
Modélisation mécanique avec MATLAB® et Cast3M du gonflement d'argiles sous contrainte

GUILLEN Chloé , HANSEN MARIN Belen
UE : MU4MES05
July 13, 2021

Sommaire

1	Introduction	2
2	L'organisation texturale des montmorillonites	2
2.1	Organisation de la structure	2
2.2	Espaces poreux	3
2.3	Mode d'association des particules	3
2.4	Défauts	3
3	Analyse d'images	4
3.1	Traitemet et amélioration d'images	4
3.2	Coordonnées des contours des feuillets et de la particule	6
3.2.1	Coordonnées des contours des feuillets	6
3.2.2	Création d'une demi-épaisseur pour chaque feillet	7
3.2.3	Contours extérieurs de la particule	7
3.2.4	Coordonnées des contours de l'assemblage de particules	8
3.3	Obtention des caractéristiques des feuillets ou des particules	9
4	Castem	9
4.1	Obtention de la microstructure des feuillets	9
4.2	Homogénéisation	12
4.3	Tenseur de rigidité effectif	18
4.4	Le réseau	19
5	Conclusion	25
References		26

1 Introduction

Le phénomène de gonflement des minéraux argileux sous certaines conditions de saturation est l'une des causes de destructions les plus importantes dans notre environnement. Nous vous proposons dans cette étude d'exploiter et de comprendre des observations multi-échelles de résultats d'essais existant dans des simulations aux éléments finis du comportement mécanique des smectites sous différents états de contraintes et d'hydratation.

2 L'organisation texturale des montmorillonites

Nous nous intéresserons dans notre étude aux montmorillonites. Ces dernières sont une espèce d'argiles faisant partie de la famille des smectites qui sont des phyllosilicates. Cette classe d'argile se compose par un empilement de deux couches tétraédriques ($(S_iO_4)^{4-}$) encadrant une couche octaédrique (Al^{3+}). Les couches tétraédriques sont reliées à la couche octaédrique par la mise en commun de trois oxygènes. Il faut savoir que cet argile peut se trouver dans différents domaines d'activité tel que dans les fluides de forage, dans les pansements gastrique ou encore dans les crèmes.

2.1 Organisation de la structure

En fonction de l'ordre de grandeur, on peut distinguer trois unités structurales. (Fig 1)

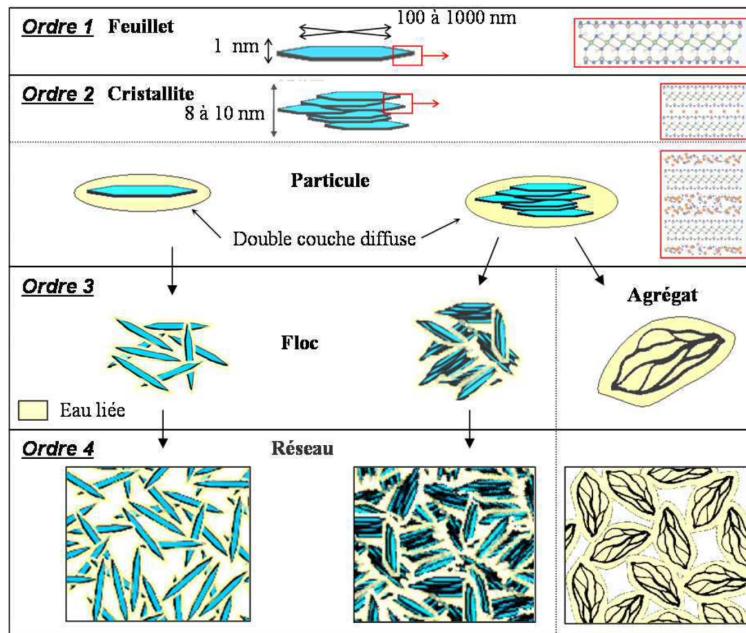


Figure 1: Structure multi-échelle. (Thèse S.Paumier, 2007, [5])

Nous allons commencer par l'échelle nanométrique jusqu'à l'échelle micrométrique. Le feuillet est l'unité structurale de base qui est constituée de l'empilement de trois couches successives.

L'arrangement de ces deux couches nous indique la nature minéralogique de l'argile. Entre chaque feuillet se situe une couche interfoliaire, composée d'une ou plusieurs couches d'eau.

Les feuillets regroupés généralement de manière parallèle forment un ensemble appelé particule. Dans le cas de la montmorillonite, nous avons une substitution isomorphique de type dioctaédrique au sein de la couche octaédrique. Ces substitutions entraînent un déficit de charges qui induit l'apparition de cations compensateurs, ce qui influence l'organisation des feuillets. Ce type de substitution entraîne un gonflement plus important du minéral. Rappelons cependant que cette spécificité peut-être néfaste dans certaines applications tel que les phénomènes de retrait-gonflement dans les sols.

L'ensemble de la phase solide de la montmorillonite se distingue par son ordre de grandeurs. Notons que le feuillet et la particule primaire peuvent être considérés comme des structures nanométriques. Tant dit que

l'agrégat et les réseaux d'agrégats forment des structures macroscopiques. Il n'est cependant pas possible de les étudier sans utiliser des techniques de rhéométrie.

On peut cependant remarquer, grâce à l'illustration (Fig 1), que les feuillets sont disposés selon un certain type d'empilement. Celui-ci varie en fonction du minéral choisi, dans notre cas, le minéral est inter-stratifié. Ce qui signifie que les feuillets vont se superposer à la condition qu'ils soient de la même nature et que l'espace interfoliaire contienne de l'eau.

2.2 Espaces poreux

Les matériaux argileux tels que la montmorillonite contiennent des espaces poreux dépendant entre autre de la granulométrie de la structure. On peut distinguer trois types d'espaces poreux en fonction de l'ordre de grandeur où l'on se situe.(Fig 2)

- Comme dit précédemment nous avons l'espace interfoliaire qui sépare deux feuillets dans un empilement. Cette épaisseur nanométrique varie en fonction de l'état d'hydratation, en générale 1.5 et 2.5 nm. [Thèse N.Jozja, 2003,[\[4\]](#)]
- L'espace interparticulaire est l'écart qui sépare les particules contenues dans un agrégat. Il contient deux types d'eaux : les eaux absorbées et les eaux capillaires.
- L'espace interagrégat est la zone qui sépare les agrégats contenus dans un réseau. Notons de plus, que l'eau y circule librement limitant les effets électrostatiques de la double couche.

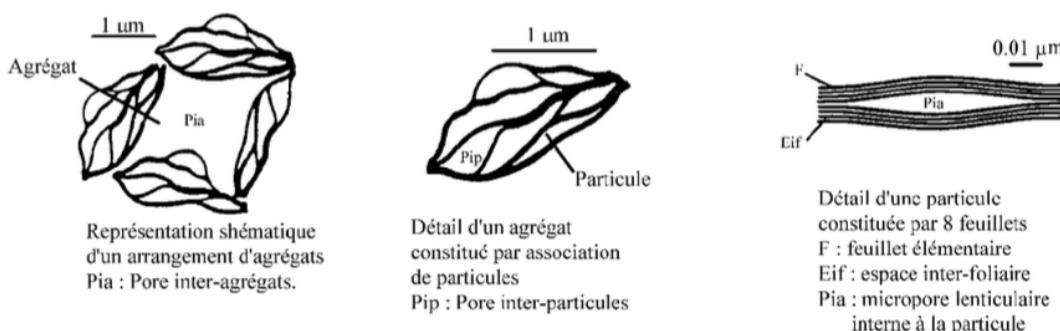


Figure 2: Les différents types d'espaces poreux. (Thèse N.Jozja, 2003,[\[4\]](#))

2.3 Mode d'association des particules

Précédemment, nous avions évoqué la présence d'un déficit de charge dû à la substitution isomorphique. Pour assurer la neutralité électrique, la surface de la particule va attirer des cations compensateurs. La présence d'une double couche électrique à la surface de la particule va déterminer le type d'association des feuillets. On peut distinguer trois catégories d'associations.(Fig 3)

- B : Association face/face des feuillets :
Autrement dit l'association de feuillets en face-à-face est due à l'interaction de leur double couche électrique. Dans ce cas, la couche interfoliaire se réduit seulement à une couche de cation positif.
- C et D : Association face/bord et bord/bord :
Cette association est due à la polarité du bord ou de la face considérée et du PH de la solution environnante. L'association ne s'effectue qu'à la condition que les charges soient opposées. Cette association permet en revanche de retenir une plus grande quantité d'eau.

2.4 Défauts

Dans la réalité, on peut constater d'autres propriétés d'organisation texturale. Dans le cas des montmorillonites hydratées, on peut observer qu'il existe des défauts d'empilement.

Ces défauts peuvent être expliqués par la circulation du fluide dans l'espace interfoliaire, par la géométrie des feuillets ou encore par le nombre de feuillets contenus dans une particule.

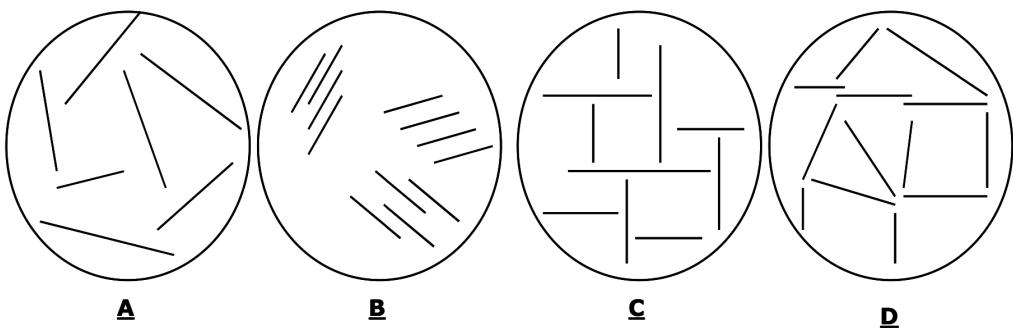


Figure 3: Modes d'organisation supposées des feuillets en suspensions: A. dispersion, B. association face/face, C. association face/bord, D. association bord/bord (Thèse S.Paumier, 2007, [5])

On peut identifier ces défauts sur des structures microscopiques, en remarquant que les feuillets ne sont plus de nature géométrique plane, mais ont des déformations. Notamment, lorsqu'un feillet se termine dans une particule, ce dernier provoque une courbure des feuillets voisins et crée un espace de dislocation. D'autre part, le degré de courbure des feuillets montre une adaptation à son environnement.

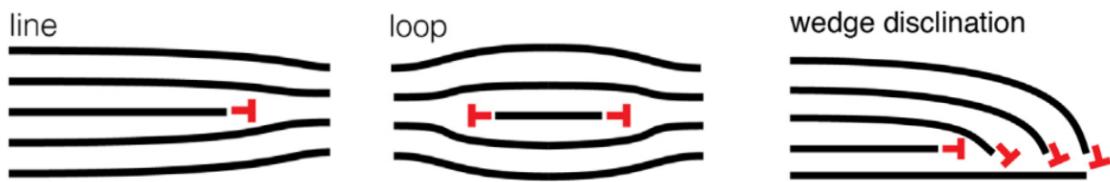


Figure 4: Défauts de superpositions des feuillets (Article Whittaker 2020,[6])

3 Analyse d'images

Dans le but de mener notre étude sur le gonflement d'argiles sous contraintes, nous utilisons le logiciel MATLAB®, pour procéder à des traitements d'images afin d'obtenir des données qui nous seront utiles pour déterminer le comportement mécanique de la microstructure.

3.1 Traitement et amélioration d'images

Nous commençons donc notre étude par une analyse d'images. Nous pouvons trouver dans la littérature des images de microstructures réalistes de montmorillonites obtenues par différentes techniques tel que : le Microscope Électronique à Balayage (MEB) ou encore le Microscope Électronique à Transmission(MET). Dans le cadre de notre projet, les images que nous vous présentons proviennent de [F. HETZEL,1994, [8]]. Ces dernières ont été obtenues par MET, autrement dit la technique consiste à "transmettre" un faisceau d'électrons à travers un échantillon très mince, ici la microstructure de montmorillonites (Fig.5).

Une fois l'image transmise au logiciel, nous pouvons commencer à traiter l'image. Nous pouvons par exemple chercher à améliorer le contraste de nos images. Cependant, dans notre cas, cette étape n'est pas nécessaire, car comme on peut le constater sur nos images, on distingue déjà assez bien les feuillets et l'assemblage de particules des arrières-plans des images. En revanche, nous appliquerons un filtre afin d'améliorer la netteté de la montmorillonite Na+ SWy-1.

```

1 h=fspecial('disk',0.2);
2 B=imfilter(im2,h);

```

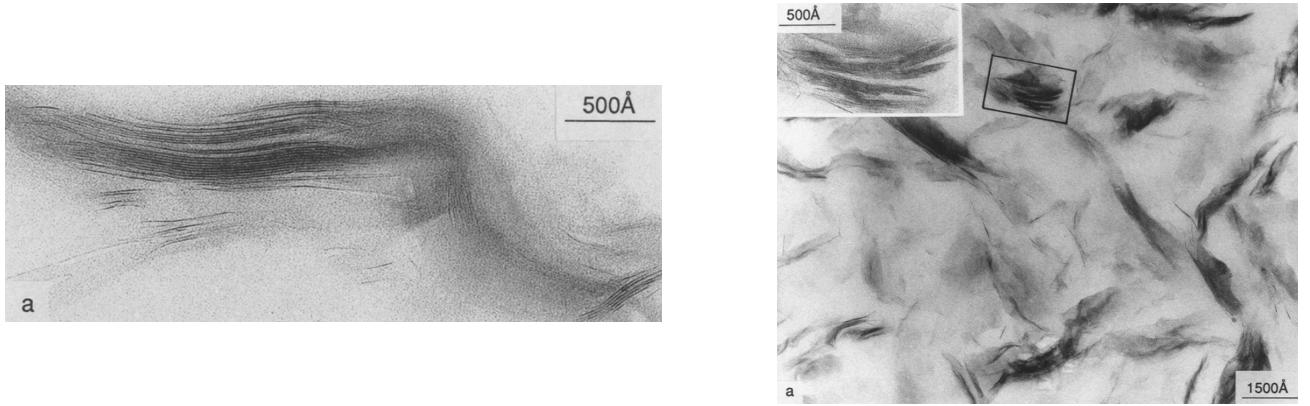


Figure 5: a)MET de la montmorillonite Na+ SWy-1 équilibrée à une pression d'aspiration de 3,2 kPa : déshydratation initiale b) MET de la montmorillonite Na+ Otay équilibrée à une pression d'aspiration de 3,2 kPa : déshydratation initiale. (F.HETZEL,1994,[8])

Maintenant l'objectif est de passer d'une image en niveau de gris à une image en binaire. Pour procéder à ce passage de l'un à l'autre, plusieurs techniques peuvent être utilisées. Nous nous appliquerons à vous en présenter une dans ce projet. L'une des manières de procéder est d'utiliser une fonction déjà écrite dans MATLAB® et qui permet de faire ce passage d'une image de gris en binaire (Fig.6).

```
1 I1= imbinarize(im_res, 'adaptive', 'ForegroundPolarity', 'dark', 'Sensitivity', 0.3);
```

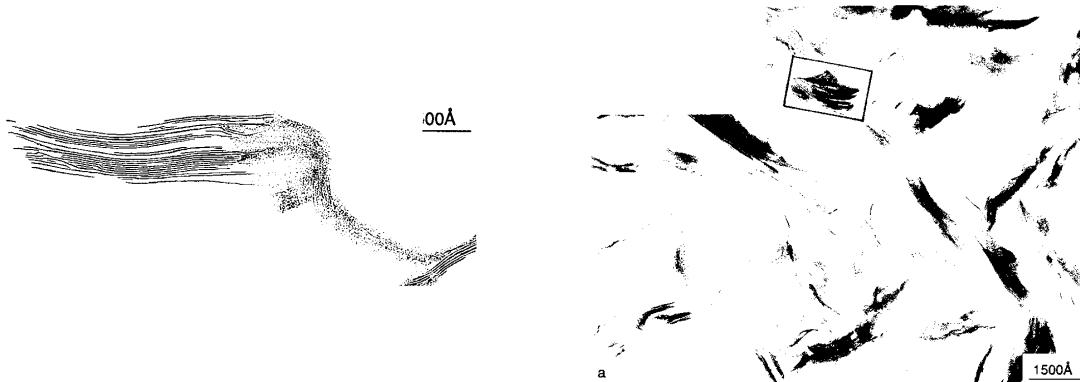


Figure 6: Images binaires: a) Na+ SWy-1 b)Na+ Otay Images

Vous remarquerez que l'arrière-plan de l'image est en blanc, alors que l'assemblage de particules et les feuillets eux sont en noir. Afin de mieux analyser nos images, nous allons échanger ces deux zones. Autrement dit, nos particules et nos feuillets seront en blanc et l'arrière-plan en noir. Le facteur important de cette transition est le seuillage. Plus le seuillage sera élevé, plus de pixels d'arrière-plan viendront se mettre en premier-plan.(Fig 7)

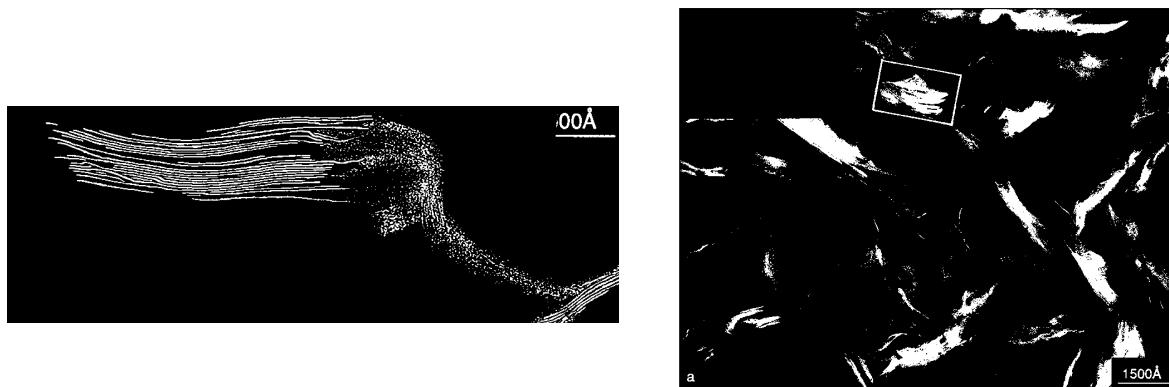


Figure 7: Images binaires inversées: c)Na+ SWy-1 d)Na+ Otay

Des opérations morphologiques peuvent être effectuées sur nos images, nous traiterons cela dans la prochaine section.

3.2 Coordonnées des contours des feuillets et de la particule

Afin de déterminer le comportement mécanique de la microstructure, il nous est nécessaire de récupérer les coordonnées de la ligne moyenne de chaque feuillet. On crée le contour fermé de chaque feuillet en ajoutant une demi-épaisseur de feuillet de chaque côté de la ligne moyenne.

3.2.1 Coordonnées des contours des feuillets

À partir de l'image obtenue précédemment, on a utilisé la fonction **bwske1** pour obtenir les lignes moyennes des feuillets. On a ensuite retiré les petits pixels de l'image avec la fonction d'ouverture morphologique **bwareaopen**.

```

1 % pour avoir les lignes moyenne des feuillets
2 BW3 = bwske1(F2);

```

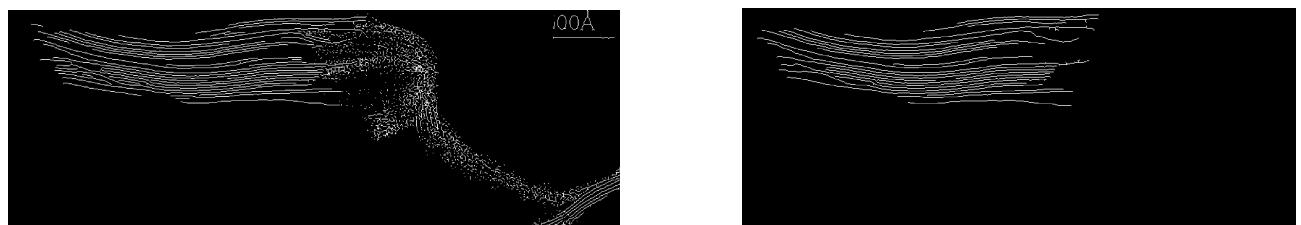


Figure 8: À gauche : lignes moyennes, à droite : lignes moyennes après avoir retiré les petits pixels

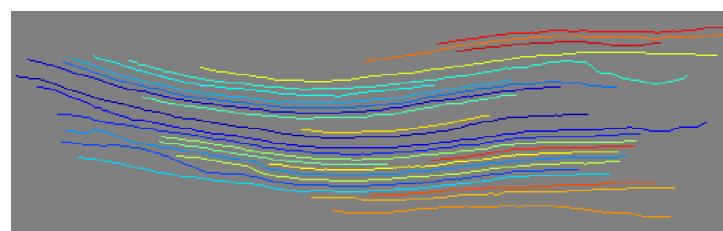


Figure 9: Identification de 25 feuillets via la fonction **bwboundaries**

Nous avons ensuite utilisé la fonction **bwboundaries** qui a identifié 25 feuillets et qui nous a fourni leurs coordonnées (Fig 9). Cette fonction aura pour objectif l'identification des objets connectés et d'en détecter les contours afin de nous permettre d'en extraire les coordonnées correspondantes.

3.2.2 Création d'une demi-épaisseur pour chaque feillet

Ensuite, on a obtenu les coordonnées des contours des feuillets à partir des coordonnées de la ligne moyenne des feuillets. Pour ce faire, on a ajouté -1 et +1 aux composantes en y des coordonnées afin d'avoir une demi-épaisseur de chaque côté. On a ensuite fermé les contours (Fig 10).

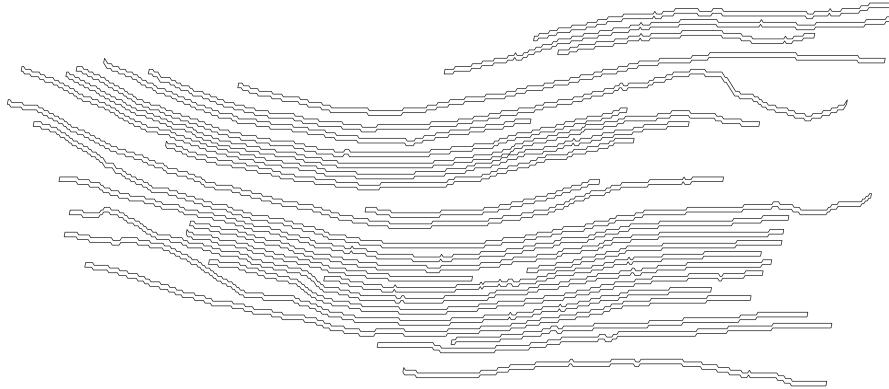


Figure 10: Contours fermés des 25 feuillets

Cependant nous avons remarqué que les coordonnées de chaque contour étaient mal numérotées. Nous avons donc de nouveau utilisé la fonction **bwboundaries** cette fois sur la Figure 10 afin d'obtenir des contours orientés correctement (Fig 11).

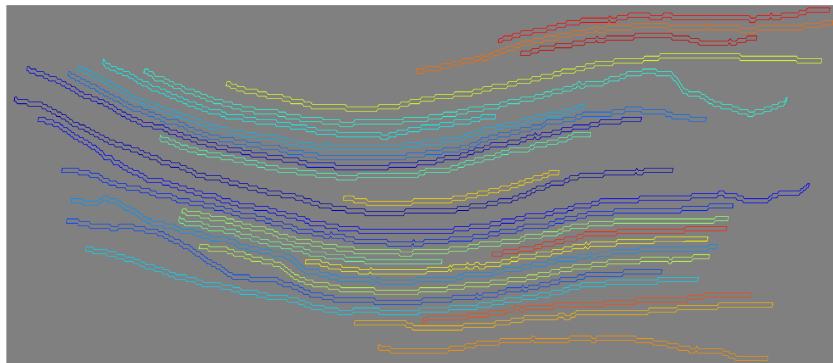
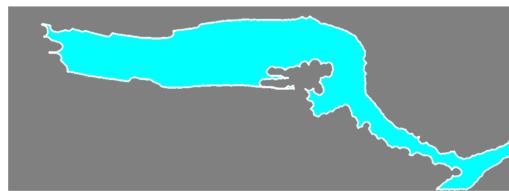


Figure 11: Contours correctement fermés

3.2.3 Contours extérieurs de la particule

Rappelons que nous avons obtenu l'image binaire de notre particule de montmorillonites (Fig7), il nous faut maintenant en obtenir son contour extérieur. Pour ce faire, nous effectuons une opération morphologique de fermeture **imclose** sur notre figure afin de garder les formes des contours extérieurs. On peut remarquer plusieurs points importants sur la Fig 12. La première est que le domaine de la particule contient des trous. Afin de remplir cet espace, nous utiliserons la fonction **imfill** de MATLAB®. La deuxième est que certains petits pixels sont restés malgré le seuillage. L'application **bwareaopen** nous permettra de les enlever. Il est aussi possible d'utiliser la fonction **bwboundaries**.(Fig 13)

**Figure 12:** Fermeture morphologique**Figure 13:** Contours extérieurs

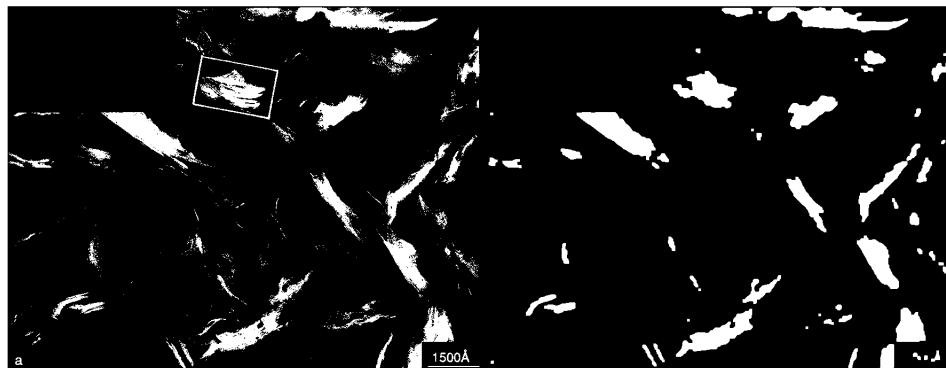
3.2.4 Coordonnées des contours de l'assemblage de particules

De la même manière que pour les feuillets, la finalité est d'obtenir les coordonnées des contours de l'assemblage de particules. Pour cela, nous procéderons par étapes. Tout d'abord, nous avons en notre possession l'image de l'agréât en binaire (Fig 7 d)) il nous faut à présent combler les espaces des particules. À cette fin, nous appliquons à notre image une succession d'ouvertures et de fermetures morphologiques. Cette transformation morphologique a eu comme impact directe sur notre agréât d'enlever des particules. Notons cependant que cette évolution de notre image nous a permis de garder les contours déjà présents de nos particules.(Fig 14)

```

1 % pour les espaces des particules
2 for k=1:3
3     se=strel('disk',k);
4     im_close_open=imopen(imclose(im_close_open,se),se);
5 end

```

**Figure 14:** Obtention des contours des particules

Nous pouvons constater sur la figure 14 que certaines particules présentent sont petites. Afin de pratiquer au mieux la segmentation de l'image, nous décidons d'enlever les plus petites particules et les pixels passés au travers du seuillage effectué lors du passage de l'image en binaire. Comme mentionné précédemment, cette opération s'effectue grâce à la fonction **bwareaopen**. De même, pour l'obtention des coordonnées des contours de l'assemblage des particules nous choisissons d'utiliser **bwboundaries** (Fig 15).

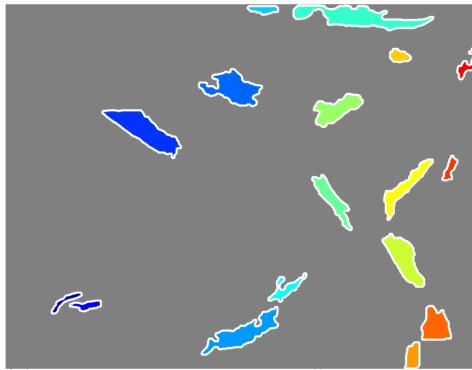


Figure 15: Les contours de chaque particule de l'agrégat

3.3 Obtention des caractéristiques des feuillets ou des particules

Pour obtenir des informations sur l'inclinaison et la longueur des feuillets ou bien sur le périmètre et l'aire des particules, on utilise la fonction **regionprops**. On peut aussi utiliser l'application **Image Region Analyser** de MATLAB®.

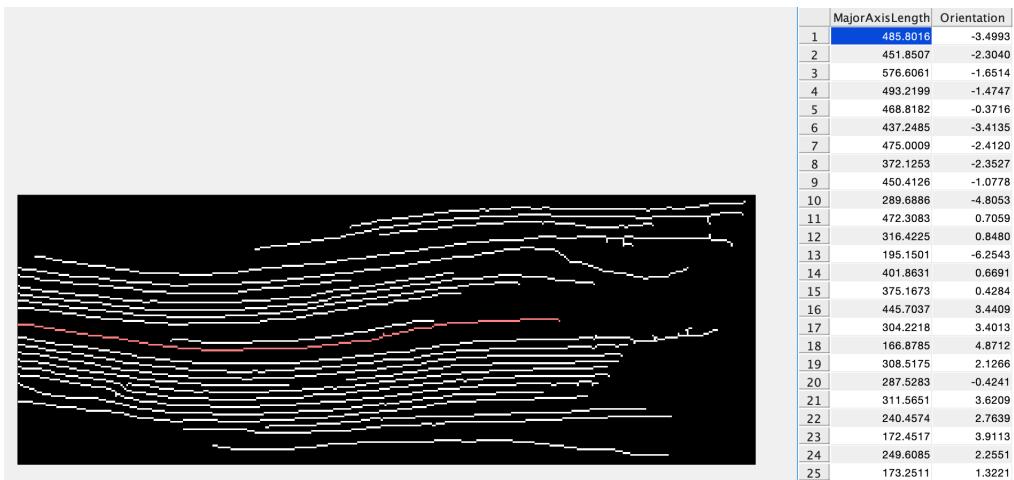


Figure 16: Accès aux longueurs et à l'orientation des feuillets via l'application **ImageRegionAnalyser**

4 Castem

Dans cette partie, nous nous concentrerons sur les comportements mécaniques de nos microstructures. Pour cela, nous utiliserons les résultats de l'analyse d'images faits dans la section précédente. Cette exploitation nous permettra grâce au logiciel Cast3m de pouvoir faire des simulations réalistes du comportement poro-élastique de nos microstructures. Il faut savoir que Cast3m est un logiciel de calcul par la Méthode des Éléments Finis pour la mécanique des structures et des fluides.

4.1 Obtention de la microstructure des feuillets

Pour exploiter les propriétés mécaniques de nos microstructures, il faut tout d'abord respecter un ordre de séquence de calcul et d'exploitation défini par l'utilisateur pour un calcul de structures.

Nous commencerons par l'obtention de la microstructure des feuillets avant de finir par celle du réseau. Chaque construction de microstructures doit commencer par la création de la géométrie et de maillages. Intéressons-nous en premier à la géométrie de notre microstructure. Nous savons grâce à la partie d'analyse

d'images, que nous avons obtenues les contours fermés de nos microstructures. Il nous faut maintenant exploiter ces résultats. Pour cela, nous extrayons un fichier ".txt" contenant toutes les coordonnées de chaque feillet ou bien de chaque particule. Ce fichier est transmis au logiciel Cast3m par "**OTPI DONN**". Il nous faut ensuite créer les points, puis les lignes du contour des feuillets ou des particules. À cette fin, des boucles de répétitions ont été nécessaires.

```

1 % pour les espaces des feuillets
2 REPE CO 25;
3 ACQU NUM X Y;
4 P1 = X Y;
5 PC = NUM;
6 nbr de points par particule via la liste nbpp
7 bonum = EXTRAIRE nbpp &CO;
8     REPE SURL bonum;
9         ACQU NUM X2 Y2;
10        P2 = X2 Y2;
11        PC2 = NUM;
12        boolt = (PC .NEG. PC2);
13        SI (boolt);
14            QUITTER SURL;
15        SINON;
16            SI (EGA (TYPE coun1) 'MOT');
17                coun1 = D 1 P1 P2;
18                P1 = P2;
19                PC = PC2;
20            SINON;
21                coun1 = coun1 ET ( D 1 P1 P2);
22                P1 = P2;
23                PC = PC2;
24            FINSI;
25        FINSI;
26    FIN SURL;
27 Tabcont . j = coun1;
28 j = j + 1;
29 FIN CO;

```

Plusieurs parties peuvent être distinguées dans le code. La première, que l'on peut voir, est que nous n'avons pas une mais deux boucles de répétitions. En effet, chaque boucle a un rôle bien spécifique. La première boucle importante "**REPE SURL**" a pour objectif la création d'un contour fermé pour un feillet. Alors que la boucle "**REPE CO**" a quant à elle pour but de faire exécuter le programme pour un grand nombre de feuillets.

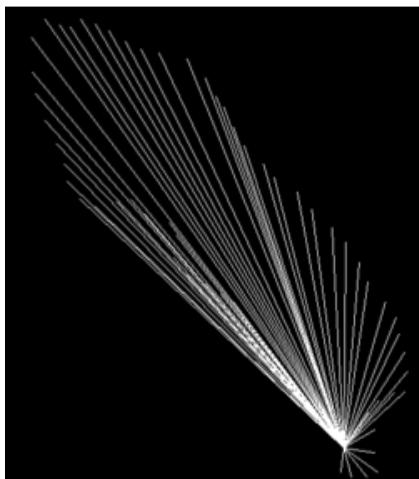


Figure 17: Erreur d'un contour fermé

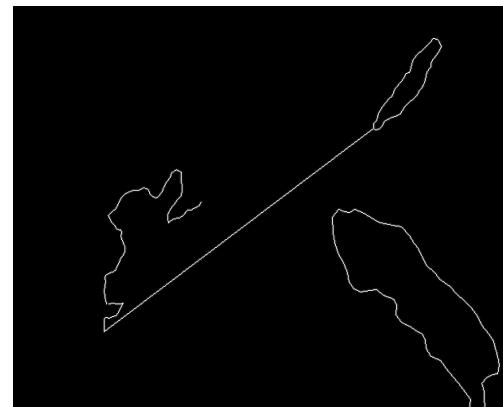


Figure 18: Erreur sur plusieurs contours

Comme on peut le remarquer, des erreurs de codage peuvent entraîner un contour non fermé de nos feuillets (Fig 17). Pour pallier à ce genre de situations, plusieurs solutions peuvent être faites. Celle que nous avons choisie d'utiliser dans notre script est de faire comprendre au logiciel que notre contour est un contour fermé et non des lignes commençant par le même point. Autrement dit, nous avons indiqué dans notre programme que les points se suivaient pour obtenir un contour fermé. Autre type d'erreur possible peut-être que les différents feuillets à notre disposition ne sont pas bien distingués par le logiciel (Fig 18). La solution, que nous avons appliquée, a été de mettre une condition de sécurité à notre script, pour que le logiciel arrête son programme dès qu'il commence le contour d'un autre feillet.

Une fois le contour des feuillets obtenu, la surface se fait naturellement. Il nous faut ensuite le contour extérieur de la microstructure. Pour cela nous créons un rectangle qui contiendra tous nos feuillets (Fig 19), respectant le même ordre de construction que les feuillets. Puis à cette surface, nous devrons éliminer la surface de nos feuillets. À cette fin, il est nécessaire que les contours des feuillets et du rectangle soient en sens contraire les uns de l'autre. Nous décidons de mettre nos feuillets dans le sens horaire et le rectangle dans le sens anti-horaire, ce qui nous permet d'obtenir la surface interfoliaire énoncée dans la première section (Fig 20).

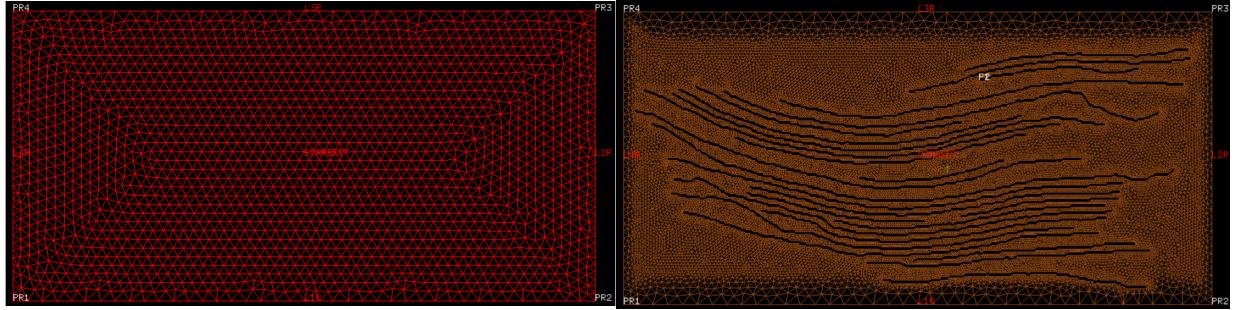


Figure 19: Mircrostructure des feuillets

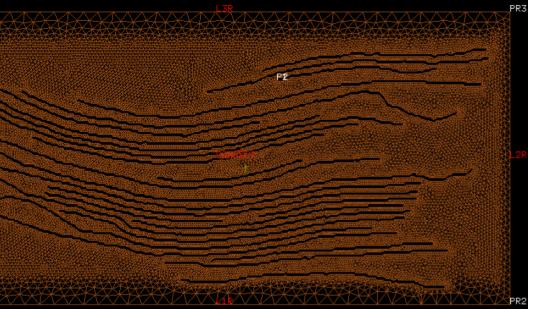


Figure 20: Microstructure du réseau

Finalement, la construction du réseau se présente de la même manière. Nous obtenons les résultats suivants (Fig 21 et 22) :

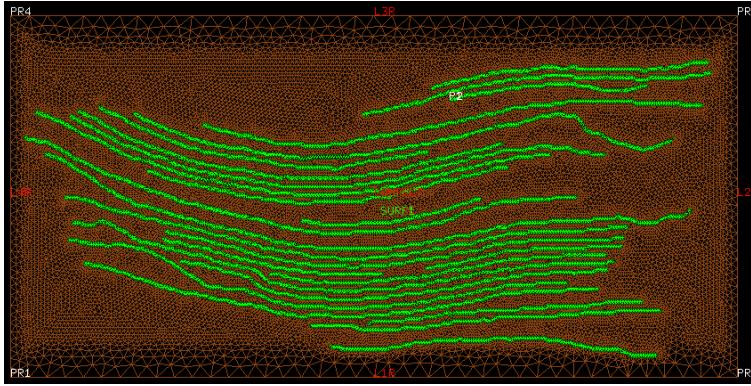


Figure 21: Mircrostructure des feuillets



Figure 22: Microstructure du réseau

4.2 Homogénéisation

La géométrie de la microstructure étant désormais bien définie sur Cast3m, on peut procéder aux calculs. L'objectif étant de déterminer quel comportement adopter à notre réseau à partir des résultats sur les feuillets. Nous allons soumettre nos microstructures à un chargement uniforme macroscopique de déformation $\underline{\underline{E}}$. On en déduit trois cas de chargement élémentaire qui nous permettront d'identifier le tenseur de rigidité effectif.

- 1. Premier chargement : $\underline{\underline{E}}_{11} \cdot \underline{x}$

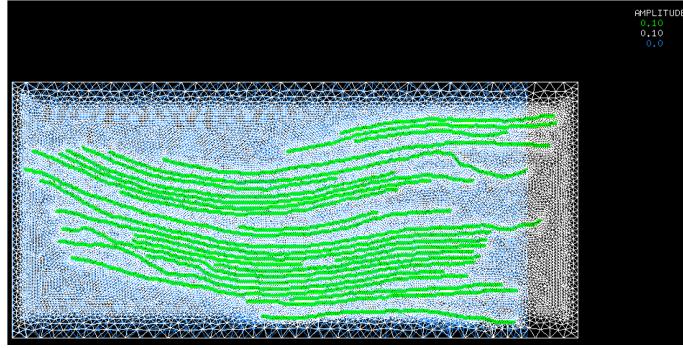


Figure 23: Déformée des feuillets pour le chargement E_{11}

- Champs de déplacements :

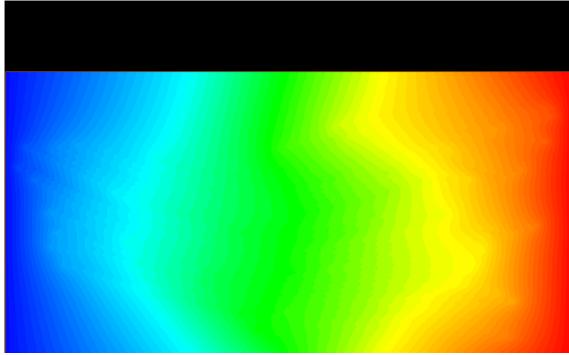


Figure 24: Déplacement U_x

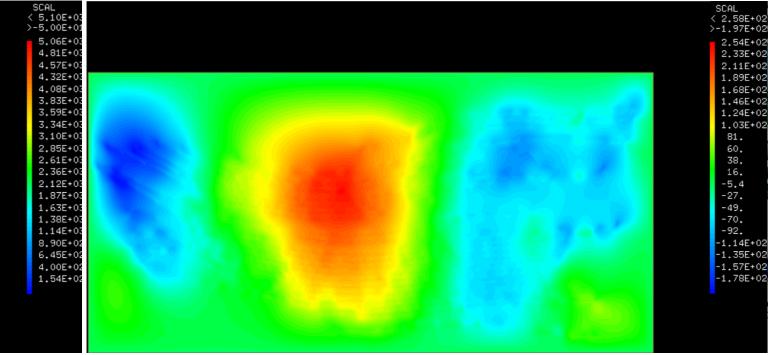


Figure 25: Déplacement U_y

On constate sur le déplacement en U_x (Fig 24), que le déplacement le plus important se situe sur l'extrémité droite de la microstructure, ce qui est logique par rapport au chargement que nous appliquons. En revanche sur le déplacement en U_y (Fig 25), nous pouvons distinguer deux zones. La zone rouge a le plus grand déplacement, cela peut s'expliquer par l'orientation presque horizontale des feuillets dans cette zone. En revanche, on constate bien que les extrémités des feuillets sont eux moins impactés par le chargement.

- Champs de contraintes :

Le champ de contrainte nous permet de visualiser sur σ_{xx} (Fig 26) un gradient présent aux extrémités des feuillets plus au moins important selon leurs orientations. Par contre, sur σ_{yy} (Fig 27), on constate que l'extrémité gauche des feuillets est plus sollicitée par ce chargement, dû à un angle d'inclinaison plus important à ce niveau. De plus, sur σ_{xy} (Fig 28) on remarque une traction et une compression selon l'orientation des feuillets dans la microstructure.

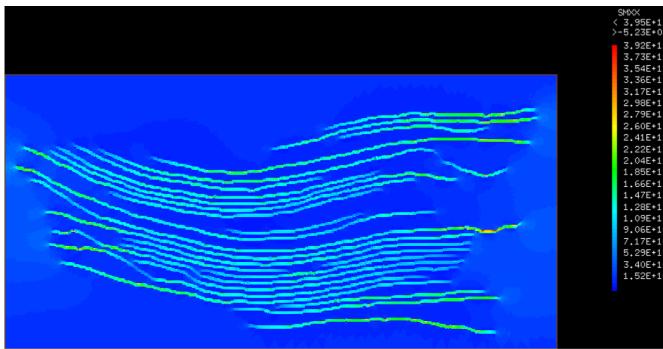


Figure 26: σ_{xx}

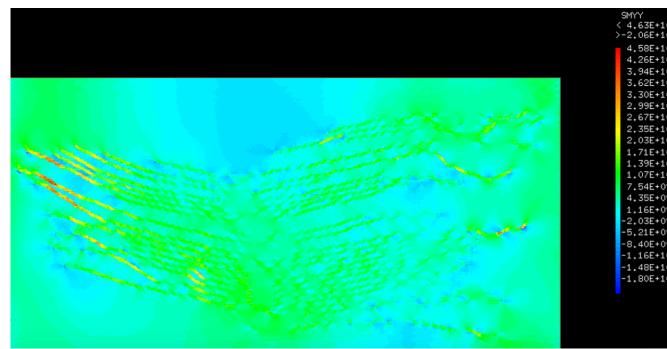


Figure 27: σ_{yy}

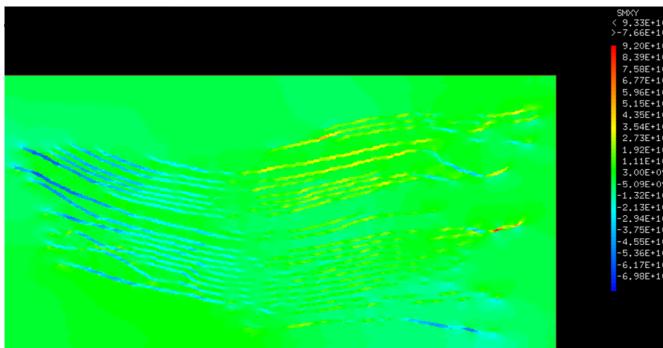


Figure 28: σ_{xy}

- Champs de déformations :

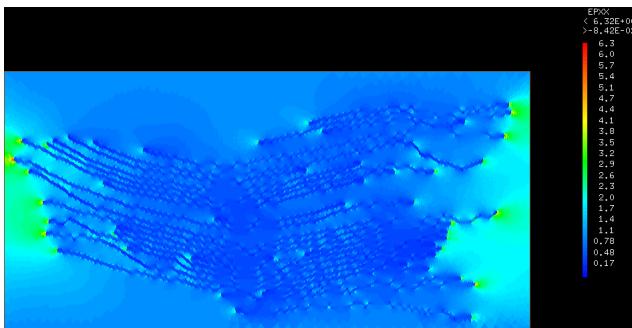


Figure 29: ϵ_{xx}

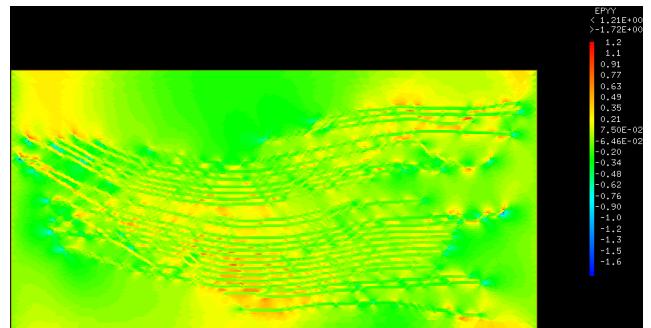


Figure 30: ϵ_{yy}

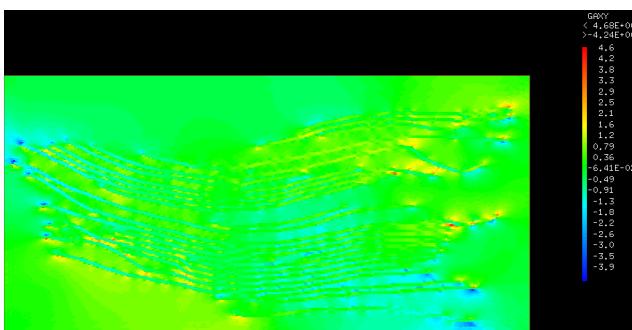


Figure 31: ϵ_{xy}

Commençons par observer le champ de déformation ϵ_{xx} (Fig 29), nous remarquons que les extrémités des feuillets ont un gradient important. Cela nous indique que ce sont les extrémités qui ont subies l'allongement. Nous pouvons aussi constater cela sur ϵ_{yy} (Fig 30) bien que l'espace poreux entourant les feuillets, dont l'orientation est horizontale, est aussi impacté par la force que nous appliquons. Enfin ϵ_{xy} (Fig 31), nous indique que l'orientation des feuillets est un critère non-négligeable de la déformation.

2. Deuxième chargement : $E_{22} \cdot x$

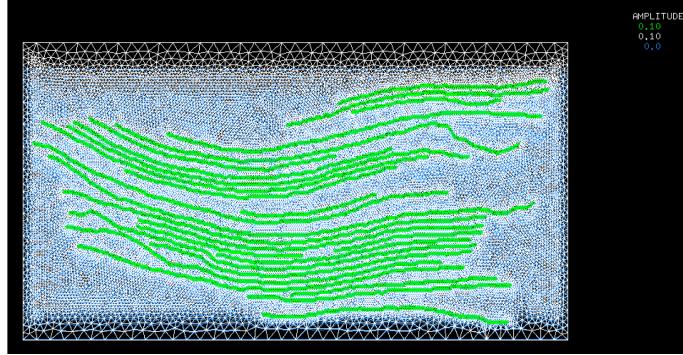


Figure 32: Déformée des feuillets pour le chargement E_{22}

- Champs de déplacements :

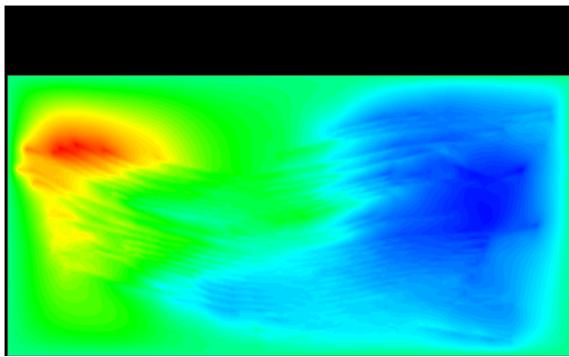


Figure 33: Déplacement U_x

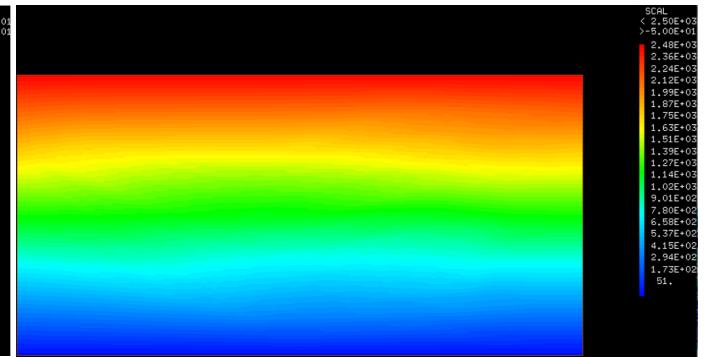
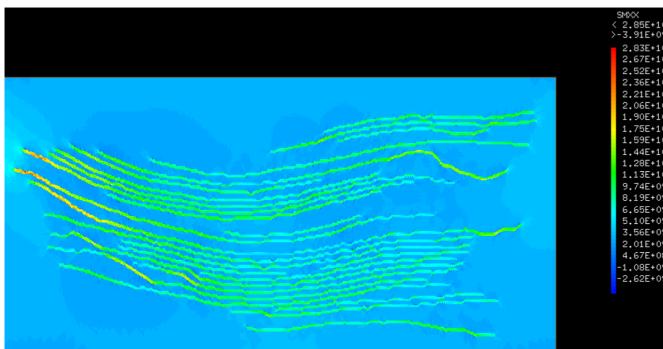
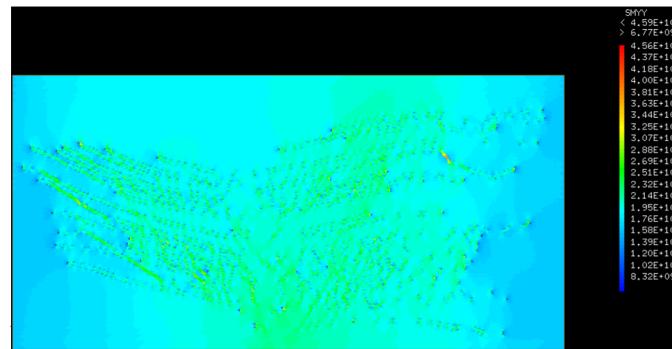
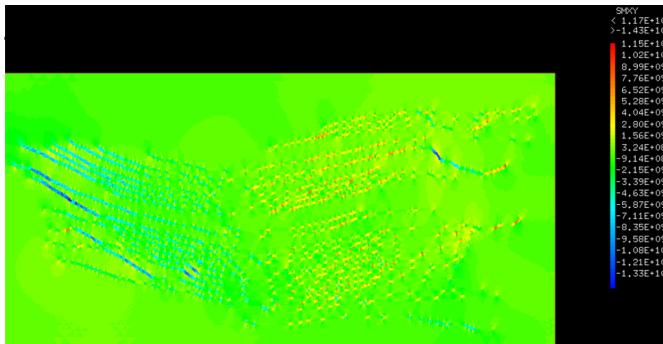


Figure 34: Déplacement U_y

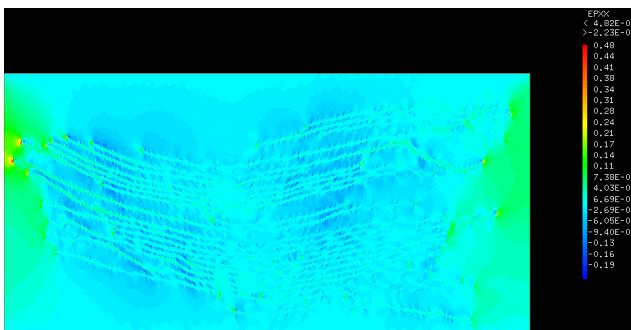
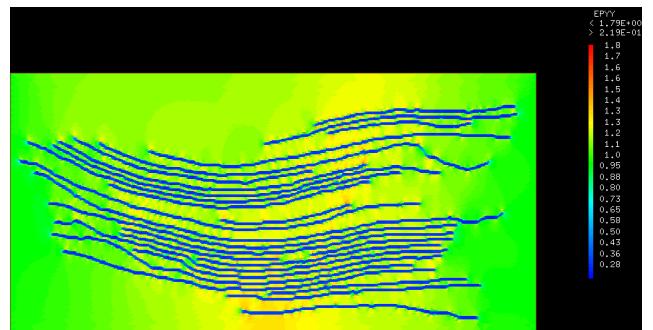
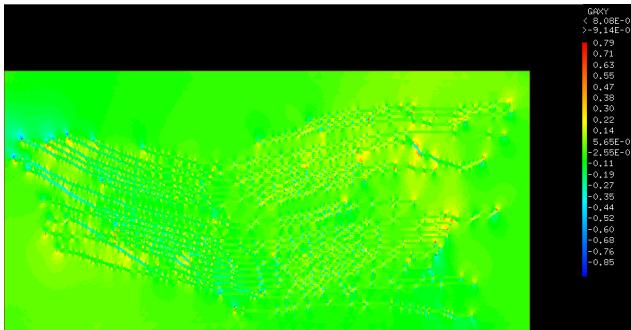
Nous pouvons remarquer que sur U_y (Fig 34) le déplacement important se situe sur le haut de la microstructure. Cela est cohérent avec la déformation que nous appliquons. Cependant, le déplacement U_x (Fig 33) nous permet de distinguer deux zones. La zone bleue représentant l'extrémité droite des feuillets a eu un déplacement moins important. Contrairement à la zone rouge, qui elle a un déplacement important dû à l'orientation des feuillets, mais aussi de leurs proximités.

- Champs de contraintes :

Les différents champs de contraintes nous permettent d'observer que cette proximité des feuillets dans la zone gauche de la microstructure est plus influencée en σ_{xx} et σ_{xy} (Fig 35 et 37). Néanmoins σ_{yy} (Fig 36) est quant à lui plus sollicité sur les extrémités des feuillets. Nous pouvons constater également une influence de cette force sur tout le contour des feuillets.

**Figure 35:** σ_{xx} **Figure 36:** σ_{yy} **Figure 37:** σ_{xy}

- Champs de déformations :

**Figure 38:** ϵ_{xx} **Figure 39:** ϵ_{yy} **Figure 40:** ϵ_{xy}

Le champ de déformation en ϵ_{xx} (Fig 38) nous montre que les feuillets les plus inclinés à gauche ont été altérés. Tandis que sur le reste de la microstructure, on remarque de faibles gradients entourant les feuillets. À l'inverse, ϵ_{yy} (Fig 39) nous indique que ce ne sont pas les feuillets qui subissent une déformation mais l'espace interfoliaire les entourant; surtout celles dont les feuillets ont des orientations presque horizontales. Le champ de déformation ϵ_{xy} (Fig 40) n'est quant à lui influencer que par l'orientation des feuillets.

3. Troisième chargement : $E_{12} \cdot x$

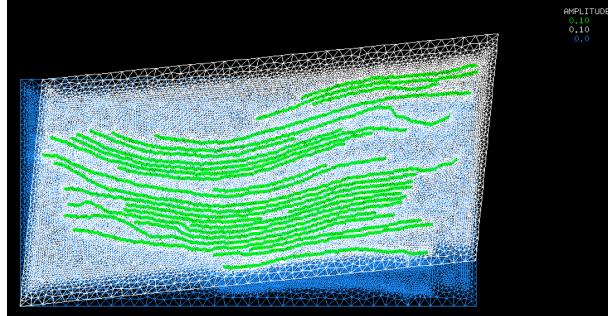


Figure 41: Déformée des feuillets pour le chargement E_{12}

- Champs de déplacements :

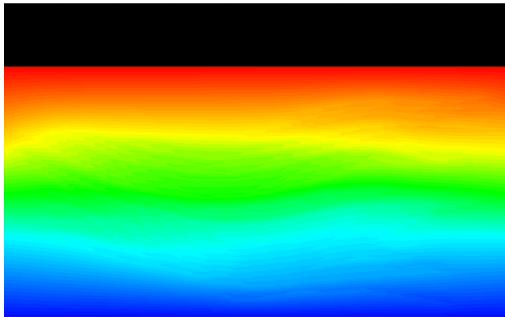


Figure 42: Déplacement U_x

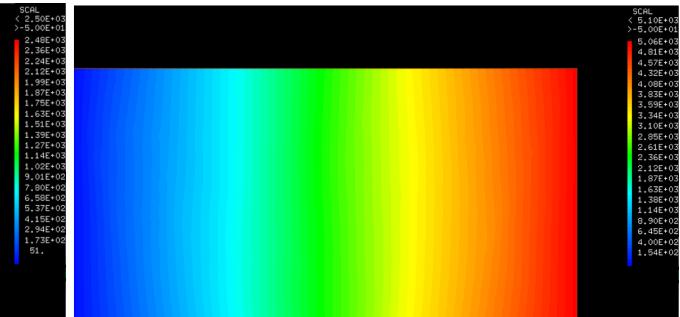


Figure 43: Déplacement U_y

Nous savons grâce à la déformation que la zone la plus sollicitée de la microstructure est la partie en haut à droite. Au regard des déplacements suivant U_x et U_y (Fig 42 et 43) nous retrouvons ce comportement. Dans ces conditions, nous pouvons noter que le déplacement U_x est analogue à celui de U_y pour la force E_{22} , tandis que le déplacement en U_y est lui équivalent à U_x pour la force E_{11} .

- Champs de contraintes :

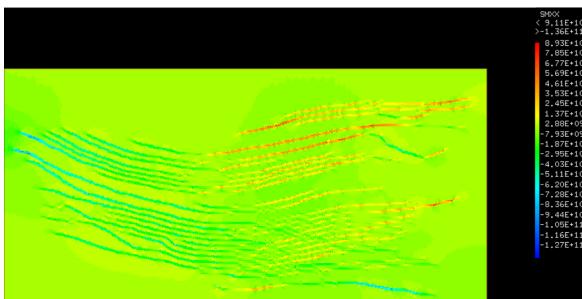


Figure 44: σ_{xx}

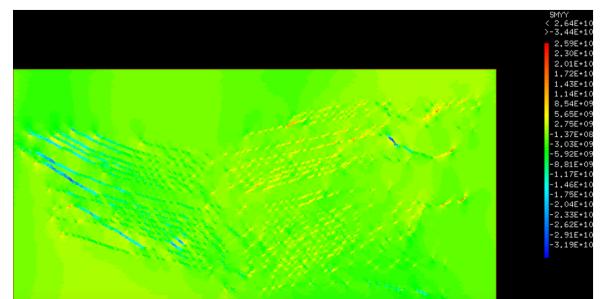


Figure 45: σ_{yy}

Nous savons, que la force, que nous appliquons, a un impact sur la diagonale de notre microstructure. En effet, nous pouvons le remarquer dans les champs de contraintes σ_{xx} et σ_{yy} (Fig 44 et 45). La sollicitation des feuillets en haut à droite est considérablement impactée par cette force. Pourtant, σ_{xy} (Fig 46) nous montre que l'orientation des feuillets à gauche a été plus confrontée à notre déformation. Cela s'explique par l'angle d'inclinaison plus important dans cet espace. En effet, nous pouvons constater des gradients plus ou moins importants tout autour des feuillets ayant de forts angles d'inclinaison.

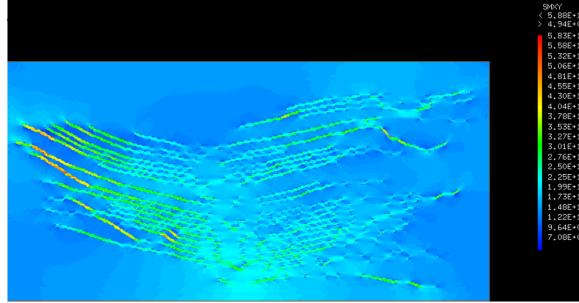


Figure 46: σ_{xy}

- Champs de déformations :

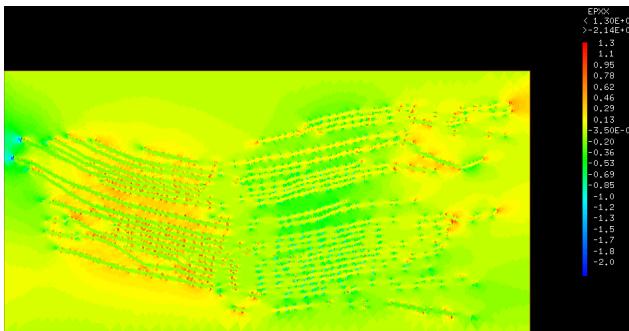


Figure 47: ϵ_{xx}

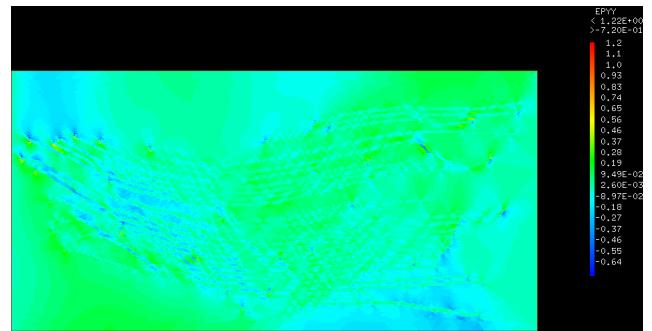


Figure 48: ϵ_{yy}

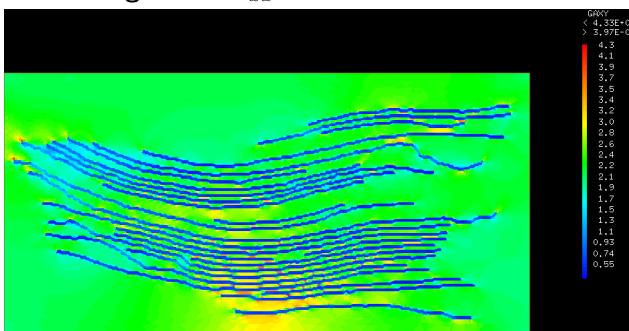


Figure 49: ϵ_{xy}

Le champs de déformation nous montre que les allongements les plus importants suivant ϵ_{xx} (Fig 47) se situent sur les feuillets ayant les angles d'inclinaison les plus importants. En revanche sur ϵ_{xy} (Fig 49), nous pouvons remarquer que ce sont les zones horizontales et quelques extrémités à gauche de feuillets qui ont été les plus sollicitées. Tandis que ϵ_{yy} (Fig 48) ne montre qu'un gradient faible au niveau des extrémités de chaque feillet.

4.3 Tenseur de rigidité effectif

Nous venons d'analyser le comportement des feuillets, cette analyse nous permet de savoir quel comportement adapter pour le réseau. Pour cela, il nous faut extraire le tenseur de rigidité effectif. Nous pouvons l'obtenir grâce aux différents champs de contraintes. Chaque champs de contraintes nous fournit une colonne du tenseur de rigidité effectif.

$$\{\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle\} = \begin{pmatrix} A_{11}^{eff} & A_{12}^{eff} & A_{13}^{eff} \\ A_{21}^{eff} & A_{22}^{eff} & A_{23}^{eff} \\ A_{31}^{eff} & A_{32}^{eff} & A_{33}^{eff} \end{pmatrix} \{\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle\}$$

Notons que le comportement homogène équivalent est défini comme la relation qui relie les moyennes des champs microscopiques soit :

$$\{\langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle\} = \frac{1}{|\omega|} \int_{\omega} \underline{\underline{\sigma}} dV = \mathbb{A}^{eff} : \underline{\underline{E}}$$

Après les calculs sur notre microstructure, qui a comme inclinaison -1.125° par rapport à la direction horizontale, nous obtenons les valeurs du tenseur de rigidité effectif \mathbb{A}^{eff} :

$$\mathbb{A}^{eff} = \begin{pmatrix} 37.743.10^9 & 04.414.10^9 & -0.515.10^9 \\ 0.4414.10^9 & 2.0562.10^9 & -0.0093.10^9 \\ -0.0515.10^9 & -0.0093.10^9 & 0.9022.10^9 \end{pmatrix}$$

On remarque que notre tenseur est symétrique. Il faut maintenant déterminer le comportement élastique effectif à appliquer sur notre réseau. Pour cela, nous allons analyser les propriétés élastiques dans différentes bases. La première base que nous allons regarder est la base d'orthotropie.

Afin de déterminer les propriétés élastiques orthotropes, nous passons par le tenseur de souplesse, autrement dit $A^{eff} = S^{-1}$, soit :

$$\mathbb{A}^{eff} = \begin{pmatrix} 0.0272.10^9 & -0.0058.10^9 & 0.0015.10^9 \\ -0.0058.10^9 & 0.0499.10^9 & 0.0002.10^9 \\ 0.0015.10^9 & 0.0002.10^9 & 0.1109.10^9 \end{pmatrix}$$

Nous pouvons alors imposer les égalités suivantes sur les modules d'élasticité et coefficients de Poisson :

$$E1 = E3 = \frac{1}{\mathbb{A}_{11}^{eff}} = 36.765E + 9 \quad E2 = \frac{1}{\mathbb{A}_{22}^{eff}} = 20.040E + 9 \quad G_{12} = \frac{1}{2 \times \mathbb{A}_{33}^{eff}} = 4.5086E + 09$$

$$\nu_{12} = -\mathbb{A}_{12}^{eff} * E1 = 0.2132 \quad \nu_{13} = \mathbb{A}_{12}^{eff} * E2 = 0.1162$$

La seconde base que nous choisissons d'étudier est la base isotrope, dont les propriétés élastiques nous permettent d'obtenir le module d'élasticité et le coefficient de Poisson suivant :

$$E = \frac{1}{\mathbb{A}_{11}^{eff}} = 36.765E + 9 \quad \nu = -\mathbb{A}_{12}^{eff} \times E = 0.2132$$

Au regard des résultats que nous obtenons, il est préférable de continuer avec un modèle orthotrope pour notre réseau. En effet, nous retrouvons une erreur de 0.6% pour une base orthotrope à l'inverse la base isotrope nous amène à une erreur de 26%.

4.4 Le réseau

Nous avons choisi de partir sur une base orthotrope pour notre réseau, à l'égard des résultats que nous avons obtenus dans la partie précédente. Ces propriétés mécaniques sont appliquées dans notre programme.

- 1. Premier chargement : $E_{11} \cdot x$

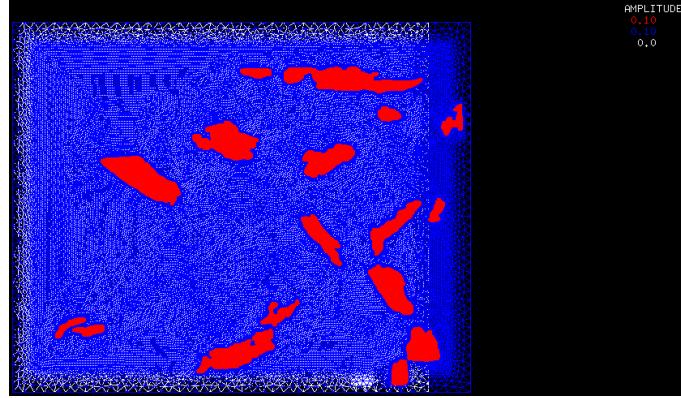


Figure 50: Déformée pour le chargement E_{11}

- Champs de déplacements :

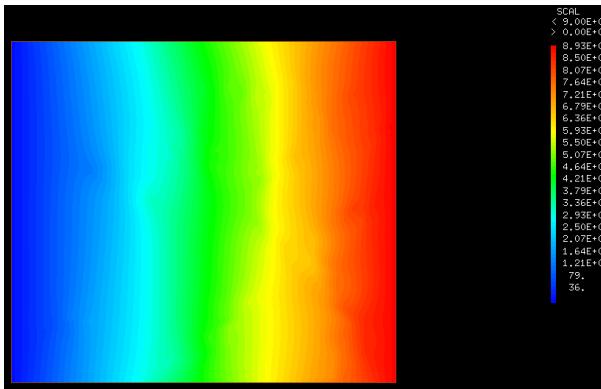


Figure 51: Déplacement U_x

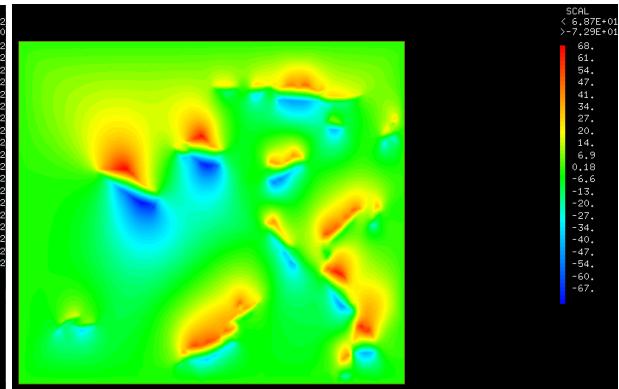
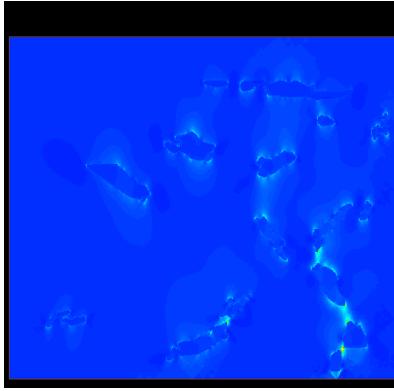
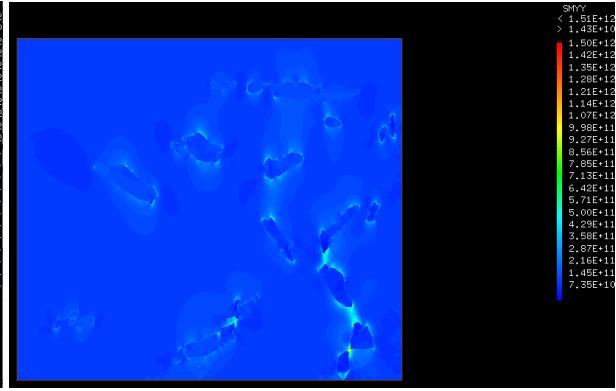
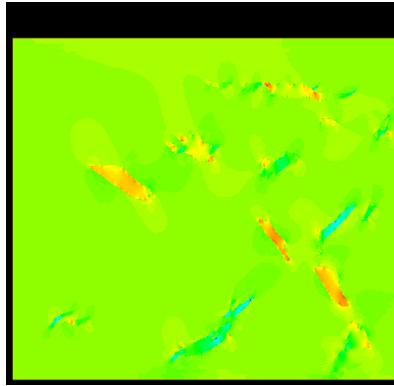


Figure 52: Déplacement U_y

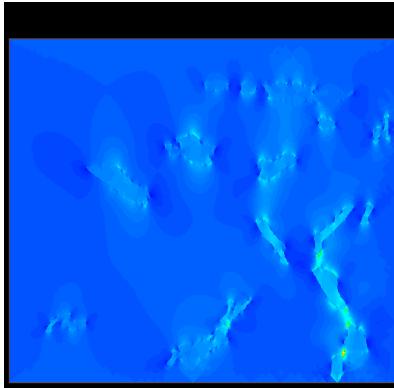
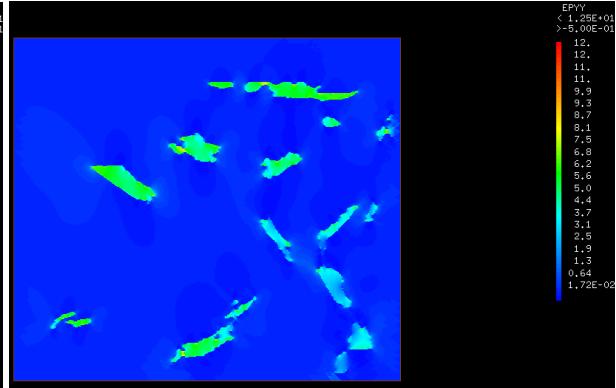
Le déplacement U_x (Fig 51) est plus important sur le coté droit du réseau, car c'est là où le chargement est le plus important. Pour le déplacement U_y (Fig 52), on constate des gradients de déplacement importants dans les zones supérieures et inférieures des particules, ceci est dû à l'orientation des particules.

- Champs de contraintes :

Pour les contraintes σ_{yy} et σ_{xx} (Fig 53 et 54), on remarque que ce sont certaines extrémités des particules, mais aussi les zones à leur proximité qui entraînent une sollicitation plus importante. En ce qui concerne la contrainte σ_{xy} (Fig 55), on voit qu'en fonction de l'orientation des particules, certaines sont sollicitées en traction et d'autres en compression.

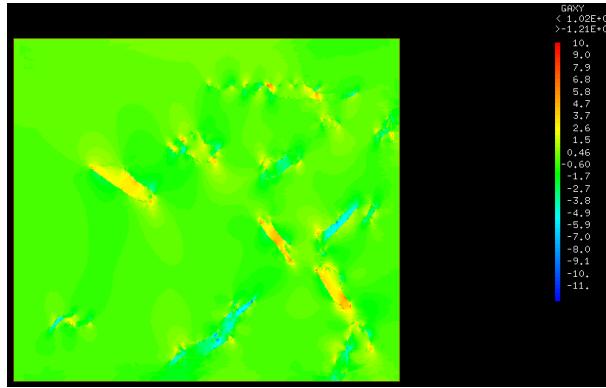
**Figure 53:** σ_{xx} **Figure 54:** σ_{yy} **Figure 55:** σ_{xy}

- Champs de déformations :

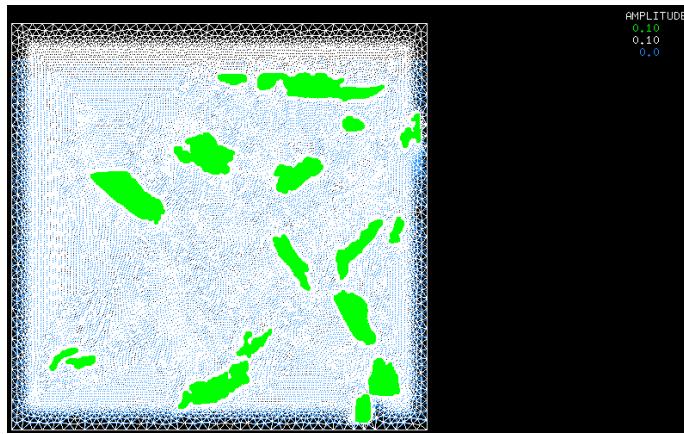
**Figure 56:** ϵ_{xx} **Figure 57:** ϵ_{yy}

Pour les déformations ϵ_{xx} (Fig 56), ce sont les zones qui avoisinent les particules, qui subissent de léger gradients de déformation. Pour ϵ_{yy} (Fig 57), on aperçoit que les particules très allongées suivant l'axe x sont celles qui subissent d'importantes déformations.

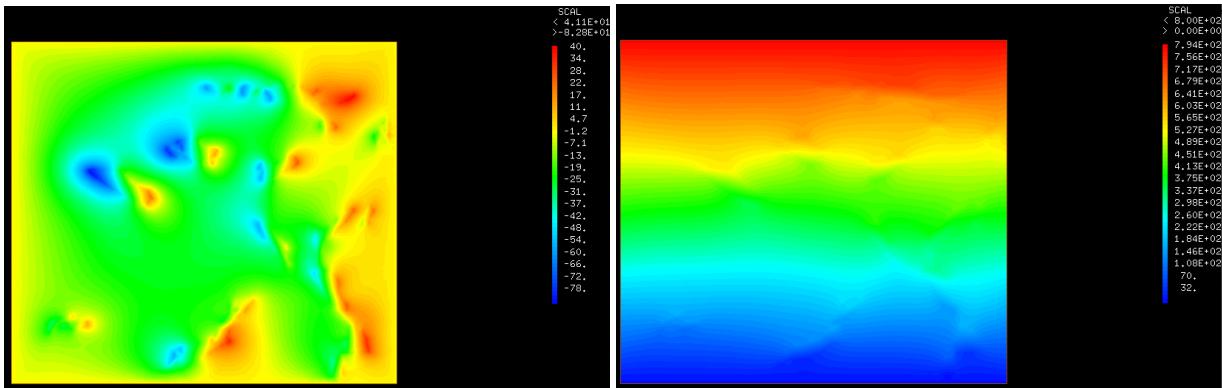
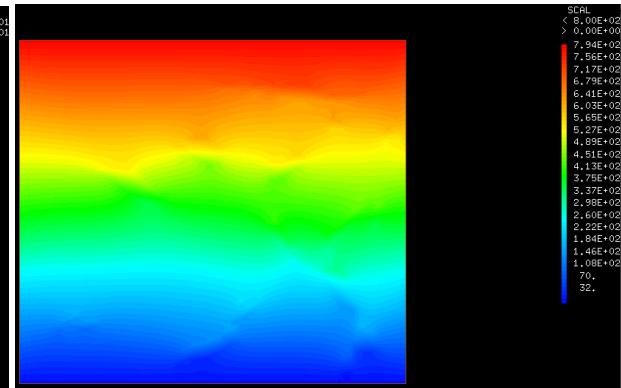
Enfin pour les déformations ϵ_{xy} (Fig 58), on distingue qu'en fonction des orientations des particules, les déformations en leur sein seront différentes.

**Figure 58:** ϵ_{xy}

2. Deuxième chargement : $E_{22} \cdot x$

**Figure 59:** Déformée pour le chargement E_{22}

- Champs de déplacements :

**Figure 60:** Déplacement U_x **Figure 61:** Déplacement U_y

On constate que le déplacement U_x (Fig 60) est important au niveau du contour du réseau et des particules allongées suivant l'axe y. Pour le déplacement U_y (Fig 61), le déplacement est important dans la zone supérieure du réseau, car c'est là où le chargement est le plus important.

- Champs de contraintes :

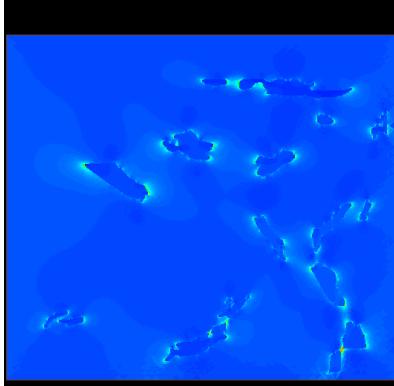


Figure 62: σ_{xx}

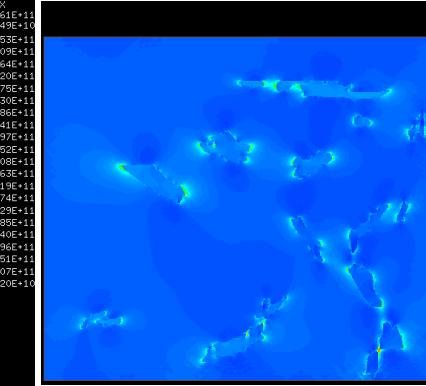


Figure 63: σ_{yy}

De la même manière que pour le chargement $E_{11}\cdot x$, les contraintes σ_{yy} et σ_{xx} (Fig 62 et 63) ont des sollicitations importantes au niveaux des extrémités des particules, mais aussi lorsque les particules sont proches. En revanche, la sollicitation est plus conséquente que dans le cas du chargement $E_{11}\cdot x$.

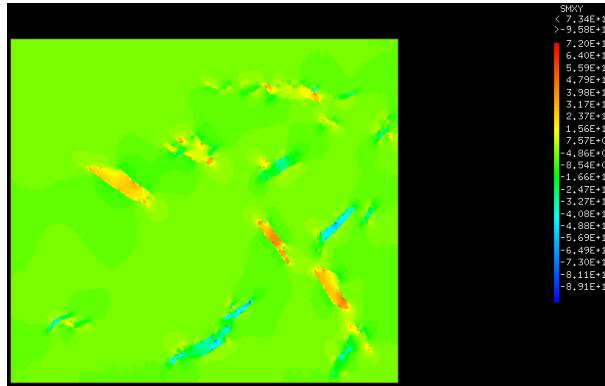


Figure 64: σ_{xy}

La position des particules joue sur le type de sollicitation que l'on va observer, comme on peut le constater sur σ_{xy} (Fig 64).

- Champs de déformations :

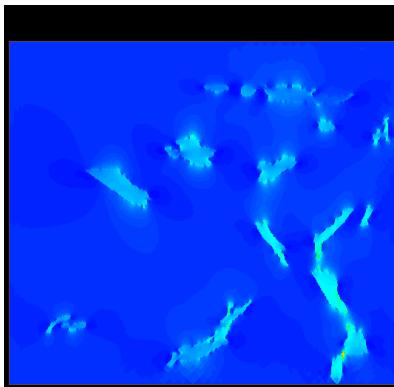


Figure 65: ϵ_{xx}

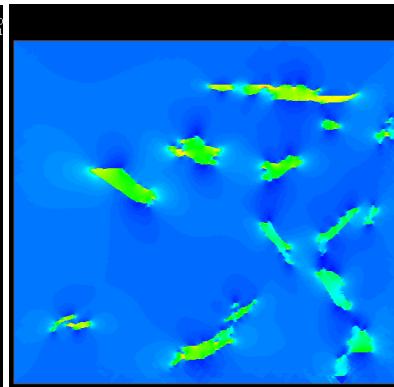


Figure 66: ϵ_{yy}

Pareillement que pour le chargement $E_{11} \cdot x$, les particules avoisinantes subissent de légers gradients de déformation sur ϵ_{xx} (Fig 65). Alors que sur ϵ_{yy} (Fig 66), les particules étendues dans la direction x imposent une grande déformation.

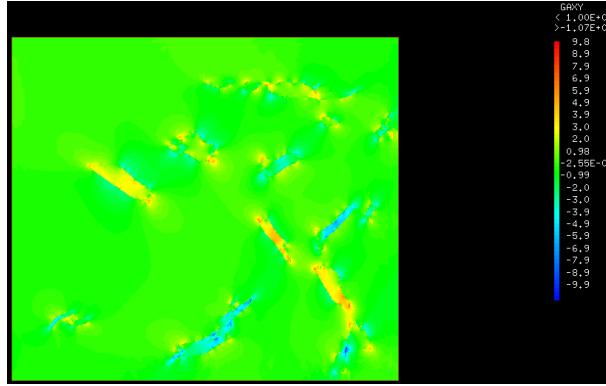


Figure 67: ϵ_{xy}

Pour ϵ_{xy} (Fig 67), la direction des particules dans le plan permet d'observer différents types de déformations.

3. Troisième chargement : $E_{12} \cdot x$

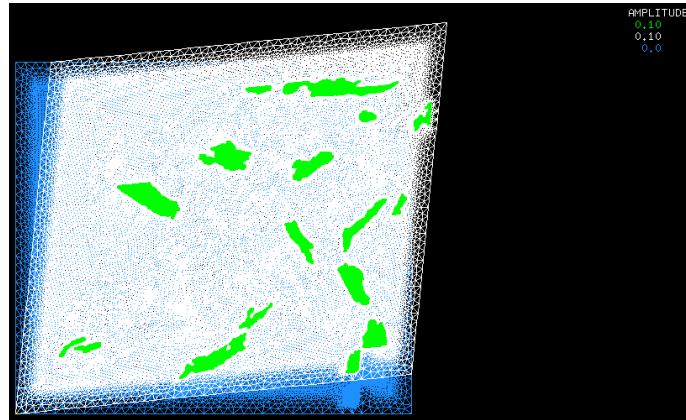


Figure 68: Déformée pour le chargement E_{12}

- Champs de déplacements :

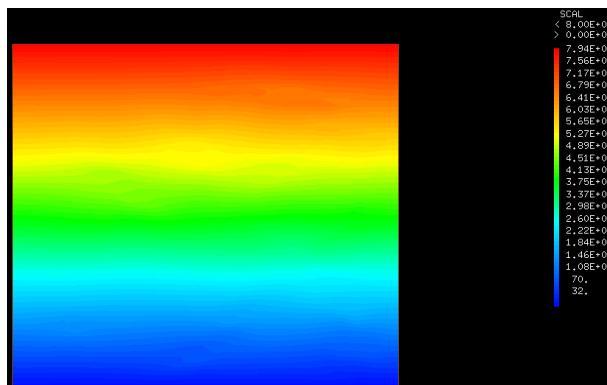


Figure 69: Déplacement U_x

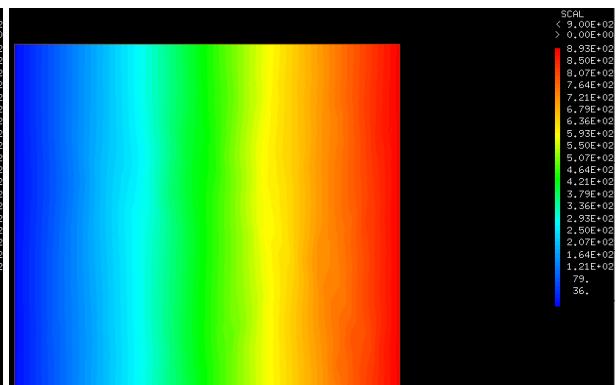


Figure 70: Déplacement U_y

De part la nature du chargement, on constate bien que le déplacement maximal est au niveau de côté supérieur droit du réseau (Fig 69 et Fig 70).

- Champs de contraintes :

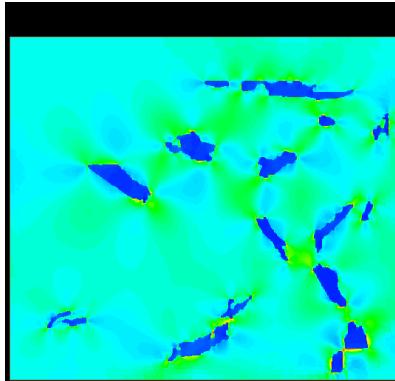


Figure 71: σ_{xx}

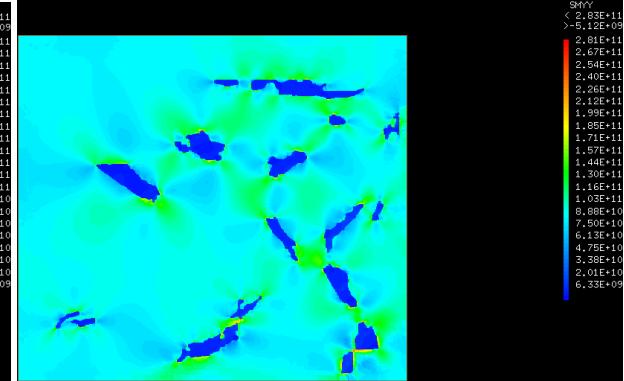


Figure 72: σ_{yy}

Pour les contraintes σ_{yy} (Fig 71) et σ_{xx} (Fig 72), on constate que ce sont les zones interporeuses alignées avec la diagonale du réseau qui sont le plus sollicitées, mais aussi la proximité des particules entre elles.

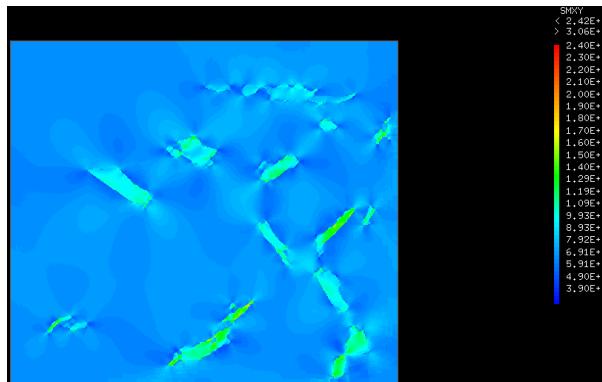


Figure 73: σ_{xy}

On observe également que pour la contrainte σ_{xy} (Fig 73), les particules ajustées avec la diagonale de la microstructure sont plus sollicitées.

- Champs de déformations :

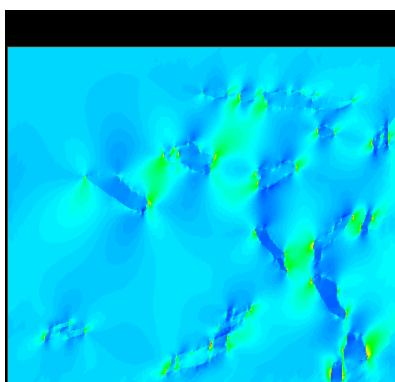


Figure 74: ϵ_{xx}

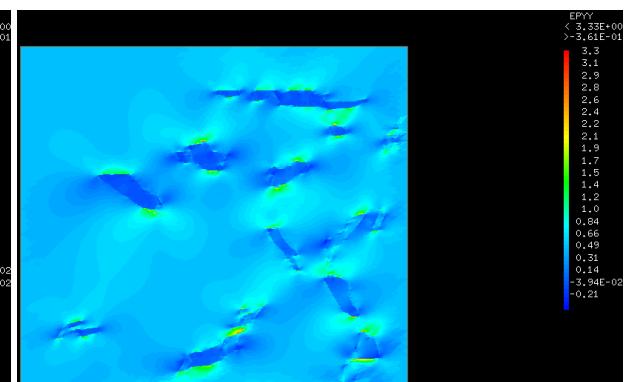


Figure 75: ϵ_{yy}

On observe un comportement similaire des contraintes et des déformations ϵ_{yy} (Fig 75) et ϵ_{xx} (Fig 74). En effet, toutes les particules dont l'inclinaison s'alligne avec la diagonale présentent les plus grandes déformations.

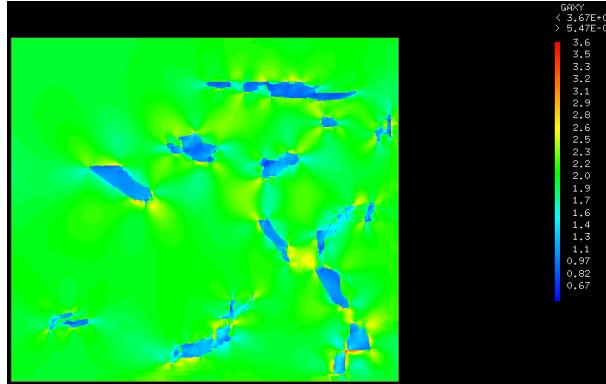


Figure 76: ϵ_{xy}

Pour la déformation ϵ_{xy} (Fig 76), on remarque que l'ensemble de la zone interporeuse est beaucoup plus sollicité que les particules.

5 Conclusion

Cette étude nous a permis de déterminer le comportement mécanique d'un réseau de particules à partir de résultats sur les feuillets. Nous avons pu en conclure que les microstructures, que nous avons obtenu à partir des analyses d'images, correspondaient mieux à des comportements orthotropes.

Retenons que l'inclinaison et la distribution des feuillets ainsi que des particules ont une influence sur les champs de contraintes et de déformations. Pourtant, les chargements que nous avons appliqué à nos microstructures, nous ont permis de vérifier le déplacement de ces dernières.

References

- [1] L. Holzer, B. Münch, M. Rizzi, R. Wepf, P. Marschall, *T. Graule a, 3D-microstructure analysis of hydrated bentonite with cryo-stabilized pore water.* Article, Applied Clay Science 47, 2010.
- [2] Lukas M. Keller, Ali Seiphoori, Philippe Gasser, Falk Lucas, Lorenz Holzer, Alessio Ferrari, *THE PORE STRUCTURE OF COMPACTED AND PARTLY SATURATED MX-80 BENTONITE AT DIFFERENT DRY DENSITIES.* Clays and Clay Minerals, Vol. 62, No. 3, 174–187, 2014.
- [3] F. T. Madsen, *Clay mineralogical investigations related to nuclear waste disposal.* Clay Minerals 33, 109–129, 1998.
- [4] Nevila Jozja, *Étude de matériaux argileux albanais. Caractérisation "multi-échelle" d'une bentonite magnésienne.* Thèse de doctorat, 2003.
- [5] Sandrine Paumier, *FACTEURS DETERMINANT L'ORGANISATION ET LA RHEOLOGIE DU SYSTEME ARGILE-EAU POUR DES SUSPENSIONS DE SMECTITES.* Thèse de doctorat, 2007
- [6] Michael L. Whittaker, Luis R. Comolli, Benjamin Gilberta, Jillian F. Banfielda, *Layer size polydispersity in hydrated montmorillonite creates multiscale T porosity networks.* Applied Clay Science 190, 105548, 2020.
- [7] Benjamin Gilbert, Luis R. Comolli, Ruth M. Tinnacher, Martin Kunz, Jillian F. Banfield, *FORMATION AND RESTACKING OF DISORDERED SMECTITE OSMOTIC HYDRATES.* Clays and Clay Minerals, Vol. 63, No. 6, 432–442, 2015.
- [8] Frederic Hetzel, Daniel Tessier, Anne-Marie Jaunet, Harvey Doner, *THE MICROSTRUCTURE OF THREE NA $\&$ SMECTITES: THE IMPORTANCE OF PARTICLE GEOMETRY ON DEHYDRATION AND REHYDRATION.* Clays and Clay Minerals, Vol. 42, No. 3, 242–248, 1994.
- [9] William J. Likos, Ning Lu, *PORE-SCALE ANALYSIS OF BULK VOLUME CHANGE FROM CRYSTALLINE INTERLAYER SWELLING IN Na⁺ - AND Ca²⁺ - SMECTITE.* Clays and Clay Minerals, Vol. 54, No. 4, 515–528, 2006.
- [10] Roland Pusch, *The microstructure of MX-80 clay with respect to its bulk physical properties under different environmental conditions.* Technical Report, TR-01-08, 2001.
- [11] M. Segad, S. Hanski, U. Olsson, J. Ruokolainen, T. Åkesson, Bo Jönsson, *Microstructural and Swelling Properties of Ca and Na Montmorillonite: (In Situ) Observations with Cryo-TEM and SAXS.* The Journal of Physical Chemistry C, 2012.
- [12] Laurent Gornet: Généralités sur les matériaux composites. <https://cel.archives-ouvertes.fr/cel-00470296v1/document>