

# Modélisation Numérique Multi-échelle du Comportement de l'Argilite du Callovo-Oxfordien

S. Abou Chakra<sup>1</sup>, B. Bary<sup>2</sup>, E. Lemarchand<sup>3</sup>, S. Granet<sup>4</sup>, J. Talandier<sup>5</sup>

<sup>1</sup> Service de Recherche en Corrosion et Comportement des Matériaux, Université Paris-Saclay, CEA, France, sarah.abouchakra@cea.fr

<sup>2</sup> Service de Recherche en Corrosion et Comportement des Matériaux, Université Paris-Saclay, CEA, France, benoit.bary@cea.fr

<sup>3</sup> Laboratoire Navier, Ecole des Ponts ParisTech, France, eric.lemarchand@enpc.fr

<sup>4</sup> Département ERMES, EDF - R&D, France, sylvie.granet@edf.fr

<sup>5</sup> ANDRA, France, jean.talandier@andra.fr

**Résumé** — Cette étude s'inscrit dans le contexte du stockage de déchets nucléaires en site profond dans l'argilite du Callovo-Oxfordien. La modélisation du comportement de la zone d'argilite située à proximité des galeries, endommagée lors de leur creusement, constitue l'objet de notre étude. Une approche numérique multi-échelle basée sur la méthode FE<sup>2</sup> est proposée afin de simuler le comportement de l'argilite endommagée sur deux échelles. Les principaux mécanismes responsables du colmatage des fissures par le processus d'hydratation sont examinés.

**Mots clefs** — Modélisation Multi-échelle, Colmatage des fissures, Callovo-Oxfordien.

## 1. Introduction générale

Dans le cadre du stockage des déchets radioactifs, l'Andra a construit depuis le début des années 2000 un laboratoire de recherche souterrain à Bure (Meuse/Haute-Marne, France) à une profondeur de 500 m. L'argilite du Callovo-Oxfordien (COx) située à une profondeur entre 420 à 550 m, est en effet considérée comme une roche hôte potentielle pour le stockage de déchets de haute activité, compte tenu de ses propriétés de confinement élevées et de sa très faible perméabilité intrinsèque, de l'ordre de  $10^{-20}$  m<sup>2</sup>. Le processus de creusement des galeries souterraines génère des fissures macroscopiques dans la roche hôte au voisinage de leurs parois. Il en résulte la formation d'une zone endommagée caractérisée par la présence de fissures étendues qui peuvent augmenter considérablement la conductivité hydraulique de l'argilite.

Cependant, il a été expérimentalement prouvé que les capacités de gonflement et de fluage de l'argilite lui permettent de colmater naturellement les fissures du fait du processus de réhydratation de la roche dans la phase de post-fermeture. Ce processus de réhydratation se produit à la fin de la phase d'exploitation et de l'arrêt des systèmes de ventilation à l'origine du séchage de la roche hôte.

Les objectifs de ce travail sont d'améliorer la description des mécanismes d'auto-colmatage de l'argilite et de développer un modèle numérique multi-échelle permettant de simuler la réponse d'une zone représentative autour d'une galerie au cours de la phase de post-fermeture. La description précise du comportement du matériau se fait à l'échelle inférieure en utilisant des volumes élémentaires représentatifs (VER). Les maillages 3D des VER sont constitués de la matrice argileuse dans laquelle sont dispersées des fissures de forme et de taille définies et caractérisées par un paramètre de densité de fissure. Le modèle de comportement défini à l'échelle des VER est viscoélastique-viscoplastique et permet la prise en compte du phénomène de fluage qui favorise les propriétés d'auto-colmatage de l'argilite. Dans ce modèle, le gonflement induit par l'hydratation est représenté par une déformation libre fonction de la pression capillaire et de l'évolution du degré de saturation. Une procédure numérique basée sur une méthode FE<sup>2</sup> modifiée est utilisée dans le but de simuler la réponse d'une région de galerie macroscopique, qui est discrétisée en zones avec des paramètres de densité de fissures spécifiques estimés à partir de données expérimentales.

## 2. Étude du comportement du VER

### 2.1. Génération des maillages 3D

La procédure de génération d'échantillons 3D est basée sur une distribution aléatoire fissures plates de forme et de taille prescrites à l'intérieur d'une boîte, caractérisées par un paramètre de densité de fissures [1]. Tout d'abord, des fissures circulaires ont été introduites, se rapprochant de celles considérées dans les calculs analytiques avec schémas d'homogénéisation [2]. Le maillage généré dans Salome<sup>1</sup> est exporté dans Cast3M<sup>2</sup> pour faire les calculs EF et déterminer les propriétés mécaniques du matériau. La géométrie définie est périodique et des conditions aux limites uniformes et périodiques ont été testées dans Cast3M. Un raffinement du maillage est systématiquement imposé sur les surfaces des fissures, afin d'améliorer la qualité des résultats de la simulation. Les points suivants ont été évalués : la convergence du maillage et la représentativité des VER.

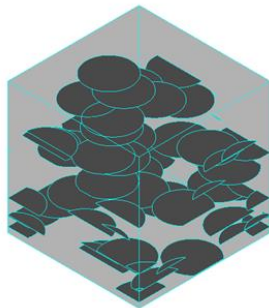


Figure 1 – Distribution parallèle des fissures dans le plan

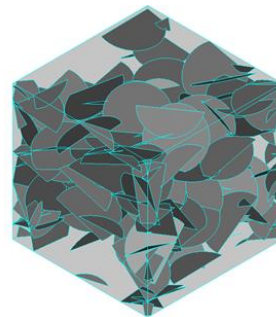


Figure 2 – Distribution des fissures orientées aléatoirement de le VER

Dans le cadre de cette étude, les fissures aplaties sont représentées par des cavités d'épaisseur nulle dans le VER, qui réduisent les propriétés mécaniques du matériau. Une distribution parallèle des fissures engendre un comportement anisotrope du matériau (Figure 1). Les modules affectés par les fissures sont les coefficients de cisaillement et le module d'Young perpendiculaire au plan de fissuration. L'orientation aléatoire des fissures dans la matrice d'argilite isotrope entraîne un comportement isotrope du matériau (Figure 2). En présence des fissures orientées aléatoirement, la connectivité et les intersections entre les fissures peuvent créer des chemins de percolation nécessitant une analyse approfondie afin de déterminer un seuil de percolation à partir duquel les propriétés mécaniques et de transport du matériau percolent.

### 2.2. Modèle de comportement viscoélastique-viscoplastique

Le choix d'un modèle numérique viscoélastique-viscoplastique [3] est motivé par la nécessité de représenter le fluage de l'argilite, qui est l'un des mécanismes principal responsables du colmatage. La partie viscoélastique linéaire permet de représenter le comportement à court terme, tandis que la partie viscoplastique [4] est chargée de reproduire le comportement à long terme. La viscoplasticité est introduite dans la mesure où le comportement à long terme concerne une période largement supérieure à cent ans, ce qui est difficilement réalisable à l'aide d'un modèle viscoélastique linéaire [5].

---

<sup>1</sup> <https://www.salome-platform.org>

<sup>2</sup> <http://www-cast3m.cea.fr/>

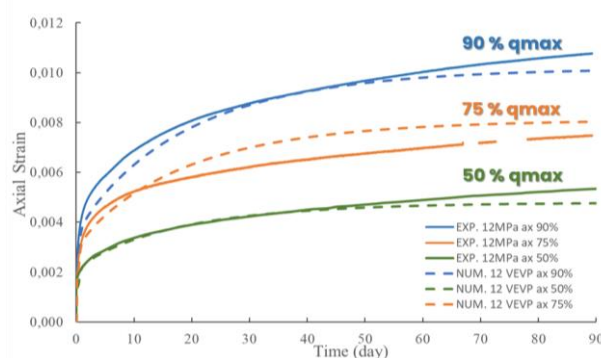


Figure 3 – Résultats de l'essai de fluage, données expérimentales [8] comparées aux résultats numériques avec trois cas de chargement,  $P_c=12$  MPa

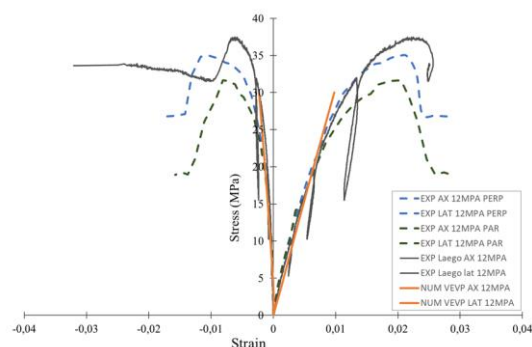


Figure 4 – Résultats des essais de compression triaxiale [8], comparaison des résultats numériques/expérimentaux avec  $P_c=12$  MPa

Le modèle utilisé est implémenté dans Mfront<sup>3</sup>, il a fallu calibrer les paramètres du modèle pour représenter le comportement de l'argilite du COx. Deux essais largement utilisés dans la littérature pour le processus d'identification [6] [7] ont été adoptés pour faire l'identification des paramètres du modèle [8]. Le premier essai d'identification est un essai de fluage avec une pression de confinement de 12 MPa et la charge déviatorique est relative à la charge maximale à laquelle le matériau peut supporter (Figure 3). L'essai de fluage reproduit le comportement à long terme et ce dernier considère trois chargements : 50, 75 et 90 % de la contrainte déviatorique maximale. Le deuxième essai choisi est un essai de compression triaxiale avec une pression de confinement de 12 MPa (Figure 4). Il s'agit de représenter le comportement de l'argilite à court terme nous ne visons qu'à modéliser le comportement avant l'atteinte du pic. En effet, dans cette étude, la propagation des fissures et le comportement du matériau à la rupture ne sont pas abordés.

### 2.3. Représentation du gonflement de la matrice

Le gonflement induit par l'hydratation se produit à l'échelle de l'argilite non endommagée, c'est-à-dire à l'échelle microscopique au niveau des particules d'argile. La description de la structure du matériau est essentielle pour comprendre l'origine des mécanismes responsable du colmatage des fissures. Les interactions particulières des sols argileux avec l'eau, et plus précisément leur comportement de gonflement, sont dues à la présence d'interactions physico-chimiques entre les minéraux argileux et les molécules d'eau [9]. Afin d'éviter le recours à des échelles trop réduites pour donner une représentation physique du gonflement résultant des interactions physico-chimiques, on limite la description à une déformation libre macroscopique qui caractérise le gonflement sur la base de données expérimentales [10]. Sur la base de l'hypothèse de petites déformations, la première équation représente l'incrément de déformation total ' $d\epsilon^{tot}$ ', qui correspond au modèle numérique choisi, soit dans ce cas le modèle viscoélastique-viscoplastique (1). Le mécanisme de gonflement est représenté par un incrément de déformation libre ' $d\epsilon^*$ ' (2) rajouté à l'incrément de déformation totale, qui quantifie le gonflement dû à la réhydratation dans le cadre étudié. Le modèle numérique choisi contient une partie élastique linéaire représentée par l'incrément ' $d\epsilon_M^e$ ', une partie viscoélastique linéaire ' $d\epsilon_M^{ve}$ ' et une partie viscoplastique non linéaire ' $d\epsilon_M^{vp}$ '.

<sup>3</sup> <http://tfel.sourceforge.net/gallery.html>

$$d\varepsilon^{tot} = d\varepsilon_M^e + d\varepsilon_M^{ve} + d\varepsilon_M^{vp} + d\varepsilon^* \quad (1)$$

$$d\varepsilon^* = f \times \exp\left(\frac{\beta}{P_c}\right) \quad (2)$$

$$\sigma_{tot} = \sigma_{eff} + bS_w P_c I \quad (3)$$

Une formulation de type Biot étendue pour le cas non saturé (3) est utilisé pour décrire les effets de la pression capillaire ' $P_c$ ' et le degré de saturation ' $S_w$ ' sur la contrainte totale ' $\sigma_{tot}$ '. Le comportement de la matrice est considéré isotrope, le coefficient de Biot ' $b$ ' constant et égal à 0,9 [11].

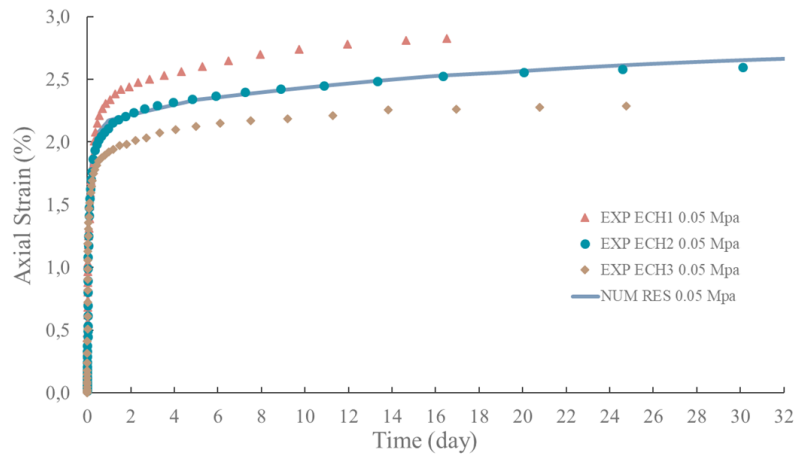


Figure 5 – Résultats de l'essai œdométrique [12], échantillons humidifiés sous un faible chargement verticale de 0.05 MPa

Un essai œdométrique est choisi pour faire l'identification des paramètres de gonflement [12]. Trois échantillons sont testés en appliquant les mêmes conditions aux limites et les résultats expérimentaux sont présentés dans la Figure 5. Les échantillons sont mouillés avec de l'eau sous une faible contrainte axiale constante appliquée et une humidité relative contrôlée de 85 à 100 %. Les paramètres de gonflement ' $f$ ' et ' $\beta$ ' sont déterminés à partir des résultats expérimentaux, nous avons choisi d'identifier les paramètres suivant le graphe intermédiaire obtenu par les trois courbes expérimentales (Figure 5).

### 3. Procédure de calcul multi-échelle

#### 3.1. Approche numérique

L'objectif principal de cette étude est de modéliser le comportement macroscopique de l'argilite en intégrant les principaux mécanismes responsables de l'auto-colmatage : le fluage et le gonflement ainsi qu'en définissant une distribution des fissures dans la matrice de l'argilite caractérisé par le paramètre de densité de fissures défini à l'échelle du VER. En utilisant une approche numérique multi-échelle basée sur la méthode FE<sup>2</sup> [13], il est possible de simuler le comportement mécanique macroscopique. La méthode FE<sup>2</sup>, largement utilisée dans la littérature, établit que pour chaque point de Gauss macroscopique, un calcul de VER à l'échelle inférieure est nécessaire. Il s'agit d'une méthode très

fiable produisant des résultats de grande précision, mais extrêmement coûteuse en temps de calcul, en particulier avec un modèle de comportement non linéaire et une microstructure hétérogène comportant un grand nombre d'éléments de maillage.

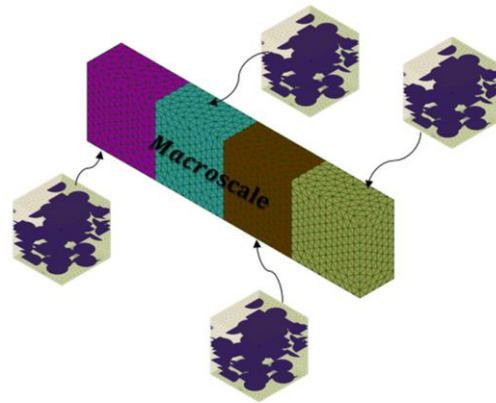


Figure 6 – Schématisation de la discrétisation de la macrostructure en différentes zones associées respectivement aux VER

Dans ce contexte, nous utilisons une méthode de discrétisation par zone qui se rapproche de la méthode  $FE^2$  en divisant la structure macroscopique en zones (Figure 6) sur la base des propriétés et de l'état du matériau [14] [15], telles qu'un état de contrainte quasi-homogène dans la zone désignée et un paramètre de densité de fissure constant. Cette discrétisation pourrait également dépendre du degré de saturation dans la mesure où nous cherchons à modéliser le processus de resaturation et ses effets sur les propriétés mécaniques. Il en résulterait que chaque zone macroscopique nécessiterait un calcul de VER, ce qui réduirait significativement le temps de calcul.

### 3.2. Implémentation de l'algorithme multi-échelle

Une fois la théorie formulée, l'étape suivante consiste à implémenter l'algorithme dans Cast3M qui permettra de communiquer les informations depuis l'échelle inférieure des VER à l'échelle macroscopique. Dans cet algorithme, nous discrétisons les pas de temps, étant donné que nous traitons un problème non linéaire, et pour passer d'un pas de temps  $i$  à un pas de temps  $i+1$ , il faut calculer à l'échelle des VER associés à chaque zone macroscopique une déformation moyennée, une contrainte moyennée et une matrice tangente calculée par perturbation. Ces informations sont ensuite confrontées à un critère de convergence relatif basé sur la déformation de fluctuation calculée à chaque itération. Dans le cas où les informations communiquées vérifient le critère de convergence, les valeurs sont sauvegardées et il est possible de passer au pas de temps suivant.

Un calcul élastique offline est effectué pour déterminer une discrétisation initiale de la macrostructure en se basant sur les propriétés mécaniques dans une zone macroscopique. Ensuite, une première estimation est établie au niveau des VER et les informations sont communiquées à l'échelle macroscopique où des calculs de résidus sont réalisés pour vérifier l'équilibre macroscopique. La déformation homogène macroscopique est corrigée par le calcul de la déformation de fluctuation à partir de la matrice tangente associée au comportement du VER et du résidu. Les contraintes de fluctuation calculées à partir des déformations de fluctuation sont utilisées pour corriger la contrainte homogène associée à l'échelle macroscopique afin de garantir l'équilibre macroscopique. Enfin, si le critère de convergence est satisfait, le processus itératif peut se poursuivre pour les pas de temps suivants.



Figure 7 – Représentation de la macrostructure considérée avec les conditions limites appliquées et le chargement dans le plan XOZ

Afin de tester la mise en œuvre de l'algorithme, des tests de vérification ont été réalisés dans un contexte simplifié pour valider la méthode. En considérant une poutre encastree (Figure 7) et une microstructure homogène, la méthode de calcul multi-échelle est comparée à un modèle macroscopique classique de référence. Un chargement ' $F_z$ ' est appliqué à l'extrémité de la poutre encastree et un nombre total de 40 pas de temps est considéré. Le comportement du VER homogène est viscoélastique-viscoplastique et les résultats sont comparés à la solution macroscopique de référence pour tous les pas de temps considérés. Dans ce contexte, le déplacement maximal situé au niveau de la surface SURFX0 est mesuré en fonction du temps, ainsi que la déformation maximale constatée au niveau de la surface SURFX1 (Figure 7).

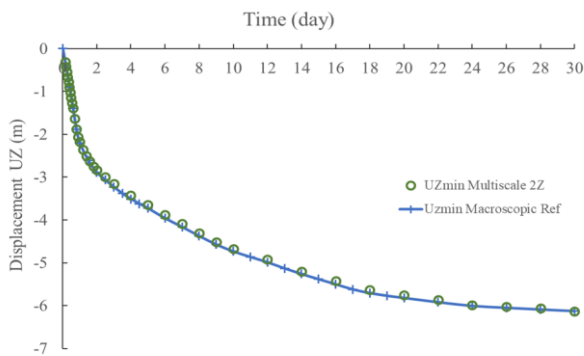


Figure 8 – Déplacement maximal  $U_z$  en fonction du temps, les calculs multi-échelles (2 zones) comparés à la solution macroscopique

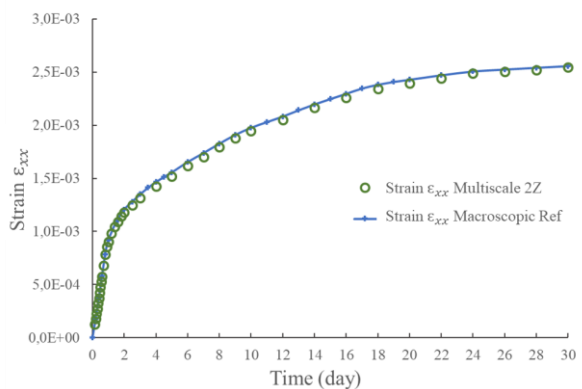


Figure 9 – Déformation maximale dans la direction  $xx$  en fonction du temps, calculs multi-échelles (2 zones) comparés à la solution macroscopique

Les résultats obtenus présentent une bonne concordance entre la solution macroscopique et les résultats de la procédure de calcul multi-échelle pour le cas simple étudié. Avec une discrétisation à deux zones, le comportement de la macrostructure est bien reproduit. Ceci est illustré par le graphique du déplacement maximal ' $U_z$ ' en fonction du temps (Figure 8) dans le contexte de comparaison de la solution macroscopique avec la procédure de calcul multi-échelle. Les mêmes conclusions peuvent être établies en représentant la déformation maximale ' $\epsilon_{xx}$ ' en fonction du temps (Figure 9), comparant les résultats macroscopiques avec les calculs multi-échelles. Il s'agit donc de premiers résultats encourageants qui permettent de valider la méthode numérique.

## 4. Conclusions et perspectives

Pour conclure, la méthode d'homogénéisation numérique basée sur la méthode FE<sup>2</sup> permet de faire remonter le comportement du matériau de l'échelle mésoscopique à celui de la macrostructure. Ceci nous permettra d'atteindre un des objectifs principaux du projet, qui consiste à simuler le comportement à long terme d'un élément de galerie. La modélisation à l'échelle mésoscopique est réalisée en considérant un VER en 3D. Des fissures discrètes circulaires sont distribuées aléatoirement dans la matrice d'argilite, définissant un paramètre de densité de fissures pour représenter l'état d'endommagement du matériau. La géométrie et le maillage 3D sont générés dans Salome et, à l'aide de Cast3M, des calculs par éléments finis sont effectués pour déterminer les propriétés mécaniques et la matrice tangente du matériau. Le modèle rhéologique non linéaire utilisé prend en compte le mécanisme de fluage de la matrice argileuse, l'un des principaux mécanismes responsables de l'auto-colmatage. La présence d'une partie viscoplastique dans ce modèle permettra de prendre en compte les effets de la déformation différée. Le gonflement induit par l'hydratation est représenté par une déformation libre fonction de la pression capillaire, et est directement affecté par le processus de resaturation de la roche argileuse. Le passage à l'échelle macroscopique se fait en communiquant les résultats des calculs de l'échelle du VER vers la zone macroscopique associée à travers la procédure numérique multi-échelle développée dans Cast3M.

En perspective, des méthodes d'homogénéisation analytiques seront utilisées dans un cadre viscoélastique linéaire, afin d'effectuer des comparaisons numériques/analytiques dans un contexte simplifié. En outre, l'aspect de la fermeture des fissures sera intégré dans notre approche numérique en utilisant des modèles de zones cohésives, avec pour objectif le recouvrement d'une partie de la rigidité après la fermeture des fissures. Un aspect essentiel des études sur l'auto-colmatage est le calcul du transport et de la perméabilité. Après la fermeture des fissures, la perméabilité initiale de la matrice correspondant au matériau sain pourra être recouverte en partie ou totalement. Il s'agira alors d'intégrer cet aspect dans la procédure de simulation multi-échelle. Enfin, l'objectif visé est de disposer d'un modèle complet permettant de simuler le comportement d'un élément de galerie dans la phase de resaturation.

## 5. Références

- [1] B. Budiansky and R. J. O'connell, "Elastic moduli of a cracked solid," *International Journal of Solids and Structures*, vol. 12, no. 2, pp. 81–97, Jan. 1976.
- [2] J. Bluthé, B. Bary, and E. Lemarchand, "Closure of parallel cracks: Micromechanical estimates versus finite element computations," *European Journal of Mechanics - A/Solids*, vol. 81, p. 103952, May 2020.
- [3] F. Bernachy-Barbe and B. Bary, "Effect of aggregate shapes on local fields in 3D mesoscale simulations of the concrete creep behavior," *Finite Elements in Analysis and Design*, vol. 156, pp. 13–23, Apr. 2019.
- [4] P. Perzyna, "Fundamental Problems in Viscoplasticity," in *Advances in Applied Mechanics*, G. G. Chernyi, H. L. Dryden, P. Germain, L. Howarth, W. Olszak, W. Prager, R. F. Probstein, and H. Ziegler, Eds., Elsevier, pp. 243–377, 1966.
- [5] S. Rahal, A. Sellier, and G. Casaux-Ginestet, "Poromechanical consolidation and basic creep interactions around tunnel excavation," *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, vol. 94, pp. 55–63, Apr. 2017.
- [6] S. Cuvilliez, I. Djouadi, S. Raude, and R. Fernandes, "An elastoviscoplastic constitutive model for geomaterials: Application to hydromechanical modelling of claystone response to drift excavation," *Computers and Geotechnics*, vol. 85, pp. 321–340, May 2017.
- [7] M. Mánica, A. Gens, J. Vaunat, and D. F. Ruiz, "A time-dependent anisotropic model for argillaceous rocks. Application to an underground excavation in Callovo-Oxfordian claystone," *Computers and Geotechnics*, vol. 85, pp. 341–350, May 2017.

- [8] G. Armand, N. Conil, J. Talandier, and D. M. Seyedi, "Fundamental aspects of the hydromechanical behaviour of Callovo-Oxfordian claystone: From experimental studies to model calibration and validation," *Computers and Geotechnics*, vol. 85, pp. 277–286, May 2017.
- [9] S. Cariou, L. Dormieux, and F. Skoczylas, "An original constitutive law for Callovo-Oxfordian argillite, a two-scale double-porosity material," *Applied Clay Science*, vol. 80–81, pp. 18–30, Aug. 2013.
- [10] H. Wang, C. La Borderie, D. Gallipoli, and M.-N. Vu, "Numerical modelling of the hydro-mechanical behaviour of unsaturated COx," *Geotechnical Research*, vol. 8, no. 1, Art. no. 1, Mar. 2021.
- [11] M. Belmokhtar, P. Delage, S. Ghabezloo, A.-M. Tang, H. Menaceur, and N. Conil, "Poroelasticity of the Callovo–Oxfordian Claystone," *Rock Mech Rock Eng*, vol. 50, no. 4, Art. no. 4, Apr. 2017.
- [12] F. Zhang, Y.-J. Cui, N. Conil, and J. Talandier, "Assessment of Swelling Pressure Determination Methods with Intact Callovo-Oxfordian Claystone," *Rock Mech Rock Eng*, vol. 53, no. 4, pp. 1879–1888, Apr. 2020.
- [13] F. Feyel, "Multiscale FE2 elastoviscoplastic analysis of composite structures," *Computational Materials Science*, pp. 344–354, Dec. 1999.
- [14] M. Benaimeche, J. Yvonnet, B. Bary, and Q. He, "A k-means clustering machine learning-based multiscale method for anelastic heterogeneous structures with internal variables," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 123, Jan. 2022.
- [15] Z. Liu, M. A. Bessa, and W. K. Liu, "Self-consistent clustering analysis: An efficient multi-scale scheme for inelastic heterogeneous materials," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 306, pp. 319–341, Jul. 2016.