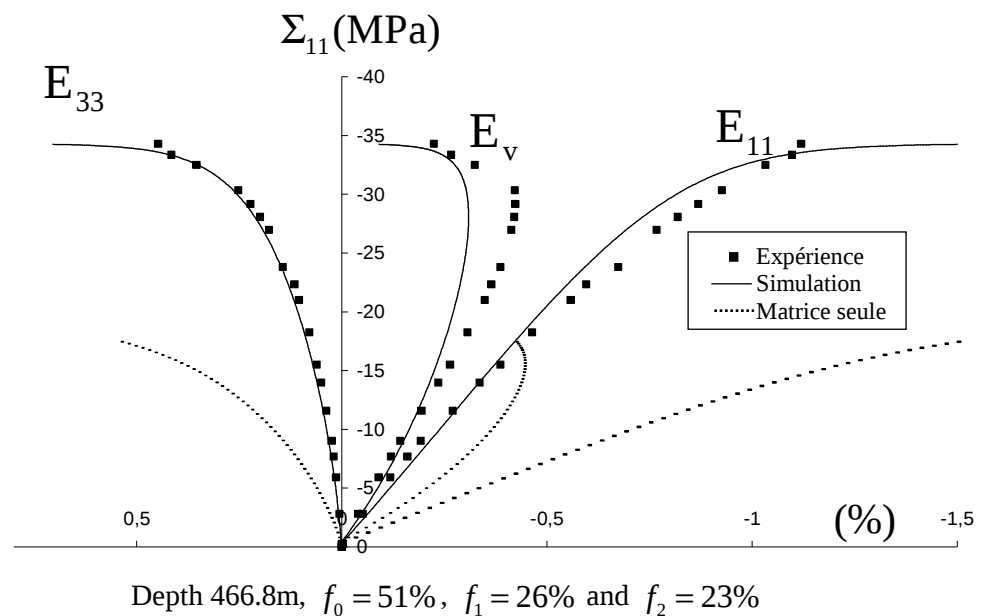


Figure 2 : Test de compression uniaxiale.

Une fois ce calage effectué, le modèle est appliqué avec le même jeu de paramètres sur des essais de compression triaxiaux pour des pressions de confinement de 5 et 10MPa ([Fig. 3] a et b) et sur des essais de compression proportionnels et d'extension latérale ([Fig.3] a et b) pour des fractions volumiques différentes. On remarque une bonne concordance générale entre les prédictions du modèle et les données expérimentales.

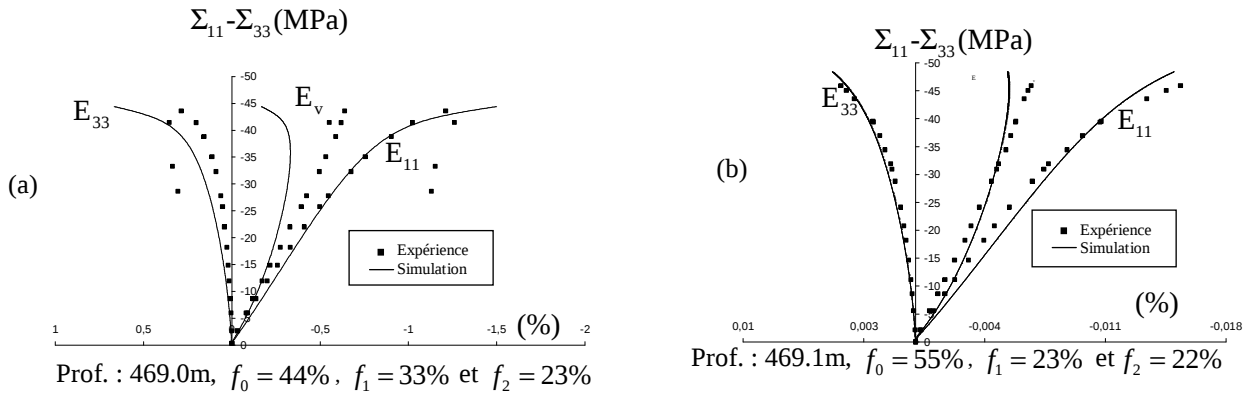


Figure 3 : Tests de compression triaxiaux - a) 5MPa et b) 10MPa de pression de confinement.

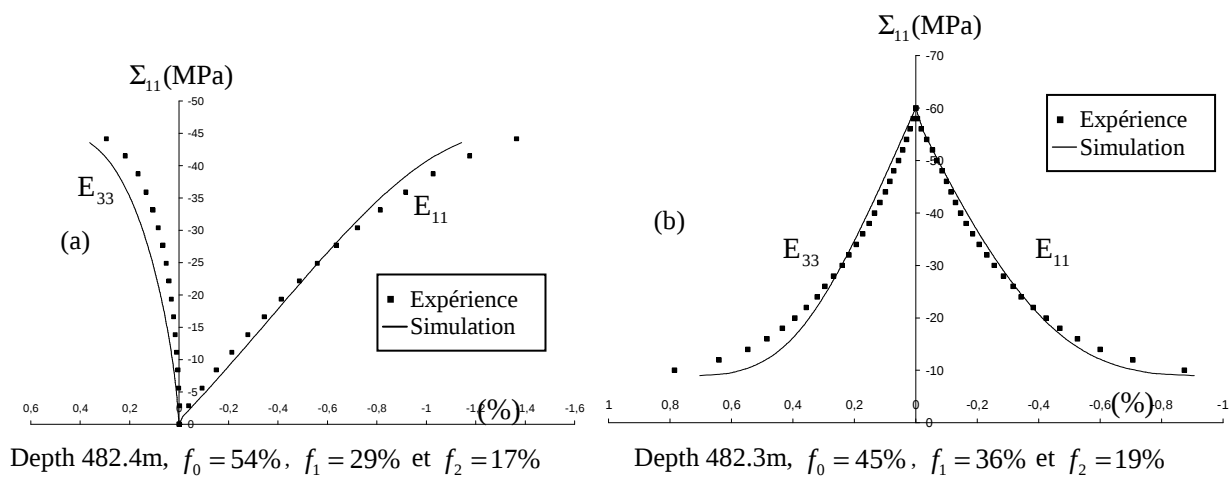


Figure 3 : a) Test de compression proportionnelle pour un rapport $k = \frac{\Sigma_{11}}{\Sigma_{33}} = 10$ et

b) Test d'extension latérale pour une pression de confinement de 60MPa..

Afin d'évaluer ses capacités prédictives, le modèle micromécanique est implémenté dans un code d'éléments finis Abaqus par l'intermédiaire d'une routine utilisateur UMAT pour la simulation de galerie de stockage souterrain.

6. BIBLIOGRAPHIE

- Bornert, M., Bretheau, T., Gilormini, P. (1995): "Homogénéisation en mécanique des matériaux 1. Matériaux léatoires élastiques et milieux périodiques.", Hermes Sciences Europe Ltd.
- Doghri, I., Ouair, A. (2003): "Homogenization of two-phase elasto-plastic composite materials and structures: Study of tangent operators, cyclic plasticity and numerical algorithms", *Int. J. of Solids and Structures*, 40(7), pp. 1681-1712.
- Drucker, D-C., Prager, W. (1952): "Soil mechanics and plastic analysis or limit design.", *Quarterly of Appl.Math.*, 10, pp. 157-175
- Chaboche, J.L., Kanouté, P. (2005): "On the capabilities of mean-field approaches for the description of plasticity in metal matrix composites", *Int. J. Plasticity*, 21(7), pp. 1409-1434.

- Chiarelli, A.S., Shao, J.F., Hoteit, N. (2003): "Modeling of elastoplastic damage behavior of a claystone", *Int. J. Plasticity*, 19, pp. 23-45.
- Curnier, A., He, Q.C., Zysset, P. (1995): "Conewise linear elastic materials.", *J.Elasticity*, 37, pp. 1-38
- Hill, R. (1965): "Continuum Micro-mechanics of elastoplastic polycrystals", *J. of Mech. Phys. Solids*, 13, pp. 89-101.
- Mori, T, Tanaka, K (1973): "Average stress in a matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions.", *Acta Metall. Mater.*, 42(7), pp. 597-629
- Ponte-Castaneda, P., Willis, J-R. (1995): "The effect of spatial distribution of effective behavior of composite materials and cracked media.", *J.Mech.Phys.Solids*, 43, pp. 1919-1951
- Weleman, H., Cormery, F. (2003): "An alternative 3D model for damage induced anisotropy and unilateral effect in microcracked materials", *J. Phys*, 105, pp. 329-336