

UNIVERSITÉ MONTPELLIER II
— SCIENCES ET TECHNIQUES DU LANGUEDOC —

THÈSE

pour obtenir le grade de
DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ MONTPELLIER II

École Doctorale : INFORMATION, STRUCTURES ET SYSTÈMES
Spécialité : MÉCANIQUE ET GÉNIE CIVIL

Relations microstructure-fissuration-perméabilité dans les milieux granulaires cimentés

par

RAFIK AFFES

Soutenue publiquement le 6 décembre 2012 devant le jury composé de :

Djimedo KONDO	Professeur des Universités	UPMC	Président
Jean-Noël ROUX	Chercheur (Ingénieur en chef)	IFSTTAR	Rapporteur
Samuel FOREST	Directeur de Recherches	ENSMP	Rapporteur
Loïc DARIDON	Professeur des Universités	LMGC	Examineur
Farhang RADJAI	Directeur de Recherches	CNRS	Directeur de thèse
Yann MONERIE	Ingénieur-Chercheur	IRSN	Codirecteur de thèse
Jean-Yves DELENNE	Directeur de recherche	INRA	Codirecteur de thèse
Gauzelin BARBIER	Ingénieur Chercheur	IRSN	Membre invité

Table des matières

Remerciements	7
Introduction générale	9
1 Contexte scientifique et applicatif	13
1.1 Introduction	14
1.2 Le béton	14
1.2.1 Constituants du béton	15
1.2.2 La réaction d'hydratation	16
1.2.3 Description de la microstructure	17
1.2.4 Comportement du béton sous chargement uniaxial	19
1.3 Les matériaux granulaires	20
1.3.1 Les matériaux granulaires cohésifs	21
1.3.2 Les matériaux granulaires cimentés	22
1.4 La rupture	23
1.4.1 Résistance à la rupture d'un matériaux homogène	24
1.4.2 Ténacité dans les milieux de type matrice/inclusions	25
1.5 Conclusion	26
2 Modélisation et étude numérique des matériaux granulaires cimentés	29

2.1	Introduction	31
2.2	Modélisation numérique	31
2.2.1	Approches continues	31
2.2.2	Approches discrètes	32
2.2.3	Approche adoptée	33
2.3	Approche LEM 3D	34
2.3.1	Echantillon numérique	34
2.3.2	Gestion des propriétés mécaniques	36
2.3.3	Méthodes de résolution	42
2.3.4	Gestion de la rupture	45
2.3.5	Validation de la méthode	46
2.4	Etude des mécanismes de rupture	49
2.4.1	Introduction	49
2.4.2	Description du système et des paramètres de l'étude	49
2.4.3	Comportement élastique	52
2.4.4	Transmission des contraintes	58
2.4.5	Résistance à la traction	60
2.4.6	Régimes de rupture	64
2.4.7	Ténacité relative entre phases	67
2.5	Conclusion	70
3	Relation entre la microstructure et la morphologie des fissures.	73
3.1	Introduction	75
3.2	Caractérisation de la microstructure du béton	77
3.2.1	Traitement d'images	78
3.2.2	Agencement spatial des phases	79
3.2.3	Courbe granulométrique	81
3.3	Génération d'assemblages granulaires représentatifs	82
3.3.1	Génération de la courbe granulométrique	82
3.3.2	Distribution granulaire	84
3.3.3	Choix d'un espace paramétrique	87
3.4	Représentativité des échantillons numériques	88
3.4.1	Comparaison des granulométries	89

3.4.2	Comparaison des covariogrammes	90
3.4.3	Approche statistique par descripteurs géométriques	90
3.4.4	Conclusion sur la représentativité statistique	95
3.5	Influence de la microstructure sur la tortuosité des fissures	96
3.5.1	Paramètres numériques	96
3.5.2	Comportement sous chargement	97
3.5.3	Calcul de la tortuosité	98
3.5.4	Observations préliminaires	101
3.5.5	Prise en compte de l'ordre local	103
3.6	Conclusion	109
4	Estimation de la relation perméabilité-microstructure	113
4.1	Introduction	114
4.2	La méthode Lattice Boltzmann	114
4.2.1	Cadre et principes de la méthode LBM	115
4.2.2	Conditions aux limites	117
4.3	Perméabilité : loi de Darcy	117
4.4	Influence de la microstructure sur la perméabilité	118
4.4.1	Construction des échantillons numériques	118
4.4.2	Paramètres et méthodologie	119
4.4.3	Calcul de la perméabilité	121
4.4.4	Relation entre la perméabilité et la tortuosité des fissures	121
4.4.5	Relation entre la texture granulaire et la perméabilité	124
4.5	Conclusion	125
	Conclusion générale	127
4.6	Bilan	128
4.7	Perspectives	129
	Bibliographie	135

Remerciements

Mes tout premiers remerciements vont naturellement à mes trois directeurs de thèse : Farhang Radjaï, Yann Monerie et Jean-Yves Delenne. Ils m'ont proposé des axes de recherche riches et passionnants qui vont m'occuper l'esprit encore quelques années. Ils m'ont de plus laissé la liberté et l'autonomie de les traiter selon mes envies et mes goûts. Un grand merci à vous pour m'avoir dirigé pendant ces trois années avec une grande disponibilité, répondu à mes questions avec pédagogie et aussi pour toutes les discussions extrêmement enrichissantes que nous avons partagées.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude à Jean-Noël Roux et Samuel Forest qui ont accepté de rapporter ce manuscrit, pour le temps qu'ils ont consacré ainsi que pour les remarques qu'ils ont pu formuler le concernant. Merci aussi à Loic Daridon et Gauzelin Barbier pour leur participation au jury et à Djimedo Kondo de m'avoir fait l'honneur de le présider.

J'ai effectué ma thèse au sein du Laboratoire de Mécanique et Génie Civil. Je remercie chaleureusement les membres de ce laboratoire pour m'avoir accueilli, aidé et guidé durant ces trois années.

Je tiens à saluer mes compagnons de thèse : Baptiste, Jean-Philippe, Emna, Patrick, Nawfal, Azdine, Wen, Antoine...pour nos discussions scientifiques et surtout non scientifiques. Parmi eux, je tiens particulièrement à remercier Yoann Chélin pour tous les bons et mauvais moments partagés, pour ses critiques, remarques et conseils.

J'adresse un remerciement particulier à Marion, pour son encouragement, son soutien continu et sa patience aux moments difficiles.

Enfin, je dois une grande reconnaissance à mes parents, qui ont toujours été présents et m'ont toujours soutenu. A eux, je dédie cette thèse.

Introduction générale

La production électrique de la France s'appuie très fortement sur un parc électronucléaire. La question de l'intégrité des structures dans ce domaine constitue un enjeu sociétal important et les méthodes employées dans sa caractérisation se doivent d'être rigoureuses afin de garantir le fondement scientifique des critères de sûreté.

Les deux particularités fortes de l'étude du comportement des matériaux dans le domaine du nucléaire sont, d'une part, l'évolution constante et importante de leurs microstructures due à leur exposition aux ambiances nocives (irradiation, physico-chimie complexe, gradient thermique fort) et d'autre part, l'extrême difficulté à procéder à des mesures locales en ligne de leur comportement. Ces deux particularités font que la modélisation multi-échelles et multi-physiques constitue une démarche naturelle pour une meilleure prise en compte des hétérogénéités et une prédiction fiable du comportement de ces matériaux.

L'évolution de la microstructure du combustible nucléaire n'échappe pas à cette règle. Cette céramique poreuse présente à l'état non irradié une structure polycristalline constituée de plusieurs phases et de macro-pores de fabrication. Dès les premiers temps de séjour en réacteur, le combustible se fragmente sous l'action de différentes sollicitations thermomécaniques et sa structure s'approche progressivement d'un milieu discret. La question du comportement et de l'intégrité de la structure évolutive du combustible est essentielle aux analyses de sûreté. À l'heure actuelle, seules des simulations numériques complexes et coûteuses peuvent prétendre apporter une réponse satisfaisante et quantitative à cette problématique. Un autre matériau à microstructure polyphasique dans le domaine du nucléaire est le béton utilisé pour le confinement des réacteurs et des déchets nucléaires. L'évaluation des éventuels taux de fuite d'une enceinte de confinement soumise à une pression interne, ou encore l'estimation du transport et de la dissémination de radioéléments dans les sols (stockage profond), forment des enjeux cruciaux relatifs à l'étanchéité des structures du nucléaire.

Ces deux matériaux se caractérisent par une microstructure granulaire complexe. Les fragments dans le cas du combustible et le agrégat dans le cas du béton sont polydispersés et comportent une phase interstitielle (figure 1). Leur comportement dépend fortement de cette microstructure polyphasique qui, elle, est principalement contrôlée par les propriétés de la phase granulaire (granulométrie, compacité...) mais aussi par sa disposition spatiale (ordre local, nombre de voisins, désordre global...). Il est aussi certain que leur intégrité mécanique repose sur des paramètres tels que la résistance des phases (fluide ou solide), leurs cohésions mutuelles ou encore la présence de défauts initiaux, comme les pores ou les microfissures, mais leurs contributions ne peuvent être considérées séparément. Modéliser le comportement et la rupture de ce type de matériau exige donc de pouvoir prendre en compte l'ensemble de ces hétérogénéités microstructurales, de contrôler leurs propriétés mécaniques et spatiales, ainsi que de pouvoir considérer leurs évolutions dans le temps. Compte tenu de cette complexité et des analyses statistiques étendues nécessaires à l'établissement des marges d'erreur, il est naturel ici de s'orienter vers des méthodes numériques « adaptées » à la modélisation de ces matériaux.

Dans le cadre de la sûreté des installations nucléaires, le laboratoire de Micromécanique et Intégrité des Structures (MIST) -laboratoire commun de recherches CNRS, IRSN, université Montpellier 2- effectue des recherches sur le comportement des structures constituant le réacteur nucléaire en dehors des conditions nominales de fonctionnement. Le travail présenté dans ce manuscrit a été réalisé au sein du Laboratoire de Mécanique et Génie Civil et entre dans le cadre du programme de modélisation avancée du laboratoire MIST. Un premier objectif de ces travaux a été le développement d'outils numériques dédiés à la modélisation de matériaux à microstructure polyphasique hétérogène en trois dimensions et à l'étude de leurs comportements et des mécanismes microstructuraux qui contrôlent leur rupture.

Si des efforts conséquents ont été faits pour donner à ses développements une généralité suffisante pour être applicable à un panel de matériaux du domaine du nucléaire, elles ont été appliquées dans le cadre de cette thèse à des matériaux granulaires constitués d'un assemblage de particules liées entre elles par une matrice solide. Ce type de matériau, appelé matériau granulaire cimenté (MGC), se retrouve sous différentes formes dans la nature et dans l'industrie. Les mortiers, les bétons, l'albumen de blé ou encore les roches sédimentaires en sont de bons exemples. Un modèle de discrétisation sur réseau, la LEM 3D (Lattice Element Method en trois dimensions) a été développé dans ce cadre. Il se caractérise par sa capacité à décrire chaque phase du milieu par une approche intermédiaire entre les méthodes discrètes, habituellement utilisées pour modéliser les milieux granulaires secs, et les méthodes continues plus adaptées aux milieux composites. Ce modèle offre par ailleurs la rapidité d'exécution nécessaire aux analyses statistiques poussées.

Dans une optique d'analyse d'étanchéité, le second objectif de ces travaux a été d'établir une relation explicite entre la microstructure initiale d'un béton numérique représentatif, la morphologie du réseau de fissures qui peut y apparaître sous chargement et sa perméabilité apparente. L'identification préalable des mécanismes qui contrôlent la rupture des MGC nous a permis de nous placer dans une configuration microstructurale caractéristique des bétons et de nous intéresser plus particulièrement aux rôles de la fraction volumique des inclusions et de

leur étalement granulométrique. L'établissement d'une relation entre la morphologie du réseau de fissure et la microstructure initiale soulève la question de l'influence de la configuration microstructurale locale et de sa prise en compte dans les analyses.

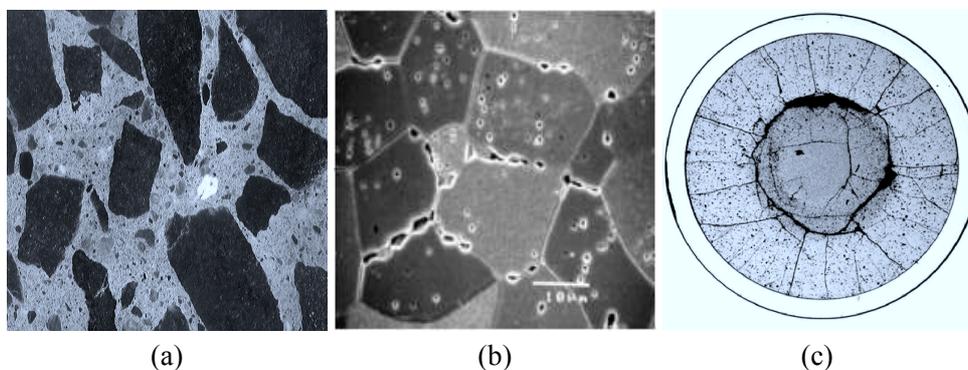


FIGURE 1: Photographies de matériaux polyphasiques hétérogènes. (a) Coupe de béton ordinaire formé de granulats de différentes tailles enrobés dans une matrice cimentaire solide. (b) Microstructure du combustible nucléaire montrant sa structure polycristalline. (c) Coupe d'un combustible irradié montrant sa structure polyphasique. D'après [83]

Ce mémoire comporte quatre chapitres.

Le premier chapitre décrit le contexte scientifique et appréciatif de l'étude. Il présente les concepts et les origines de la cohésion dans les matériaux granulaires, ainsi que les propriétés spécifiques aux matériaux granulaires cimentés en terme de microstructure et de fissuration. Le matériau béton, support d'étude, est aussi présenté en soulignant les notions et concepts liés à sa microstructure et à son comportement.

Le deuxième chapitre est consacré à la compréhension de la rhéologie des matériaux granulaires cimentés et des mécanismes microstructuraux qui contrôlent leur fissuration et leur rupture. Après un état de l'art des principales approches numériques potentiellement adaptées à la modélisation des MGC, une méthode sur réseau, la Lattice Element Method en trois dimensions, est présentée et les détails techniques de son fonctionnement sont explicités. Cette méthode numérique est appliquée à un milieu modèle, un agrégat cimenté poreux, pour étudier le rôle combiné de la fraction volumique de la phase cimentaire et de l'adhésion aux interfaces sur son comportement macroscopique et ses propriétés à la rupture. Des régimes distincts d'endommagement sont ainsi caractérisés. La distribution des contraintes dans le matériau et sa corrélation avec la microstructure sont aussi traités dans ce chapitre.

Dans un troisième chapitre, on cherchera à établir une corrélation directe entre la microstructure d'un béton et la morphologie d'une fissure engendrée par un effort en traction. Une méthodologie de génération et d'analyse d'échantillons de «béton numérique» représentatifs est proposée. Cette méthodologie permet de modéliser les matériaux granulaires cimentés sur la base d'indicateurs morphologiques fins et d'estimer la tortuosité du réseau de fissures qui peut y apparaître sous chargement. La tortuosité est ainsi modélisée comme une fonction de la fraction volumique des inclusions et de leur dispersion granulométrique.

Enfin, le dernier chapitre propose une méthodologie permettant de simuler des écoulements dans les bétons numériques fissurés et de mesurer leur perméabilité apparente. Une corrélation entre la microstructure initiale des bétons fissurés et leur perméabilité est établie et une relation microstructure/tortuosité/perméabilité est proposée.

Le mémoire se termine par une conclusion générale sur les principaux résultats et les perspectives de ces travaux.

Contexte scientifique et applicatif

Sommaire

1.1	Introduction	14
1.2	Le béton	14
1.2.1	Constituants du béton	15
1.2.2	La réaction d'hydratation	16
1.2.3	Description de la microstructure	17
1.2.4	Comportement du béton sous chargement uniaxial	19
1.3	Les matériaux granulaires	20
1.3.1	Les matériaux granulaires cohésifs	21
1.3.2	Les matériaux granulaires cimentés	22
1.4	La rupture	23
1.4.1	Résistance à la rupture d'un matériaux homogène	24
1.4.2	Ténacité dans les milieux de type matrice/inclusions	25
1.5	Conclusion	26

1.1 Introduction

Ce chapitre présente une synthèse bibliographique des notions nécessaires à l'étude des mécanismes de fissuration des milieux granulaires à matrice cimentée ainsi qu'à la recherche d'une corrélation entre leurs microstructure, les fissures qui peuvent y apparaître et leurs perméabilités. Dans une première section, le cas du béton, matériau d'étude dans cette thèse, sera traité et sa composition ainsi que ses propriétés mécaniques et structurelles seront détaillées. Dans une deuxième partie, seront introduites des notions sur les matériaux granulaires et leur rhéologie dans le cas de présence d'une phase cimentaire. Des concepts de base sur la rupture dans ce type de matériaux seront décrits dans une dernière section.

1.2 Le béton

Le béton est un matériau hétérogène multiphasique poreux dont les constituants présentent des caractéristiques physico-chimiques et mécaniques différentes. Il est constitué d'un mélange de granulats et d'une pâte, elle-même constituée à partir de ciment, d'eau et éventuellement d'ajouts [5, 6], voir figure 1.1.

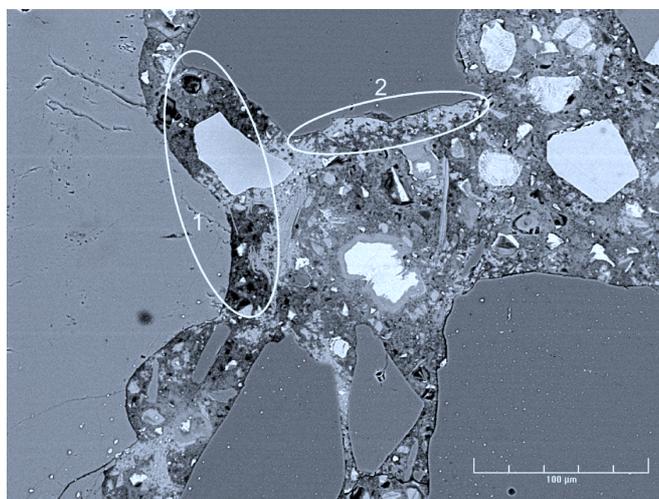


FIGURE 1.1: Microstructure d'un béton ordinaire d'après Karen [108]

Chaque constituant joue un rôle bien défini. Les granulats constituent le squelette en principe inerte du béton, lui confèrent sa compacité, participent à sa résistance mécanique et atténuent les variations volumiques (retrait) lors du durcissement. La pâte de ciment est le siège des réactions d'hydratation des constituants qui conduisent aux processus de prise et de durcissement et la transforment en matrice liante. Le béton, matériau évolutif, connaît des transformations physico-chimiques et structurales tout au long de sa vie.

1.2.1 Constituants du béton

1.2.1.1 La pâte de ciment

La pâte de ciment est le constituant à l'origine de la cohésion du béton, elle représente 20% à 50% du volume total du béton et se caractérise par sa capacité à s'hydrater avec de l'eau et à former une matrice solide qui lie les granulats entre eux. La pâte de ciment se constitue de ciment anhydre, d'eau et d'éventuels additifs.

Le ciment Le ciment anhydre est obtenu par mélange homogène d'argile et de calcaire, ou d'autres matériaux (des ajouts) contenant de la chaux, de la silice, de l'alumine et de l'oxyde de fer, cuits à haute température (température de clinkérisation, à 1450 °C) puis broyés. Tous les ciments courants contiennent du clinker Portland (mélange de calcaire et de silice cuits) qui assure la fonction liante. Cependant, suivant leur type, ils peuvent aussi contenir des constituants secondaires (fumée de silice, cendres volantes, laitiers de haut fourneau...). Le ciment se présente sous forme de grains ayant une grande dispersion de taille (le diamètre varie de 1 à 100 µm) et de forme, dont le diamètre moyen est d'environ 10 µm.

L'eau L'eau permet d'activer la réaction d'hydratation du ciment anhydre et donner une pâte cimentaire durcie. La quantité d'eau initiale est un paramètre de formulation qui conditionne les propriétés mécaniques (résistance, raideur...) et de transfert (porosité, perméabilité...). Ce paramètre est donné par le rapport massique de la quantité d'eau à celle du ciment, noté E/C. Ce rapport affecte également la saturation initiale du matériau, c'est-à-dire l'eau disponible dans le réseau poreux après hydratation.

Les adjuvants Des adjuvants peuvent être éventuellement introduits dans le mélange afin d'améliorer les propriétés du matériau à l'état frais (ouvrabilité) ou à l'état durci. Ils sont présents en faible quantité, moins de 5%, et sont formés de composés organiques aqueux. Parmi les adjuvants les plus courants, on trouve :

- plastifiants et superplastifiants : ils sont utilisés pour fluidifier un mélange ou pour réduire la quantité d'eau utilisée (jusqu'à 30% au moins dans le cas d'une bonne compatibilité entre l'adjuvant et le ciment) ;
- accélérateur / retardateur de prise : les retardateurs de prise sont utilisés pour ralentir la vitesse de prise du matériau. Ils sont pratiques pour des transports de béton frais sur de longues distances. Les accélérateurs de prise ont un effet inverse de celui des retardateurs. Ils sont utilisés par temps froid ou en usine de préfabrication où il est parfois nécessaire d'accélérer la prise du béton pour procéder à un démoulage plus rapide ;
- entraîneurs d'air : le béton, une fois malaxé et mis en place, contient un certain volume d'air résiduel dont la fraction volumique est généralement de 2% à 5%. Le rôle d'un entraîneur d'air est de créer un volume d'air occlus supplémentaire (sous forme de pores), avec pour objectif de rendre le matériau résistant à l'action du cycle gel-dégel.

1.2.1.2 Les granulats

Les granulats utilisés pour la fabrication du béton sont généralement d'origine naturelle. Ils proviennent essentiellement de roches sédimentaires siliceuses ou calcaires, de roches métamorphiques telles que les quartz et quartzites, ou de roches éruptives telles que les basaltes, les granites ou les porphyres. Indépendamment de leur nature, les granulats peuvent être alluvionnaires (dits granulats roulés) ou de carrière (dits granulats concassés). Dans les bétons courants, les granulats utilisés doivent avoir une bonne résistance mécanique et leur courbe granulométrique doit être optimisée pour avoir une grande compacité. Plusieurs classes granulaires sont utilisées dans un même béton :

- sables : grains de dimensions comprises entre 0.08 mm et 4 mm,
- gravillon : ceux dont les dimensions sont comprises entre 4 mm et 25 mm,
- cailloux : ceux de dimensions supérieures à 25 mm.

La résistance mécanique des granulats influence certainement celle du béton, mais sa caractérisation ne fournit que peu d'indication sur les propriétés du béton [79]. En revanche, la qualité de la liaison granulats/pâte de ciment qui elle, est directement influencée par les propriétés des granulats, a un rôle majeur. Cette propriété sera décrite dans la section suivante.

1.2.2 La réaction d'hydratation

Dès le contact de l'eau avec le ciment, plusieurs réactions chimiques ont lieu [4] et ont pour conséquence la solidification progressive de la pâte de ciment. C'est l'ensemble de ces réactions que l'on définit comme l'hydratation. Les produits de ces réactions sont les C-S-H (Hydrates de Silicate de Calcium) principalement à l'origine de la rigidification de la pâte de ciment, et la chaux appelée Portlandite. Les réactions d'hydratation des constituants du ciment sont exothermiques, avec des vitesses d'hydratation différentes pour chaque constituant. Au cours du temps, les produits d'hydratation se forment en diminuant la porosité initiale. En la seule présence d'eau, le clinker réagit très rapidement pour former des aluminates hydratés. Cependant, la présence de gypse dans le ciment a pour conséquence de remplacer cette réaction par une autre plus lente. Les constituants mineurs du ciment ne contribuent que très peu à la solidification de la pâte mais possèdent d'autres propriétés utiles à une bonne hydratation du ciment.

Les réactions d'hydratation ne se font pas à volume constant. Le volume des hydrates produits est plus faible que celui de l'eau et du ciment consommé, ce qui se traduit par un phénomène de retrait de la pâte, appelé "contraction Le Chatelier". Ce mécanisme laisse apparaître une certaine quantité de vides, sous forme de micro-fissures, comblées par l'eau dans le cas d'un mûrissement dans un milieu complètement saturé. Au bout d'une dizaine d'heures, le matériau fait prise : il passe de l'état de suspension à celui de solide. L'hydratation continue longtemps après la prise, ce qui permet le durcissement ; l'évolution des caractéristiques physiques et mécaniques, très rapide dans les heures qui suivent la prise, continue pendant plusieurs mois, mais de plus en plus lentement.

1.2.3 Description de la microstructure

Une fois durci, le béton peut être vu comme un solide hétérogène composé des phases suivantes.

1.2.3.1 La pâte de ciment durcie

La microstructure de la pâte de ciment durcie est constituée d'un solide poreux et de phases liquides et gazeuses présentes dans les pores. Elle est constituée de différents composés chimiques, tels que les différents C-S-H et la Portlandite $Ca(OH)_2$ et de pores à différentes échelles, connectés ou non, contenant de l'eau et de l'air. Pour un béton donné, les quantités de C-S-H et de Portlandite formées dépendent essentiellement du rapport eau/ciment (E/C) et du temps de réaction. Usuellement, une pâte de ciment durcie ordinaire contient 50% à 70% du volume de C-S-H et 25% à 27% du volume de Portlandite.

1.2.3.2 Les granulats

Les granulats constituent une phase généralement inerte au sens où ils ne participent pas à la réaction d'hydratation du ciment. Néanmoins, certaines interactions chimiques avec la pâte de ciment peuvent être préjudiciables au béton comme la réaction alcali-granat. Les granulats participent grandement à la résistance mécanique du béton et leur fraction volumique est de 50% à 80% du volume total du béton. Ils sont caractérisés par leurs courbe granulométrique.

1.2.3.3 Interface pâte/granat

Lors de l'hydratation du ciment, une liaison s'établit entre la pâte de ciment et les granulats qu'elle enrobe. Elle dépend de la nature des deux phases en présence, de la teneur en ciment de la pâte de ciment et des conditions de conservation. Autour des granulats se forme une zone de pâte hydratée particulière, appelée auréole de transition ou zone de transition interfaciale, notée ITZ (Interfacial Transition Zone), observable dans la zone 2 de la figure 1.1. Cette ITZ présente un rapport E/C plus élevé que le reste de la pâte, ce qui rend sa porosité plus élevée que celle de la pâte [114]. Du point de vue mécanique, l'ITZ présente une résistance plus faible que la pâte de ciment elle-même. Les pores, plus grossiers dans cette zone, forment une faiblesse structurelle. L'épaisseur de l'ITZ augmente avec le diamètre du granulat et avec la quantité d'eau d'hydratation (c'est-à-dire avec le rapport E/C) [22]. La nature et la porosité des granulats peuvent aussi influencer l'auréole de transition. L'interface pâte/granat possède un rôle majeur dans le comportement du béton.

1.2.3.4 Les pores

Le béton est un matériau poreux. Les pores sont présents aussi bien dans la matrice solide que dans les interfaces, ou à l'intérieur des granulats, et influencent fortement les propriétés mécaniques du matériau. Ils se caractérisent par leur taille, leur connectivité et leur volume et peuvent être classés en différentes catégories :

- les pores d'air occlus proviennent essentiellement de l'air piégé lors du malaxage du béton. Différentes techniques (damage, vibrations des coffrages, aiguilles vibrantes...) sont appliquées lors de la mise en œuvre pour optimiser la compacité (serrage) et donc minimiser la quantité de bulles d'air. Cette catégorie de pores constitue 2% à 3% du volume total d'un béton ordinaire et a une taille caractéristique millimétrique. Selon la plasticité du béton frais, certaines bulles d'air peuvent cependant atteindre la dimension des plus gros granulats. Un béton possédant une importante quantité d'air occlus aura également une meilleure durabilité face aux cycles de gel-dégel. Les pores présents dans les granulats et qui sont isolés du milieu extérieur font aussi partie de cette catégorie de pores mais sont généralement négligeables ;
- les pores capillaires correspondent au volume qui n'a pas été rempli par les produits de l'hydratation. Ils forment un réseau interconnecté d'épaisseur micrométrique rempli plus ou moins d'eau et sont les principaux responsables de la perméabilité du béton non armé [13]. Ils jouent également un rôle clé dans le processus de rupture du béton ;
- les pores de gel correspondent aux pores présents dans le gel C-S-H. Leur taille caractéristique est inférieure à quelques nanomètres et leur volume est négligeable devant le volume des autres pores. Ils sont par ailleurs isolés et ne semblent pas influencer la résistance du béton [80]. Même à une humidité ambiante très basse, l'eau demeure dans les pores de gel ;
- la microfissuration du béton provient de divers phénomènes. En plus des microfissures causées par la contraction Le Chatelier, lesquelles sont prises en compte dans les pores capillaires, on peut rajouter celles provoquées par les réactions chimiques non souhaitées ou encore par le processus de séchage du béton. Le développement de ces microfissures est généralement à l'origine de la rupture du béton même dans le cas des grosses structures.

La figure 1.2 reprend les différents types de pores et les classe par taille et par origine.

La porosité du béton est une caractéristique intrinsèque de son réseau poreux. Elle est définie par le rapport entre le volume des pores et le volume total du matériau et est notée ρ^v tel que :

$$\rho^v = \frac{V_v}{V_t} = \frac{V_v}{V_v + V_p + V_m} \quad (1.1)$$

où V_t correspond au volume total du matériau, V_v au volume des pores, V_p au volume des granulats (ou particules) et V_m le volume de la matrice solide.

La porosité dépend de plusieurs facteurs : le rapport E/C, la compacité du béton frais, le volume pâte/granulats et la porosité des granulats. La figure 1.3 montre l'évolution de la porosité dans le béton en fonction du temps de séchage et du rapport entre la quantité d'eau et celle de

ciment, E/C.

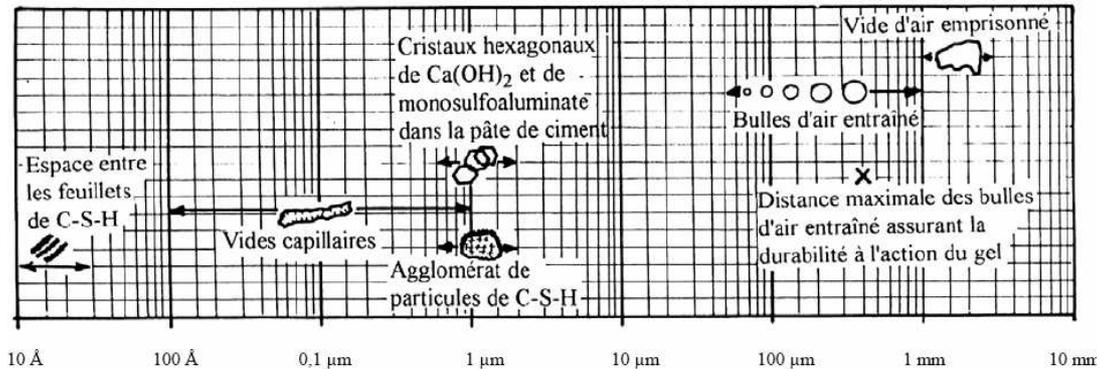


FIGURE 1.2: Les différentes formes de pores dans la pâte de ciment durcie classées par taille d'après Mehta [71] ($\text{Ca}(\text{OH})_2$ étant le symbole chimique de la Portlandite).

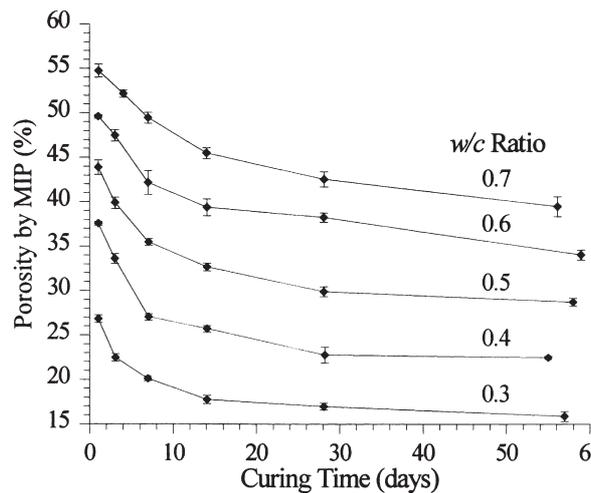


FIGURE 1.3: Effet de la période de séchage en jours (Curing Time) et du rapport E/C (W/C Ratio) sur la porosité (Porosity) de la pâte de ciment, déterminé par Porosimétrie par Intrusion de Mercure (PIM) d'après Cook [16].

1.2.4 Comportement du béton sous chargement uniaxial

Le comportement du béton sous chargement uniaxial monotone peut être schématiquement décomposé en trois phases distinctes [30, 129] observables sur la figure 1.4 dans le cas d'un chargement en compression (a) et dans le cas d'un chargement en traction (b).

1. Phase élastique : le comportement, analogue à celui d'un matériau élastique, se traduisant par une relation linéaire entre la contrainte et la déformation. Dans cet intervalle de

chargement, inférieur à 30% du seuil de rupture en compression (respectivement 80% du seuil en traction), les fissures initialement présentes dans le béton ne se propagent pas. La pente à l'origine de la courbe contrainte/déformation donne le module élastique noté E (l'hypothèse est faite d'un comportement isotrope).

2. Phase d'amorce et de développement des microfissures avant pic : le béton se dégrade et a un comportement non linéaire dû à la propagation de microfissures déjà présentes. La dégradation est progressive et a pour conséquence la modification des propriétés mécaniques du béton. Cette phase se traduit par une incurvation de la courbe contrainte/déformation jusqu'à atteindre le seuil de rupture noté σ_c ou σ_t pour une certaine valeur de déformation noté ϵ_c ou ϵ_t respectivement pour la compression et la traction.
3. Phase de propagation de la rupture : les microfissures se propagent dans le béton et permettent la coalescence des microdéfauts (pores isolés, réseau de pores...) en macrofissures [49, 105] perpendiculaires à la direction de la contrainte principale. La phase post pic se traduit par un comportement adoucissant et s'achève par la ruine du matériau.

La résistance en traction du béton est en général d'un ordre de grandeur inférieur à sa résistance en compression : en traction, l'interface pâte/granulats est directement sollicitée et favorise la microfissuration, tandis que la compression induit tout d'abord la fermeture des microfissures avant de solliciter la pâte de ciment. Le processus de dégradation sous compression est accompagné d'un phénomène important de dilatation dans la direction normale au chargement donnant un comportement post pic plus ductile [88]. En traction et après l'apparition de la fissure, la possibilité de transférer des efforts à travers la fissure résulte d'un phénomène d'engrènement qui dépend entre autres de la taille et du type de granulats, des résistances respectives des granulats et de la matrice (fissure inter ou intragranulaire). Ces paramètres influent sur la valeur limite de déformation au-delà de laquelle la contrainte s'annule. Le tableau 1.5 présente les ordres de grandeur des propriétés apparentes d'un béton ordinaire en compression et en traction uniaxiale monotone où ν est le coefficient de Poisson.

Caractéristiques	Elastique		Compression		Traction		
	Paramètres	E (GPa)	ν	σ_c (MPa)	ϵ_c $1e^{-3}$	σ_t (MPa)	ϵ_t $1e^{-3}$
valeurs		20 - 80	0.2 - 0.3	20 - 800	1 - 5	2 - 8	0.1 - 0.5

FIGURE 1.5: Ordre de grandeur des propriétés mécaniques du béton d'après [30, 129]

1.3 Les matériaux granulaires

Les bétons relèvent d'une classe plus large de matériaux : les milieux granulaires cimentés, eux mêmes représentent un cas particulier des milieux granulaires cohésifs. Les milieux granulaires sont des milieux formés d'une collection de grains ou de particules qui interagissent mécaniquement via des actions de contact, de frottement et de cohésion d'origines diverses. Deux échelles de description seront utilisées dans ce manuscrit :

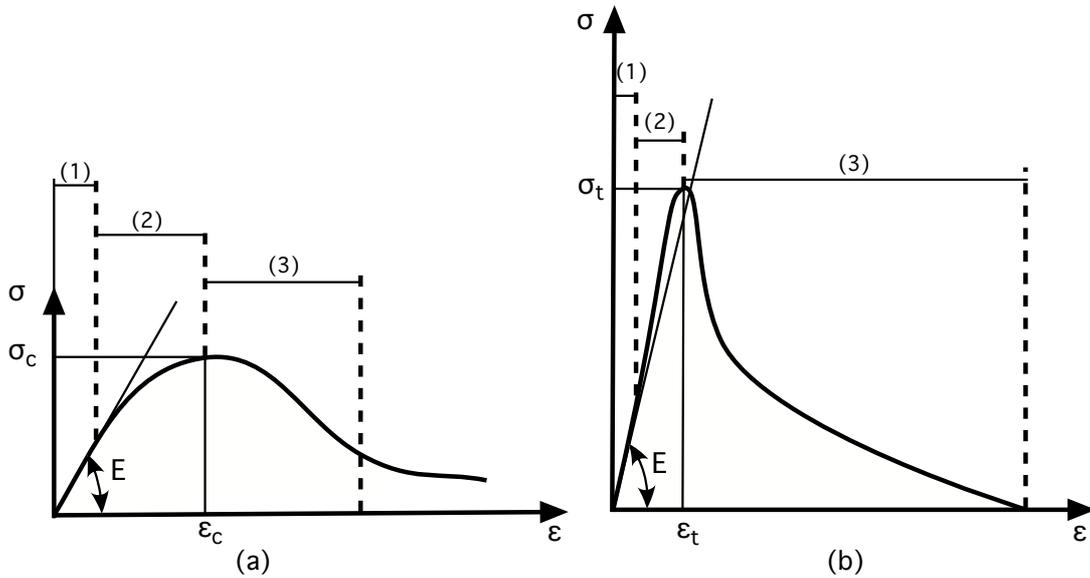


FIGURE 1.4: Comportement du béton en compression (a) et en traction (b) d'après [30, 129].

(1) Phase élastique.

(2) Phase d'amorce et de développement des microfissures.

(3) Phase de propagation de la rupture.

- l'échelle microscopique : c'est l'échelle des particules et des phénomènes qui se produisent à leurs interfaces
- l'échelle macroscopique : c'est l'échelle des assemblages formés d'un grand nombre de particules et auxquels sont appliqués les conditions aux limites de chargement lors des essais mécanique. On parle alors de matériaux granulaires.

Lorsque des phénomènes de cohésion interviennent dans les matériaux granulaires en s'opposant au glissement et au décollement des particules, les matériaux sont dit granulaires cohésifs.

1.3.1 Les matériaux granulaires cohésifs

En l'absence de pression de confinement, la cohésion macroscopique des matériaux granulaires trouve son origine dans les interactions entre les particules. Ces interactions cohésives, ont pour effet de restreindre les déplacements relatifs des particules et peuvent agir de différentes façons :

- à distance par des forces volumiques agissant sur les centres de masse. C'est le cas des forces colloïdales, telles que la force de *van der Waals* ou les forces électrostatiques dans le cas des petites particules, ou encore, les forces gravitationnelles entre les astéroïdes
- directement au niveau des zones de contacts entre les particules et se traduisant par des forces de surface. C'est le cas des interactions physico-chimiques à très courte portée ou dans les ponts liquides au contact entre les particules
- par l'intermédiaire d'un corps occupant plus au moins l'espace poral entre les particules.

C'est la cas du béton qui, de part sa composition, est un matériau granulaire à cohésion non nulle et à frottement interne élevé.

La cohésion dans le béton provient donc de la présence de la phase cimentaire qui occupe tout ou partie de l'espace intergranulats.

1.3.2 Les matériaux granulaires cimentés

Les matériaux granulaires cimentés (MGC) sont formés d'un assemblage dense de particules et d'une matrice solide remplissant plus au moins l'espace poral et assurant la cohésion du matériau. Un grand nombre de matériaux naturels et industriels sont des MGC : les roches sédimentaires, telles que le grès ou les brèches, sont constitués de fragments de roches liés par un ciment naturel ; l'albumen du blé est formé de granules d'amidon, dont la tenue mécanique est assurée par une matrice protéique solide [86, 3] ; beaucoup de matériaux de construction tels que les enrobés ou les mortiers sont aussi des MGC.

La présence de la phase cimentaire, en plus des particules et des pores, confère un caractère polyphasique aux MGC dans lesquels la nature des différentes interfaces (entre deux particules en contacts ou entre les particules et la matrice cimentaire) s'avère être un ingrédient crucial de la cohésion. Différentes études expérimentales et numériques ont montré que l'adhésion au niveau des interfaces contrôlait le comportement à rupture de ces matériaux [107, 145, 72, 121]. Il est donc nécessaire de considérer des lois de comportement et des critères de rupture à part entière aux interfaces (figure 1.6).

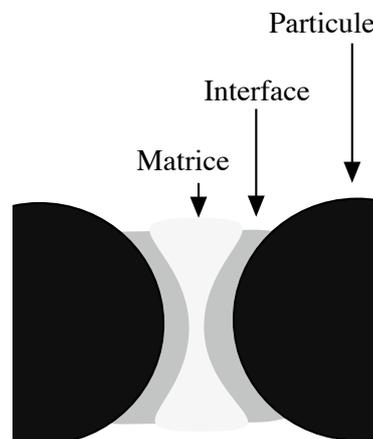


FIGURE 1.6: Représentation de la zone interfaciale entre la matrice et les particules.

En plus, de part le contact direct entre les particules, le transfert de charge dans les matériaux granulaires cimentés se fait à travers la matrice liante qui remplit partiellement ou complètement l'espace poral. Cette phase a une géométrie complexe qui dépend de l'agencement des particules, de son mode de dépôt et de sa fraction volumique. Le comportement mécanique

des MGC sera en grande partie dicté par le comportement volumique des différentes phases et par la présence de pores (directement liée à la présence de la phase matricielle). La texture granulaire des MGC peut être à l'origine de la formation d'un réseau privilégié de transfert de charge dans le volume (figure 1.7). Ce phénomène, dit *effet de voûte*, implique une répartition inhomogène des forces et l'apparition de zones déchargées dans le matériau. L'effet de voûte a de profonds effets sur la réponse mécanique et l'endommagement des MGC et modifie leurs sensibilités aux sollicitations [26, 43, 102]. Si la fraction volumique des particules est élevée, un squelette solide constitué de particules contigües apparaît naturellement. Ce squelette granulaire confère un caractère fragile au matériau et doit être évité dans la formulation des bétons et des enrobés. Les contacts entre particules sont à l'origine de *fractures hertziennes*. Ce mode de fissuration, essentiellement localisé dans les particules a pu être observé dans le cas des conglo-mérats poreux [141]. Cependant, dans le cas où toutes les particules adjacentes sont interposées par des ligaments de matrice, la concentration des contraintes peut encore intervenir à travers ces ligaments le long des chaînes de particules. Ce dernier cas a été illustré expérimentalement dans le cas du béton. Larrard et al. [19, 62] ont montré que le ciment entre les agrégats localise les contraintes fortes, et la résistance à la compression augmente avec la réduction de l'épaisseur de ciment entre les agrégats.

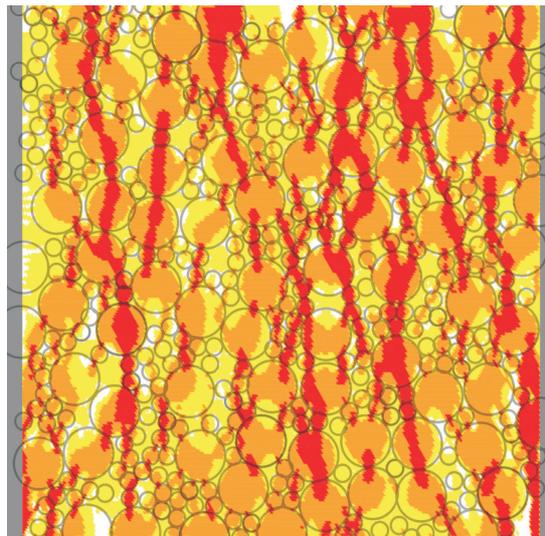


FIGURE 1.7: Carte tricolore représentant les champs de contraintes verticales avant rupture dans un matériau granulaire cimenté soumis à un test de compression d'après Topin [124]. Les contraintes faibles, intermédiaires et fortes sont représentées respectivement en jaune, orange et rouge et correspondent aux réseaux privilégiés de transfert de charge.

1.4 La rupture

L'évolution du comportement des matériaux granulaires cimentés, et en particulier du béton, se caractérise initialement par une phase élastique, où le matériau retrouve sa configuration

initiale s'il est déchargé. Ensuite, au fur et à mesure que le chargement augmente, des microfissures apparaissent de façon homogène et coalescent en une macrofissure qui va croître et se propager jusqu'à rupture du matériau. La mécanique de la rupture étudie l'interaction entre les discontinuités géométriques que sont les microfissures et le milieu continu avoisinant. Elle permet d'analyser les contraintes et les déformations à leur voisinage et de prédire leurs comportements, donc leur propagation, ou à l'inverse, leur arrêt.

1.4.1 Résistance à la rupture d'un matériaux homogène

D'un point de vue local, on peut distinguer schématiquement dans un milieu fissuré, trois zones successives [96] représentées sur la figure 1.8 en fonction de, r la distance à la pointe de fissure :

- la zone de microfissuration (zone 1) : qui se trouve à la pointe de la fissure et dans le sillage laissé par la fissure au cours de sa propagation. Les contraintes dans cette zone sont importantes causant un fort endommagement du matériau. Dans les bétons, cette zone est souvent très étendu
- la zone singulière (zone 2) : dans laquelle les champs de déplacement, de déformation et de contrainte sont continus et non influencés par la géométrie lointaine de la structure. Les composantes du champ de contrainte sont singulières au voisinage de la fissure ($r \rightarrow 0$). La singularité est en $r^{-1/2}$ en milieu élastique linéaire [63]
- la zone 3 : extérieure, comprenant les champs lointains se raccordant d'une part à la zone singulière, et d'autre part aux conditions aux limites en charges et en déplacements. Dans cette zone, les champs de déplacement, de déformation et de contrainte varient peu.

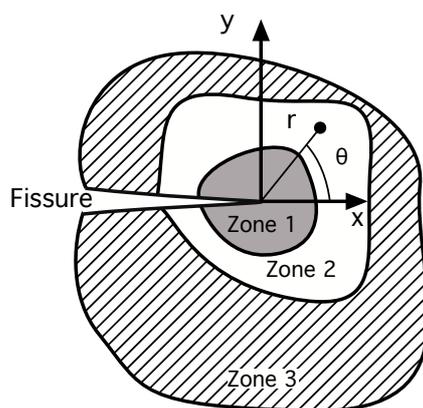


FIGURE 1.8: Zones délimitants le voisinage d'une pointe de fissure.

D'un point de vue macroscopique, toute fissure peut être ramenée à l'un de ces trois modes élémentaires de fissuration ou à leur superposition :

- mode I (clivage) : mode d'ouverture où les surfaces de la fissure se déplacent parallèlement l'une par rapport à l'autre. Ce mode intervient en général lorsque la microfissure à

l'origine de la propagation est perpendiculaire au sens de la sollicitation.

- le mode II (cisaillement plan) : les surfaces de la fissure se déplacent dans le même plan et dans une direction perpendiculaire au front de fissure.
- le mode III (cisaillement antiplan) : les surfaces de la fissure se déplacent dans le même plan et parallèlement au front de fissure.

La rupture se produit lorsque l'énergie restituée par l'extension de la fissure est supérieure à l'énergie nécessaire à créer la surface relative à cette extension. Autrement dit, l'énergie potentielle restituée est consommée par l'extension de la fissure. L'énergie disponible pour ouvrir une fissure de surface S est alors égale à la variation de l'énergie potentielle totale \mathcal{E}_p . Cette contribution mécanique est appelée *taux de restitution d'énergie* G . Elle est définie par Griffith [40] :

$$G = -\frac{\delta\mathcal{E}_p}{\delta S} \quad (1.2)$$

Cette énergie sert à créer de nouvelles surfaces libres, ce qui nécessite des apports d'énergie. Si l'énergie est consommée uniquement dans la rupture, le principe de conservation de l'énergie implique que :

$$\delta\mathcal{E}_p - \delta\mathcal{E}_s = 0 \quad (1.3)$$

où \mathcal{E}_s est l'énergie de surface. Pour qu'une fissure se propage, il faut donc que la variation d'énergie disponible \mathcal{E}_p (issue de la déformation) soit égale ou supérieure à l'énergie $\delta\mathcal{E}_s$ nécessaire à la séparation des deux lèvres de la fissure. Soit $\gamma^S = \delta\mathcal{E}_s/2\delta S$ l'énergie de rupture par unité de surface. La condition énergétique pour la propagation d'une fissure s'écrit alors :

$$G - 2\gamma^S \geq 0 \quad (1.4)$$

En définissant le taux critique de restitution d'énergie G_c comme la somme de l'énergie de rupture surfacique ($2\gamma^S$) et de l'ensemble des énergies dissipées durant le processus de fissuration (plasticité, frottement...), un critère de rupture d'écrit : $G = G_c$.

1.4.2 Ténacité dans les milieux de type matrice/inclusions

La ténacité est la capacité d'un matériau à résister à la propagation d'une fissure. Dans les matériaux polyphasiques hétérogènes tel que le béton, la propagation d'une fissure ne dépend pas uniquement de la ténacité locale des composants mais aussi de la géométrie et des propriétés des phases et des interfaces. Une fissure se propageant dans la matrice solide et atteignant une interface avec un granulat peut soit y pénétrer, soit être défléchie le long de l'interface, selon la nature de cette dernière et les propriétés de la matrice et du granulat (voir figure 1.9).

Les premiers chercheurs à s'être intéressés aux mécanismes de fissuration à l'interface entre deux matériaux sont England et al., Erdogan et al. [27] ainsi que Rice et al. [98]. He [45] a montré par la suite que pour un composite biphasique formé de deux matériaux possédant des

propriétés élastiques isotropes, la compétition entre les deux modes de propagation (pénétration dans le granulats/déflexion dans l'interface) dépendait fortement de la ténacité relative entre les phases. Il a identifié deux grandeurs essentielles en plus de l'angle d'incidence de la fissure :

- le rapport G_d/G_p entre le taux critique de restitution lié à une déflexion G_d , c'est à dire à l'interface, et le taux critique G_p lié à une pénétration dans une inclusion :

$$\begin{cases} \text{si } G^{pm}/G^p > G_d/G_p \text{ alors la fissure pénètre l'inclusion} \\ \text{sinon elle est dérivée à l'interface} \end{cases} \quad (1.5)$$

où G^{pm} et G^p sont respectivement les taux de restitution d'énergie liés à l'interface particule/matrice et aux particules

- d'un paramètre adimensionnel faisant intervenir les paramètres élastiques des deux phases.

Monerie [74] a montré qu'une situation majorante de 0.3 pouvait être retenue pour le rapport G_d/G_p dans une situation de composite à inclusions unidimensionnelles.

Des études expérimentales et numériques ont été menées sur des matériaux plus complexes. Merchant [72] a montré que la différence de rigidité entre les phases de granulats et de ciment dans un mortier gouverne la fissuration, endommageant ou non les inclusions. Le cas du béton a été traité par [9, 10, 100]. Rossello [100] montre que le taux de restitution critique G^{pm} peut être de 35 J/m² lorsque l'interface entre la matrice et les particules est faible, et atteindre 80 J/m² lorsque cette dernière est forte.

Ces études concernent essentiellement des matériaux pour lesquels la porosité est négligée. Dans le béton, en plus de la présence de microfissures lié notamment à la phase de séchage, la matrice n'occupe que partiellement l'espace poral, augmentant ainsi les inhomogénéité dans le milieu. Plusieurs études expérimentales et théoriques sur des conglomerats indiquent que les fissures se propagent essentiellement à travers les pores [142, 141].

La ténacité de l'interface, la différence d'élasticité entre les phases et la fraction volumique de matrice apparaissent donc comme les trois principaux facteurs contrôlant la fissuration et leur impact sur le comportement et la rupture du béton doit être quantifié.

1.5 Conclusion

Dans ce chapitre, le matériau béton a été décrit sur le plan structurel et comportemental. A l'état sec, il est constitué d'un ensemble de granulats et d'une matrice cimentaire solide, remplissant partiellement ou entièrement les espaces interstitiels, et assurant la cohésion des granulats entre eux. Son comportement macroscopique est élastique quasi-fragile et les phases interfaciales, de part leurs structures, forment des zones de faiblesse qui orientent les fissures et jouent un rôle important dans la rupture du matériau. La fissuration du béton est un phénomène naturel lié à son vieillissement et l'étanchéité d'un ouvrage dépend alors de la structure du réseau de fissures qu'il contient (hors armatures).

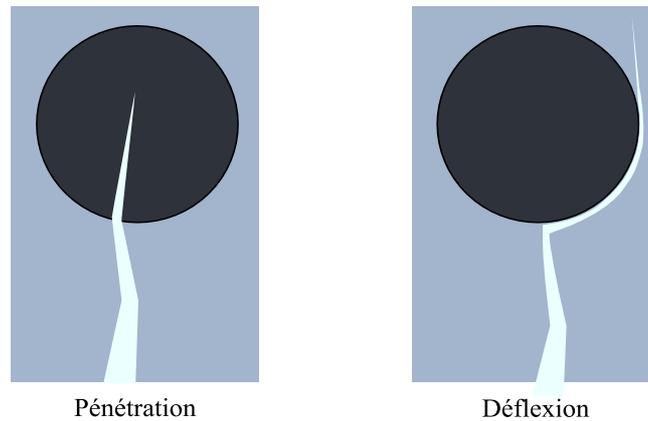


FIGURE 1.9: Propagation d'une fissure dans un matériau à inclusion granulaire par pénétration dans la particule ou par déflexion le long de l'interface.

De façon plus générale, les matériaux granulaires cimentés (MGC), auxquels appartient le béton, possèdent des propriétés propres à leurs texture : leur compacité (fraction volumique des particules) élevée leur confère des propriétés proches des milieux granulaires secs telle que la présence de contacts directs entre les particules ou encore l'effet de voûte ; l'adhésion aux interfaces et les effets volumiques liés à la quantité et la forme de la phase matricielle contrôlent pour une grande part le comportement macroscopique et la rupture. L'influence propre de chacun des composants microstructuraux ainsi que les mécanismes sous-jacents qui mènent à leurs rupture restent cependant mal connus et leurs détermination constitue ainsi une étape décisive dans la compréhension du comportement des MGC.

Un premier objectif de ces travaux de thèse est de caractériser les mécanismes qui contrôlent le comportement et la rupture des MGC en se basant sur une approche quantitative. Ces aspects étant communs à l'ensemble des MGC, ils permettront par la suite la modélisation d'un béton fidèle à la réalité afin d'établir une corrélation pertinente entre sa microstructure et le réseau de fissures qui peut y apparaître.

Modélisation et étude numérique des matériaux granulaires cimentés

Sommaire

2.1	Introduction	31
2.2	Modélisation numérique	31
2.2.1	Approches continues	31
2.2.2	Approches discrètes	32
2.2.3	Approche adoptée	33
2.3	Approche LEM 3D	34
2.3.1	Echantillon numérique	34
2.3.2	Gestion des propriétés mécaniques	36
2.3.3	Méthodes de résolution	42
2.3.4	Gestion de la rupture	45
2.3.5	Validation de la méthode	46
2.4	Étude des mécanismes de rupture	49
2.4.1	Introduction	49
2.4.2	Description du système et des paramètres de l'étude	49
2.4.3	Comportement élastique	52
2.4.4	Transmission des contraintes	58

2.4.5	Résistance à la traction	60
2.4.6	Régimes de rupture	64
2.4.7	Ténacité relative entre phases	67
2.5	Conclusion	70

2.1 Introduction

Les mécanismes qui régissent le comportement mécanique des matériaux granulaires cimentés (MGC) sont complexes. Les charges sont transmises par le réseau de particules en contact, comme dans les matériaux granulaires secs, et à travers les ponts de matrice dont le volume et la surface de contact avec les particules ont une influence certaine [26, 115]. D'autres phénomènes tels que la décohésion des interfaces et l'endommagement des particules rendent la prédiction expérimentale et théorique du comportement des MGC difficile.

Dans ce chapitre, une approche numérique sera utilisée pour étudier un matériau granulaire cimenté, proche d'un béton, en fonction de la fraction volumique de matrice liante de l'adhésion à l'interface entre les granulats et la matrice. Ce matériau modèle tridimensionnel sera soumis à un chargement en traction afin d'étudier la rigidité effective, la résistance à la traction, la transmission des contraintes et les mécanismes de rupture des matériaux granulaires cimentés de façon générale.

Ce chapitre commence par une introduction aux méthodes numériques potentiellement applicables à ce type de matériau, puis par une présentation détaillée du modèle Lattice element method (LEM) en trois dimensions qui sera utilisé. Nous allons ensuite appliquer cette approche pour caractériser le comportement et la rupture de nos échantillons en traction.

2.2 Modélisation numérique

La modélisation théorique de la multifissuration des matériaux granulaires cimentés avec prise en compte de la physique locale peut s'avérer très complexe en raison de leurs caractères hétérogènes et polyphasiques. La modélisation numérique de ces matériaux s'impose aujourd'hui comme un moyen nécessaire pour mieux caractériser les mécanismes physiques à l'échelle des particules. L'objectif est de proposer des modèles théoriques permettant de prédire le comportement macroscopique et de comprendre l'effet de la microstructure et des paramètres locaux.

Il est possible de distinguer deux familles d'approche numérique : les approches continues et les approches discrètes.

2.2.1 Approches continues

Dans les approches continues, le comportement des MGC est modélisé à l'échelle de ses constituants dans le but d'étudier à la fois le comportement homogène et les mécanismes locaux qui interviennent dans l'initiation et la propagation des fissures. Le comportement des phases et la physique du problème sont prises en compte sous la forme de lois de comportement formulées en équations aux dérivées partielles. Les méthodes par éléments finis ou FEM (Finite Element Method) permettent de résoudre ces équations mais nécessitent un maillage extrêmement fin

pour tenir compte de toutes les hétérogénéités microstructurelles des matériaux granulaires cimentés, et donc un temps de calcul conséquent. Une solution consiste alors à insérer les lois de comportement des constituants du matériau dans un volume élémentaire représentatif obtenu par méthodes d'homogénéisation et discrétisé par élément finis. Les méthodes d'homogénéisation trouvent cependant leurs limites quand il s'agit de matériaux à grande densité d'inclusions ou en présence de comportements adoucissants.

Par ailleurs, les lois de comportement dans les éléments finis ne peuvent pas répondre correctement au problème d'endommagement des matériaux, dès lors que les phénomènes tels que l'ouverture et la propagation de fissures jouent un rôle prépondérant, comme c'est le cas dans les MGC. Pour traiter cette question de discontinuité par ce type d'approche, plusieurs solutions ont été explorées. Citons par exemple :

- la famille de méthodes qui consiste à considérer la fissure comme une interface cohésive entre deux mailles d'éléments finis [81] avec éventuellement un processus de maillage adaptatif qui permet de suivre la fissure [51]
- les approches où une discontinuité de déplacement est directement introduite dans la maille comme dans la Strong Discontinuity Approach ou la X-FEM. La X-FEM (Extended Finite Element Method) [7] est très bien adaptée à la modélisation de la propagation de fissures, particulièrement en quasistatique. Appliquer cette méthode sur les matériaux granulaires cimentés demande un temps de calcul important [85] et nécessiterait d'approfondir les questions d'amorçage des fissures et de création éventuelle de fragments indépendants.

Les méthodes dites sans maillage (meshless ou meshfree methods) forment une autre classe d'approches continues dans lesquelles l'information est concentré dans les nœuds pour pouvoir s'affranchir du maillage. Fries et al. [31] proposent une classification de ces méthodes dont les plus connues sont la MPM pour Material Point Method et la EFG pour Element Free Galerkin. Cette famille de méthodes reste coûteuse en temps de calcul et donc inadaptée aux études statistiques nécessaires à la compréhension des mécanismes de rupture des MGC.

2.2.2 Approches discrètes

Les approches discrètes ont été introduites par Cundall [18] et se regroupent sous l'appellation de méthode DEM, pour Discret Element Method, par opposition aux méthodes des éléments finis. Dans toutes ces méthodes, le matériau granulaire est décrit comme une collection de corps rigides et indépendants qui interagissent entre eux. La rhéologie du système est donc obtenue par description des mécanismes physiques à l'échelle locale des particules.

Par ailleurs, les particules se présentant comme des corps globalement indéformables, leurs interactions sont prises en compte à travers des lois de forces reliant la force de contact à une variable de déformation associée au contact (définie à travers des degrés de liberté rigides des particules), et la déformation du système est obtenue simplement par l'intégration des équations du mouvement. Les interactions considérées, telles que la cohésion, le contact ou le frottement, diffèrent selon les méthodes et leurs implantations et de l'application visée.

On distingue essentiellement deux types de méthodes [91] :

- la dynamique moléculaire : cette méthode s’applique à des situations allant du gaz granulaire aux empilements quasistatiques. Les forces de contact trouvent leur origine dans la déformation des zones de contact. La déformation macroscopique du système provient alors de la déformation des contacts et du mouvement relatif des particules. Cette méthode nécessite une discrétisation temporelle très fine et adaptée aux lois de forces à l’échelle du contact
- la dynamique des contacts : dans cette approche, introduite par Moreau et Jean [75, 76, 52, 53], le contact entre les particules est rigoureusement respecté (aucune interpénétration n’est autorisée) et les forces de contact sont décrites par des lois impliquant seulement la vitesse relative des particules en contact. La déformation du système provient uniquement des mouvements relatifs entre les particules. La discrétisation temporelle doit être adaptée à l’échelle de la dynamique des particules et permet de considérer des pas de temps plus grands que dans la dynamique moléculaire. La résolution de la dynamique est traitée de manière implicite.

Les approches discrètes ont été développées à l’origine dans le but de prendre en compte les matériaux granulaires non cohésifs mais quelques adaptations ont été effectuées sur la base de ces deux méthodes, aussi bien en terme d’actions normales et tangentielles entre particules [93, 36] qu’en terme d’actions combinées [21]. La cohésion par capillarité a été appréhendée par des simulations numériques de type DEM [135, 118] en 2D et 3D en introduisant au niveau du contact entre particules des lois d’interaction en traction caractérisant les ponts liquides au sein d’un milieu humide. La modélisation des milieux granulaires à cohésion solide a été abordée sur la base de la dynamique moléculaire, par l’adjonction de lois de cohésion décrivant des liens solides sur une fraction des particules [21]. La cohésion a aussi été abordée par la méthode de dynamique des contacts en introduisant une résistance à la traction et/ou au roulement entre les particules [78].

Malgré la possibilité de prendre en compte des lois assurant la cohésion entre les particules, les méthodes DEM restent peu adaptées à la modélisation des matériaux granulaires cimentés. En effet, ces méthodes ne permettent pas de prendre en compte la déformation et l’endommagement des particules. Par ailleurs, la présence d’une phase interstitielle implique la réalisation d’un couplage entre un milieu continu (la matrice) et un milieu discret (les particules).

2.2.3 Approche adoptée

L’approche adoptée pour modéliser les matériaux granulaires cimentés en général et les bétons en particulier, est une approche sur réseau qui pourrait être qualifiée d’intermédiaire entre les méthodes discrètes et les méthodes continues. Lattice Element Model en trois dimensions ou la LEM 3D permet de modéliser des microstructures complexes en garantissant un bon compromis entre l’efficacité numérique et la bonne description physique du système. Elle a été récemment appliquée à la simulation d’agrégats cimentés en 2 dimensions [124].

Dans la LEM 3D, le matériau n’est pas représenté par un ensemble d’éléments volumiques,

comme en éléments finis, mais plutôt par une distribution de points, les nœuds, reliés entre eux par des lois d'interaction. Seules des lois locales, comme l'équilibre des forces et des moments, sont considérées, et leur implémentation se fait au niveau de chaque nœud relié à un nombre limité de voisins. La rupture est naturellement prise en compte à travers la rupture des interactions entre les nœuds si certains critères en force ou en déplacement sont atteints. Les méthodes sur réseau ont beaucoup été utilisées dans l'étude statistique de la mécanique de la rupture dans les matériaux désordonnés et appliquées à l'étude des propriétés de fracturation de céramiques et de bétons [11, 12, 15, 20, 28, 46, 33, 64, 87, 106, 131, 130, 132, 137, 138].

Le détail de cette méthode est présenté dans la section suivante.

2.3 Approche LEM 3D

Un matériau granulaire cimenté peut être considéré comme un milieu constitué de particules, de matrice et de vides. L'approche LEM en trois dimensions permet de discrétiser ces phases et leurs interfaces sur un réseau d'éléments unidimensionnels pouvant avoir différents comportements rhéologiques. La complexité de la microstructure et le comportement de ses phases sont ainsi pris en compte. Dans cette section nous détaillerons les points suivants :

- la génération des échantillons de milieux granulaires cimentés, leur discrétisation et la prise en compte des propriétés mécaniques de leurs différentes phases et interfaces,
- la résolution numérique des problèmes mécaniques,
- le traitement des données issues du calcul.

2.3.1 Echantillon numérique

Les échantillons utilisés dans la méthode LEM sont générés par un protocole numérique préliminaire qui définit géométriquement les phases et leur organisation avant de les mailler et de leur attribuer des propriétés mécaniques.

2.3.1.1 Milieu granulaire

La méthode LEM permet de prendre en compte toutes formes d'agrégats, mais pour des raisons de facilité de mise en œuvre, ils seront approchés dans un premier temps par des particules parfaitement sphériques. Ces particules peuvent être mono ou polydisperses, en contacts ou non, et peuvent être distribuées spatialement de différentes façons.

2.3.1.2 Zone interstitielle

L'espace interparticulaire est rempli par des ponts de matrice suivant un critère de voisinage en distance. Entre deux particules qui vérifient ce critère, s'établit un pont de matrice de la forme d'un cône tronqué dont l'épaisseur est proportionnelle aux rayons des particules et varie en fonction d'un angle de remplissage θ (2.1). La fraction volumique de matrice notée ρ^m est une fonction directe de l'épaisseur de ces ponts. Quand θ augmente, les ponts de matrice prennent du volume et remplissent progressivement tout l'espace interstitiel, baissant ainsi la porosité du milieu. La figure 2.2 montre, pour un même assemblage granulaire, deux fractions volumiques de matrices différentes.

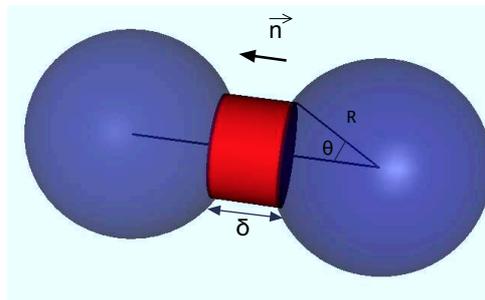


FIGURE 2.1: Un pont de matrice cylindrique entre deux particules de même rayon R à une distance δ et avec un angle de remplissage θ .

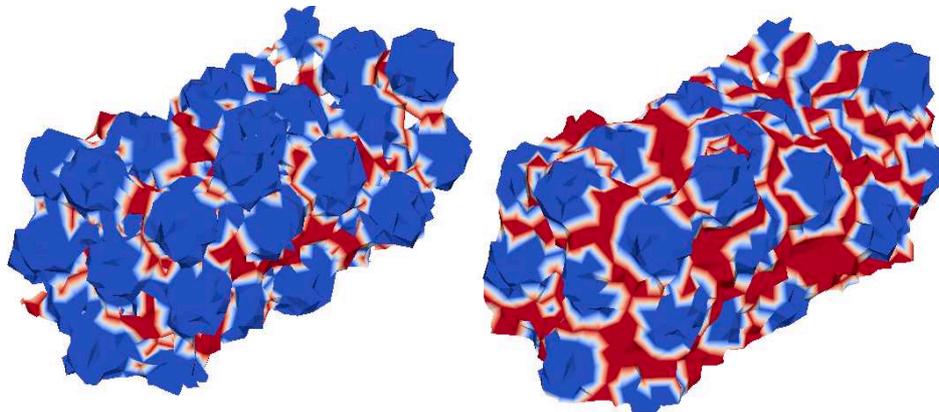


FIGURE 2.2: Même assemblage granulaire (en bleu) avec deux valeurs différentes de ρ^m (en rouge). Les interfaces entre les particules et la matrice sont représentées en blanc.

2.3.1.3 Maillage et attribution des phases

Le milieu obtenu est discrétisé par un réseau triangulaire, régulier ou non, de nœuds interconnectés par des éléments unidimensionnels. Chaque nœud du réseau a un nombre de voisins initialement connu et figé. L'actualisation de la liste de voisinage n'est alors pas nécessaire.

Les éléments représentent les différentes phases et interfaces du milieu. L'attribution de ces éléments se fait de la façon suivante :

- les éléments dont les deux nœuds font partie d'une même phase représentent cette phase. De cette façon, sont formés les éléments matrice et les éléments particule dont les propriétés mécaniques seront respectivement indexés par m et p
- les éléments dont l'un des nœuds fait partie de la phase porale seront des éléments vides dont les propriétés mécaniques, indexées par v , seront nulles
- un élément dont les nœuds appartiennent à deux particules différentes formera un élément interface particule/particule dont les propriétés mécaniques seront indexées par pp
- un élément dont un nœud fait partie d'une particule et l'autre de la matrice sera un élément interface particule/matrice et portera l'index pm .

Ainsi seront pris en compte les trois phases et les deux interfaces de la microstructure des matériaux granulaires cimentés.

La figure 2.3 reprend schématiquement les différentes étapes de la création d'un échantillon de matériau granulaire cimenté.

2.3.2 Gestion des propriétés mécaniques

2.3.2.1 Comportement rhéologique des éléments unidimensionnels

Les éléments unidimensionnels qui relient les nœuds portent les propriétés mécaniques de la phase ou de l'interface qu'ils représentent et peuvent avoir différents comportements rhéologiques.

Éléments linéaires élastiques fragiles

Pour modéliser les matériaux élastiques fragiles tels que le béton, la configuration la plus simple est de considérer des éléments avec un comportement de ressort fragile. Ce type d'éléments est souvent utilisé dans l'analyse statistique de la rupture [102]. Chaque élément est caractérisé par une raideur k (constante de Hooke) et un seuil de rupture en force f_c . Les éléments transmettent uniquement une force radiale entre les nœuds du réseau, la résistance en cisaillement de l'ensemble étant assurée par la connectivité des nœuds.

La force radiale f est alors proportionnelle à l'allongement Δl de l'élément tel que :

$$f = k\Delta l = k(l - l_0) \quad (2.1)$$

où l_0 est une longueur de référence. Dans un système sans auto-contrainte, l_0 correspond à la longueur d'équilibre de l'élément. L'élément s'allonge donc linéairement jusqu'à atteindre un seuil de rupture f_c , représentant la cohésion de la phase ou de l'interface avec une autre. Au-delà, l'élément est considéré comme rompu et sa raideur est mise à zéro.

Il est aussi possible de prendre en compte un comportement élastique non linéaire ou bien remplacer les ressorts par des éléments unidimensionnels de type poutre. Dans ce dernier cas,

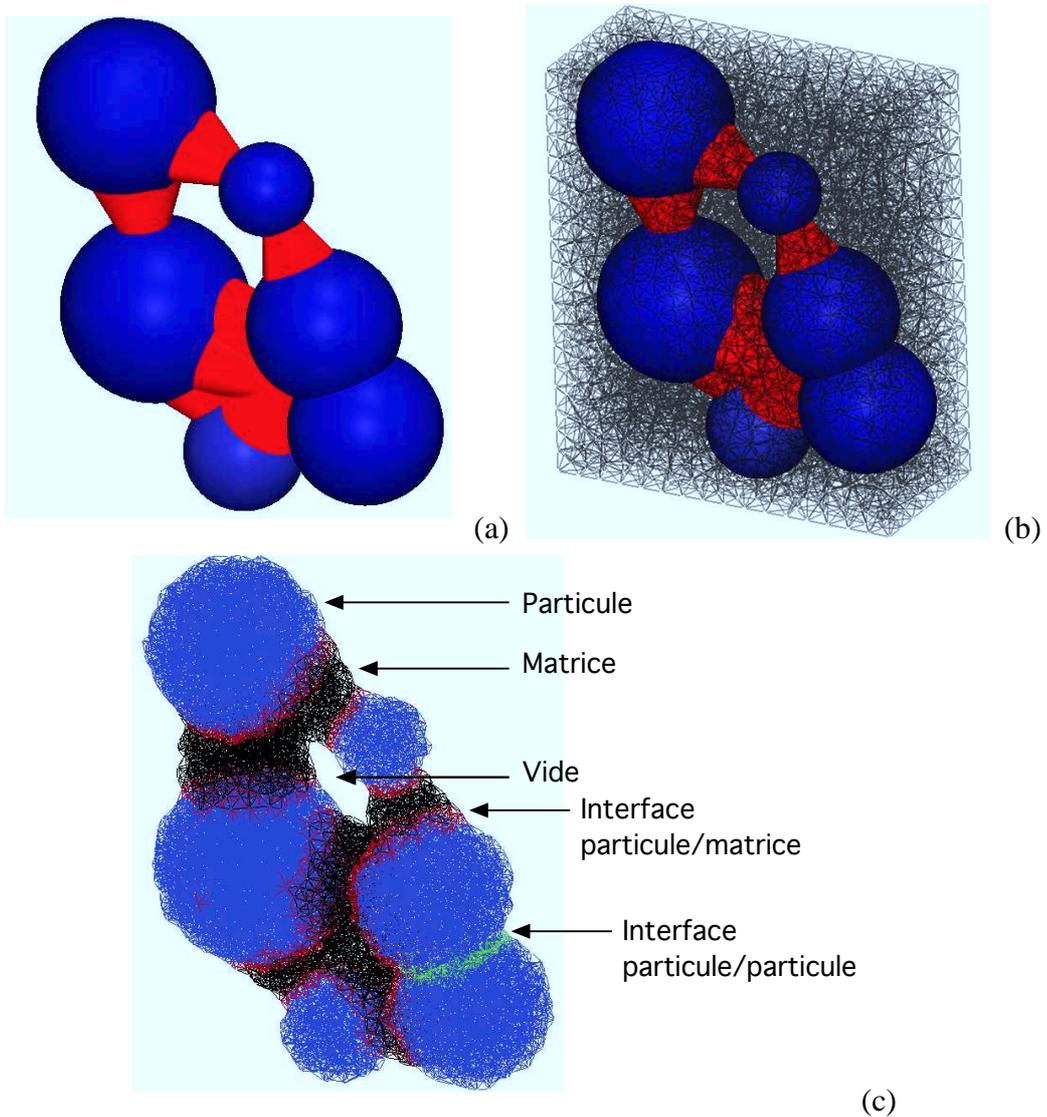


FIGURE 2.3: Attribution des phases. (a) Echantillon granulaire avec les particules en bleu et les ponts de matrice en rouge. (b) Superposition du maillage. (c) Attribution des phases et des interfaces.

les éléments permettent de transmettre, en plus de la force normale, une force de cisaillement et un moment. L'utilisation des éléments de ce type n'est pas strictement nécessaire dans la mesure ou un réseau de ressorts permet de reproduire un comportement élastique isotrope ou non isotrope ainsi que tous les modes de rupture.

Eléments à métrique variable

Il est possible d'avoir des éléments dont la longueur de référence est couplée avec un champ de températures. Dans un système soumis à un gradient thermique, la longueur de référence des éléments dépend de leurs positions. La figure 2.4 montre le cas d'un cylindre soumis à un champ de températures qui induit un gradient de dilatation sur les éléments d'après la loi suivante :

$$D\dot{T}(t) = -\alpha \frac{r_i}{R_0} \quad (2.2)$$

où D est le coefficient de diffusion thermique, t est le temps, r_i est la distance entre l'élément i et l'axe du cylindre, R_0 est le rayon du cylindre et α est le coefficient de dilatation thermique. Les dilatations différentielles entre le centre et la périphérie induisent des contraintes tangentielles de traction qui conduisent à une fissuration radiale et transversale du cylindre. La concentration de contraintes radiales au centre initie la rupture du centre vers la périphérie.

Changer la longueur de référence permet aussi d'introduire la plasticité au niveau des éléments. Dans ce cas, leur longueur d'équilibre change définitivement après avoir atteint un seuil en longueur. Le lien entre la plasticité des éléments et la plasticité du matériau à l'échelle macroscopique n'étant pas très bien caractérisé dans les méthodes sur réseau, ce type de comportement n'a pas été traité durant cette thèse.

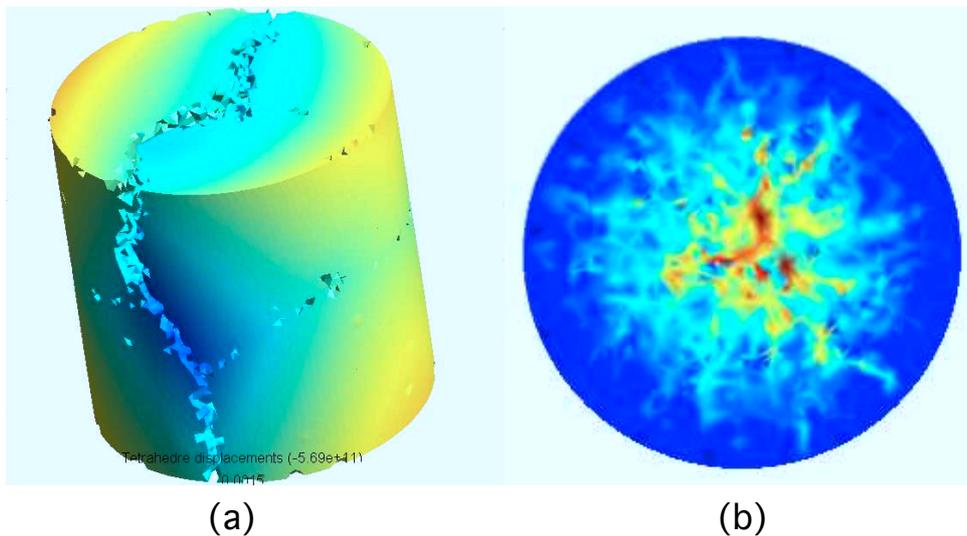


FIGURE 2.4: Cylindre soumis à un gradient de température. (a) Champs de déformation dans le cylindre. (b) Contraintes radiales dans une coupe.

2.3.2.2 Notations

Sont introduites dans cette section les notations relatives aux phases et à leurs comportements dans les assemblages granulaires maillés par des éléments linéaires élastiques fragiles. Ces notations seront utilisées dans la suite de ce mémoire.

Les assemblage granulaires cohésifs sont formés par des phases : 1) les particules, notées 'p', 2) la matrice, notée 'm', et 3) l'espace vide ou poral, noté 'v' ; et par des interfaces : 1) l'interface particule/particule, notée 'pp', et 2) l'interface particule/matrice, notée 'pm'. Les éléments se trouvant dans une phase ou interface ϕ possèdent une constante de Hooke k^ϕ et un seuil de rupture en force f^ϕ . Dans la phase porale, f^v et k^v sont nuls.

Les interface sont formées d'une monocouche d'éléments 'pm' and 'pp' du fait de leur nature de surface entre deux phases (entre deux particules différentes ou entre une particule et la matrice). Le comportement global des échantillons est affecté par la surface spécifique (surface totale par unité de volume) des interfaces, par leurs résistances représentées par leurs constantes de Hooke k^{pm} et k^{pp} et par leurs seuils de rupture en force correspondant, f^{pm} et f^{pp} .

Il est plus pratique d'exprimer les paramètres des éléments en unité de contrainte. Soit, pour une phase ou une interface ϕ , la contrainte de rupture $\sigma^\phi \equiv f^\phi/a^2$ et le module $E^\phi \equiv k^\phi/a$, où a est la longueur moyenne des éléments. Le module E^ϕ d'un élément est distinct du module effectif de la phase, qui lui, dépend à la fois du module de l'élément et de la géométrie du réseau du maillage. Dans ce mémoire, les modules effectifs des phases et interfaces seront mis entre accolades : $E^{[p]}$, $E^{[m]}$, $E^{[pp]}$ et $E^{[pm]}$. Cela sera le cas pour toutes les grandeurs effectives.

2.3.2.3 Comportement équivalent

Les éléments ressorts avec seuil de rupture confèrent à chaque phase un comportement effectif élastique fragile avec un module élastique qui dépend de la géométrie du réseau du maillage et des propriétés propres des éléments. Dans un réseau triangulaire régulier et isotrope en trois dimensions, la cellule élémentaire du maillage a la forme d'une *orthobicoupole hexagonale* (*solide de Johnson numéro 27*) représenté dans la figure 2.5.

Le comportement effectif $E^{[\phi]}$ d'une phase de module E^ϕ et discrétisée par un tel maillage peut être déduit de l'analyse énergétique suivante. Soit \mathbf{n} le vecteur unitaire dans la direction de l'axe d'un milieu isotrope transverse et \mathbf{i} le tenseur identité de second ordre. Le tenseur identité de second ordre dans le plan transverse s'écrit alors $\mathbf{i}_T = \mathbf{i} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$ où \otimes correspond au produit tensoriel. Les bases des tenseurs symétriques isotropes transverses de quatrième ordre sont alors définies par les six tenseurs suivants :

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_l &= \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}, & \mathbf{J}_t &= (1/2)\mathbf{i}_T \otimes \mathbf{i}_T, \\ \mathbf{K}_t &= \mathbf{I}_t - \mathbf{J}_t, & \mathbf{F} &= (1/\sqrt{2})\mathbf{i}_T \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}, & \mathbf{I}^\top \mathbf{F}, \\ \mathbf{K}_l &= \mathbf{K} - \mathbf{K}_t - (1/6)(2\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \mathbf{i}_T) \otimes (2\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \mathbf{i}_T), \end{aligned}$$

où \mathbf{I}_t est le tenseur identité de quatrième ordre dans le plan transverse et $\mathbf{K} = \mathbf{I} - \mathbf{J}$ avec $2\mathbf{I}_{ijkl} = (\mathbf{i}_{ik}\mathbf{i}_{jl} + \mathbf{i}_{il}\mathbf{i}_{jk})$ et $3\mathbf{J} = \mathbf{i} \otimes \mathbf{i}$. Par ailleurs, les tenseurs symétriques \mathbf{J} et \mathbf{K} définissent les bases génériques des tenseurs isotropes symétriques de quatrième ordre. Le tenseur effectif élastique de rigidité de quatrième ordre $\mathbf{C}^{[\phi]}$ d'une phase ϕ est défini par :

$$\mathcal{E}_p = \frac{1}{2}\varepsilon : \mathbf{C}^{[\phi]} : \varepsilon = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{12} \mathcal{E}_p^i(x_i)$$

où \mathcal{E}_p et $V = 2\sqrt{5}/3$ sont respectivement l'énergie potentielle et le volume *orthobicoupole hexagonale* possédant des arrête de longueur unitaire ($a = 1$), ε et le tenseur de déformation symétrique de second ordre, $\mathcal{E}_p^i(x_i) = \frac{k^\phi(x_i \cdot \varepsilon \cdot x_i)^2}{2x_i \cdot x_i}$ est l'énergie potentielle du i -ème nœud de coordonnée x_i et k^ϕ est la constante de Hooke des éléments du réseau. Pour cette forme spécifique de réseau, on obtient après des développements algébriques :

$$\frac{\mathbf{C}^{[\phi]^{(i)}}}{k} = \frac{4\sqrt{2}\mathbf{E}_l}{5} + \frac{2(\mathbf{F} + {}^T\mathbf{F})}{5} + \frac{2\mathbf{J}_t + \mathbf{K}_t}{\sqrt{2}} + \frac{2\sqrt{2}\mathbf{K}_l}{5}.$$

Dans le cas d'un réseau irrégulier, dont un exemple de cellule élémentaire est représentée dans la figure 2.6, le tenseur de rigidité effectif est obtenu par projection du terme précédent dans les bases des tenseurs isotropes symétriques de quatrième ordre [35] :

$$\mathbf{C}^{[\phi]} = \frac{\mathbf{J} :: \mathbf{C}^{[\phi]^{(i)}}}{\mathbf{J} :: \mathbf{J}} \mathbf{J} + \frac{\mathbf{K} :: \mathbf{C}^{[\phi]^{(i)}}}{\mathbf{K} :: \mathbf{K}} \mathbf{K} = 3\kappa^{[\phi]} \mathbf{J} + 2\mu^{[\phi]} \mathbf{K}$$

où le module d'élasticité isostatique $\kappa^{[\phi]}$ et le module de cisaillement $\mu^{[\phi]}$, après quelques développements sont donnés par :

$$\kappa^{[\phi]} = \frac{2\sqrt{2}}{5} k^{[\phi]}, \quad \mu^{[\phi]} = \frac{6\sqrt{2}}{25} k^{[\phi]}.$$

Le comportement équivalent d'une cellule élémentaire est alors élastique fragile et leur module de Young et le coefficient de Poisson sont donnés par (pour $a = 1$) :

$$E^{[\phi]} = \frac{9\kappa^{[\phi]}\mu^{[\phi]}}{3\kappa^{[\phi]} + \mu^{[\phi]}} = \frac{3\sqrt{2}}{5} k^{[\phi]}, \quad \nu^{[\phi]} = \frac{3\kappa^{[\phi]} - 2\mu^{[\phi]}}{2(3\kappa^{[\phi]} + \mu^{[\phi]})} = \frac{1}{4}.$$

Soit d'une manière générale :

$$E^{[\phi]} = \frac{3\sqrt{2}}{5} E^\phi, \quad \nu^{[\phi]} = \frac{1}{4} \quad (2.3)$$

On note en particulier que le cinématique réduite d'un réseau maillé par des ressorts conduit à un coefficient de Poisson apparent par phase dont on connaît à priori la valeur et qu'il n'est pas possible de modifier. Cette valeur dépend du réseau choisi.

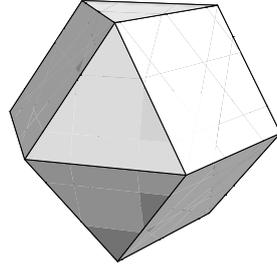


FIGURE 2.5: Cellule élémentaire d'un réseau d'orthobicoupe hexagonale.

2.3.2.4 Calcul des contraintes

Par définition, le tenseur des contraintes de Cauchy ne prend de sens que pour un nombre important de points matériels à l'intérieur d'un volume de contrôle, de telle manière que la densité de force surfacique soit une moyenne statistique bien définie. D'après les travaux réalisés par Moreau [77], il est néanmoins possible d'attribuer un tenseur de contrainte à chaque nœud du réseau avec les mêmes propriétés de symétrie que le tenseur de Cauchy et tendant vers ce dernier lorsque ils sont moyennés à l'intérieur d'un volume. Pour un nœud i , la contrainte $\sigma_{\alpha\beta}^i$ est définie à partir de la somme des moments tensoriels $M_{\alpha\beta} = l_{\alpha} f_{\beta}$ des éléments qui le connectent aux nœuds voisins j :

$$\sigma_{\alpha\beta}^i = \frac{1}{V^i} \sum_j l_{\alpha}^{ij} f_{\beta}^{ij} \quad (2.4)$$

où V^i est le volume de la cellule élémentaire sur un nœud i et l_{α}^{ij} f_{β}^{ij} sont respectivement les longueur et force relatives à l'élément unidimensionnel situé entre i et j (voir figure 2.6).

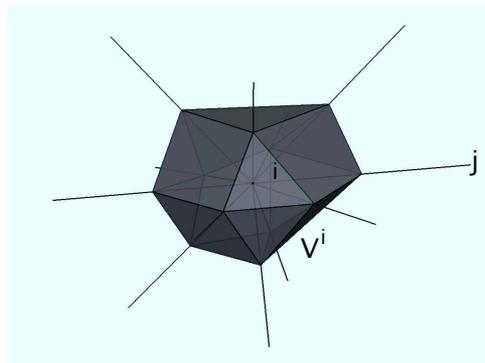


FIGURE 2.6: Un nœud i et la cellule de Voronoï correspondante obtenue par un maillage irrégulier et définissant le volume V^i utilisé dans le calcul des contraintes aux nœuds.

La contrainte macroscopique $\sigma_{\alpha\beta}$ est obtenue en effectuant la somme des tenseurs de moment $\sigma_{\alpha\beta}^i$ sur l'ensemble des nœuds divisée par le volume total V [123] :

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \sum_i \sigma_{\alpha\beta}^i V^i = \frac{1}{V} \sum_i M_{\alpha\beta}^i \quad (2.5)$$

2.3.3 Méthodes de résolution

Les échantillons numériques peuvent être sollicités en imposant des déplacements ou des forces sur les nœuds qui forment leurs frontières extérieures. L'état initial est considéré comme l'état de référence. Deux méthodes de résolution ont été implémentées dans le modèle LEM, une méthode quasi-statique basée sur la minimisation de l'énergie du système, et une méthode dynamique basée sur l'intégration des équations de mouvement des nœuds du maillage.

2.3.3.1 Méthode quasi-statique

Suite à une sollicitation, il existe deux solutions rigoureusement équivalentes pour déterminer la position d'équilibre d'un ensemble de nœuds interconnectés par des ressorts :

- appliquer le principe fondamental de la dynamique en écrivant l'équilibre des forces sur chaque nœud du réseau. La solution est alors obtenue en inversant la matrice de rigidité. Un avantage majeur des méthodes sur réseau est de pouvoir simuler de grands systèmes qui impliquent dans le cadre de cette méthode des matrices de rigidité très grandes et donc coûteuses à stocker et à manipuler. De la même façon, cette méthode nécessite une procédure de maillage et d'indexation des nœuds particulière pour pouvoir optimiser la matrice de rigidité,
- déterminer la position d'équilibre unique de l'ensemble des nœuds pour laquelle le système aurait dépensé le moins d'énergie, ce qui se traduit numériquement par la position où l'énergie totale du système est minimum. Cette méthode permet aussi d'introduire des contraintes supplémentaires dans le calcul de l'énergie telles que le maintien du volume des mailles du réseau constant pendant la déformation. De plus, pour les grands systèmes, les méthodes itératives telles que la minimisation de l'énergie sont plus optimales en terme de temps de calcul que les méthodes directes. Pour ces raisons, la deuxième méthode sera privilégiée dans la suite de ce manuscrit.

L'énergie totale élastique du système est une fonction convexe du déplacement des nœuds. La minimisation de cette énergie à chaque incrément de *pas* correspond à une déformation quasi-statique. Cette hypothèse se justifie pleinement, le but étant d'analyser, sous de petites déformations, le comportement mécanique macroscopique et la fissuration de matériaux élastiques fragiles tel que le béton. La figure 2.7 montre les étapes de résolution à l'intérieur d'un pas d'après Topin [122].

La méthode des gradients conjuguée selon *Hestenes* et *Stiefel* [47] est utilisée pour minimiser l'énergie potentielle du système. Pour un système linéaire

$$A \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (2.6)$$

où A est une matrice carrée et symétrique comprenant les coefficients liés à la formulation de l'énergie, \mathbf{x} le déplacement des nœuds, et \mathbf{b} le vecteur énergie. La solution de ce système correspond au minimum de la fonction quadratique suivante par rapport à \mathbf{x} :

$$g(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \cdot A \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{x} + c \quad (2.7)$$

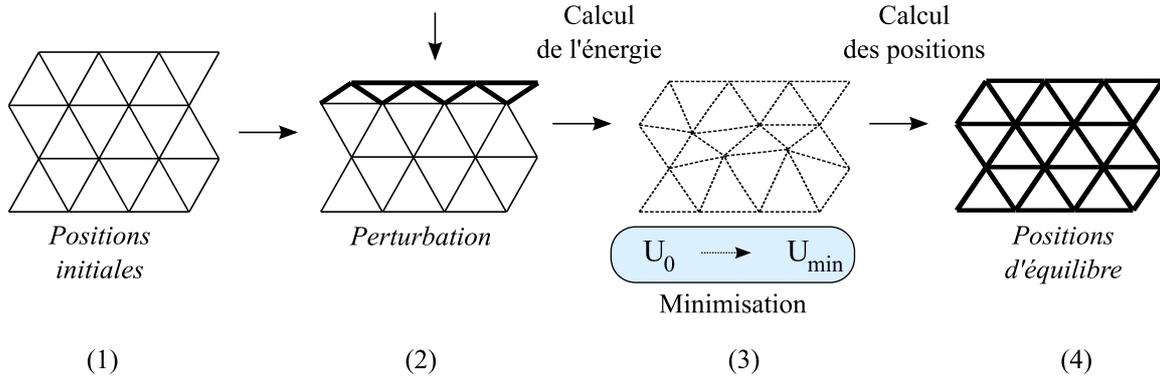


FIGURE 2.7: Etapes de résolution à l'intérieur d'un pas. (1) Réseau initial non déformé. (2) Ajout d'un vecteur déplacement sur les frontières de l'échantillon. (3) Calcul de l'énergie potentielle U_0 du système perturbé. L'énergie est ensuite minimisée (U_{min}) de manière à obtenir les positions d'équilibre des nœuds. (4) Détermination des nouvelles positions. Le système est à nouveau à l'équilibre.

c étant une constante. La fonction $g(\mathbf{x})$ est un scalaire qui correspond à la fonction à minimiser. Comme g est une fonction définie positive, on cherche le vecteur \mathbf{x} tel que $g(\mathbf{x}) = 0$. Un point est choisi de manière arbitraire. n itérations sont effectuées en suivant des directions successives à partir de ce point dans le but de rechercher le minimum de la fonction. Le minimum de la fonction est approché selon des directions qui suivent le gradient $g'(\mathbf{x})$ à chaque point \mathbf{x} , c'est-à-dire selon la décroissance de $g(\mathbf{x})$ la plus grande. Dans la méthode des gradients conjugués chaque nouvelle direction est perpendiculaire à la précédente pour assurer moins d'itération.

Le calcul de l'énergie potentielle totale du système et de son gradient se font en sommant les énergies suivant les directions x , y et z sur chaque nœuds i . Dans le repère local d'un élément de longueur a , soit \mathbf{r} la position initiale d'un nœud et \mathbf{r}' sa position après un déplacement $\delta\mathbf{r}$ tel que :

$$\|\mathbf{r}'\| = \|\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}\| = \sqrt{(x + \delta x)^2 + (y + \delta y)^2 + (z + \delta z)^2} \quad (2.8)$$

Voir la figure 2.8.

L'énergie potentielle $\delta\mathcal{E}_p^{ij}$ d'un élément élastique linéaire de raideur k et formé des nœuds i et j s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{E}_p^{ij} &= \frac{1}{2}k\|\mathbf{r}' - \mathbf{r}\|^2 \\ &= \frac{1}{2} \frac{k}{x^2 + y^2 + z^2} (x^2\delta x^2 + y^2\delta y^2 + z^2\delta z^2 + 2xy\delta x\delta y + 2xz\delta x\delta z + 2yz\delta y\delta z) \\ &= \frac{1}{2} \frac{k}{a} (x^2\delta x^2 + y^2\delta y^2 + z^2\delta z^2 + 2xy\delta x\delta y + 2xz\delta x\delta z + 2yz\delta y\delta z) \end{aligned} \quad (2.9)$$

Le gradient de l'énergie dans le repère orthonormé global (x, y, z) est donné par :

$$\nabla\mathcal{E}_p^{ij} = \begin{pmatrix} \delta\mathcal{E}_p^{ij}/\delta x \\ \delta\mathcal{E}_p^{ij}/\delta y \\ \delta\mathcal{E}_p^{ij}/\delta z \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

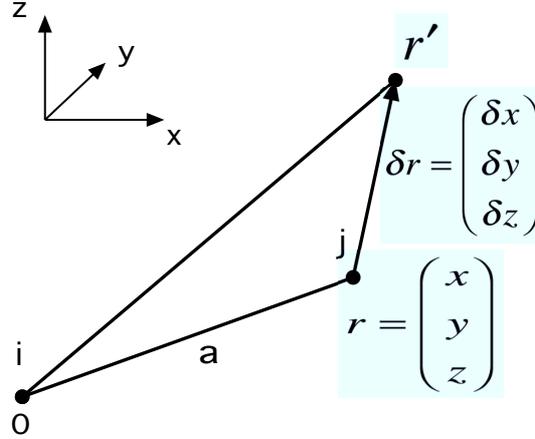


FIGURE 2.8: Allongement d'un élément dans son repère local.

L'équilibre est alors obtenu en minimisant l'énergie potentielle totale \mathcal{E}_p :

$$\mathcal{E}_p = \sum_{ij} \delta \mathcal{E}_p^{ij} \quad (2.11)$$

2.3.3.2 Méthode dynamique

Dans la méthode de résolution dynamique, les nœuds du maillage sont considérés comme des masses soumises à des forces d'interactions avec leurs voisins. Ces interactions correspondent au comportement rhéologique des éléments, ici linéaires élastiques fragiles avec une raideur et un seuil de rupture en force qui dépend de la phase ou de l'interface qu'ils représentent.

La dynamique des nœuds peut être calculée grâce à l'utilisation d'algorithmes d'intégration classiques. Ces algorithmes consistent à déterminer, au temps $t + \Delta t$, les vecteurs positions \mathbf{X}_i , les vitesses \mathbf{v}_i , et les accélérations \mathbf{A}_i des nœuds dans le repère global, à partir des positions, des vitesses et des accélérations au temps t . Nous avons utilisé l'algorithme *velocity Verlet*. A partir des positions, vitesses et accélérations au temps t , les nouvelles positions au temps $t + \Delta t$ sont calculées en utilisant le développement limité au second ordre :

$$\mathbf{X}_i(t + \Delta t) = \mathbf{X}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \mathbf{A}_i(t) + o(\Delta t^3) \quad (2.12)$$

Le calcul des vitesses se fait en deux étapes. Les vitesses sont d'abord calculées à un pas de temps intermédiaire en utilisant l'équation aux différences finies à droite :

$$\mathbf{v}_i(t + \frac{1}{2} \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{A}_i(t) + o(\Delta t^2) \quad (2.13)$$

Ensuite les accélérations $\mathbf{A}_i(t + \Delta t)$ sont déterminées en utilisant le Principe Fondamental de la Dynamique, les actions mécaniques exercées sur le nœud i étant déterminées à partir des positions $\mathbf{X}_i(t + \Delta t)$ et des vitesses $\mathbf{v}_i(t + \frac{1}{2}\Delta t)$. Les vitesses sont alors réajustés en utilisant l'équation aux différences finies à gauche :

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t + \frac{1}{2}\Delta t) + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{A}_i(t + \Delta t) + o(\Delta t^2) \quad (2.14)$$

L'algorithme d'intégration nécessite le choix d'un pas de temps Δt . Comme il s'agit d'une intégration explicite, la stabilité numérique du processus est assurée si le pas de temps est petit devant le temps de réponse élastique $\Delta_t^{critique}$ donné par [21] :

$$\Delta_t^{critique} = \pi \sqrt{\frac{m}{k_n}} \quad (2.15)$$

où m est la masse des nœuds obtenue à partir de la masse volumique du matériau, du volume qu'il occupe et du nombre de nœuds qui le représente. Lorsque le matériau comporte plusieurs phases, $\Delta_t^{critique}$ est donné par la raideur de la phase la plus rigide. Cette méthode de résolution permet de prendre en compte la propagation d'onde dans le système, mais elle implique l'introduction d'un terme d'amortissement visqueux dans le calcul des forces aux éléments. Le choix de la vitesse de sollicitation est aussi important dans la limitation des forces inertielles dans le réseau.

2.3.4 Gestion de la rupture

Dans la méthode LEM, l'initiation et la propagation des fissures sont introduites simplement en rompant les éléments dans lesquels la force normale atteint un seuil de rupture f_c qui dépend de la phase. A chaque pas de calcul, un incrément de déformation ou de force est appliqué au système, et la position d'équilibre des nœuds est calculée. Tous les éléments dont l'allongement induit une force supérieure au seuil de rupture de la phase ou de l'interface dont ils font partie sont rompus. S'en suivent des cycles de relaxation pour prendre en compte les perturbations qu'introduit la rupture des éléments sur l'équilibre du système. L'incrément suivant n'est appliqué que quand aucune rupture ne se produit pendant la relaxation. Ces cycles permettent la propagation des fissures à l'intérieur d'un même pas de calcul. Cela correspond physiquement à une propagation des microfissures très rapides par rapport à la vitesse des sollicitations imposées.

Une autre procédure de rupture a été testée. Elle consiste, dans le cas où le seuil de rupture est atteint, de rompre uniquement l'élément portant la force normale la plus grande et de ne pas appliquer de cycles de relaxation. Cette méthode donne des résultats quantitativement semblables à la première mais est moins intéressante en terme de temps de calcul.

2.3.5 Validation de la méthode

2.3.5.1 Convergence au maillage

De nombreux travaux ont été réalisés sur la sensibilité des méthodes numériques à la discrétisation spatiale du problème considéré. Dans le cas des matériaux homogènes, des études ont été intensivement conduites pour des discrétisations spatiales de type structuré ou non structuré (typiquement les maillages de type Delaunay). Dans le cas des matériaux hétérogènes aléatoires, les travaux disponibles sont moins nombreux et deviennent rares lorsque les hétérogénéités ne sont pas explicitement maillées. Cette dernière situation est celle rencontrée pour les maillages structurés ou pour les maillages sur réseaux. Dans une telle situation, la sensibilité à la discrétisation spatiale est double : d'une part, la convergence classique du problème numérique à la taille de maille, qui dépend de la méthode de résolution employée, d'autre part, l'amélioration progressive de la représentation de la forme des hétérogénéités lorsque celle-ci n'est pas compatible avec le réseau utilisé (par exemple, mailler une sphère avec des éléments cubiques).

Pour l'essentiel, on note deux études abouties dans le domaine ; toutes deux concernent les matériaux poreux. L'étude analytique de Roberts et Garboczi [99] porte sur des échantillons formés de cellules solides ouvertes distribuées aléatoirement (typiquement des échantillons de mousse métallique). A partir d'un algorithme basé sur la méthode des éléments finis développée par Garboczi et Day [34], qui permet de donner certaines propriétés élastiques d'un matériau à partir d'une image numérique, ces auteurs obtiennent des résultats quantitatifs sur l'influence du maillage sur la rigidité macroscopique du système. Ces résultats ont été confirmés numériquement par Gatt et al. [35] dans le cas des céramiques poreuses à pores ellipsoïdaux de révolution distribués aléatoirement en espace et en orientation.

Ces deux études (figures 2.9 et 2.10), toutes deux basées sur la méthode des éléments finis, confirment une évolution croissante et linéaire de la rigidité effective du milieu en fonction de l'inverse du nombre de mailles. Ce comportement permet d'obtenir la valeur du module élastique dans la limite continue en extrapolant la courbe linéaire au point $M = \infty$ (intersection avec l'axe $1/M = 0$), où M est le nombre de mailles. Cet excès de rigidité par rapport à un milieu idéalement continu est une conséquence de manque de précision de la représentation des contours des interfaces entre les phases.

Dans le but de valider le modèle LEM en trois dimensions, l'étude de l'influence de la taille de maille sur les paramètres élastiques dans un matériau à inclusions granulaires a été entreprise. Un test de traction a été appliqué à un échantillon cubique formé de deux phases : une matrice solide, occupant 80% du volume, et des inclusions sphériques monodisperses distribuées de façon isotrope.

L'évolution du module de Young, noté E_{eff} , en fonction du nombre d'éléments M a été traité dans le cas où les inclusions sont considérées comme dix fois plus rigides que la matrice et celui où les inclusions forment des pores. La figure 2.11 montre, dans les deux cas, l'évolution de E_{eff} adimensionné par la rigidité effective des particules $E^{[p]}$ en fonction de la densité moyenne de maillage $L_n = M^{-1/3}$. Tout comme dans la littérature citée précédemment, une dépendance

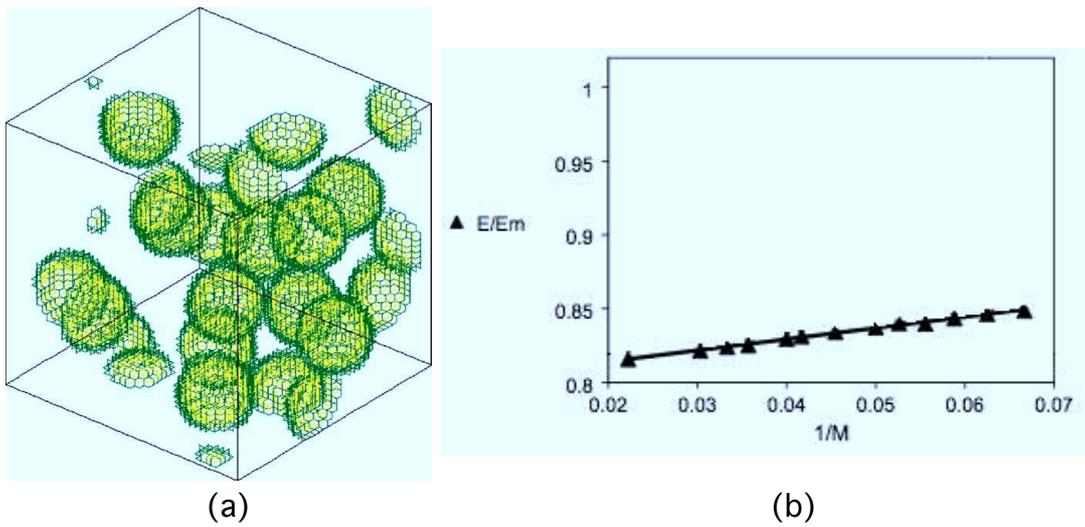


FIGURE 2.9: Résultats de Gatt et al. [35]. Influence du nombre de mailles M sur le module effectif adimensionné. (a) Echantillon de céramique poreuse. (b) Evolution du module effectif adimensionné par rapport au module E_m du matériau sans pores en fonction de l'inverse du nombre total de mailles.

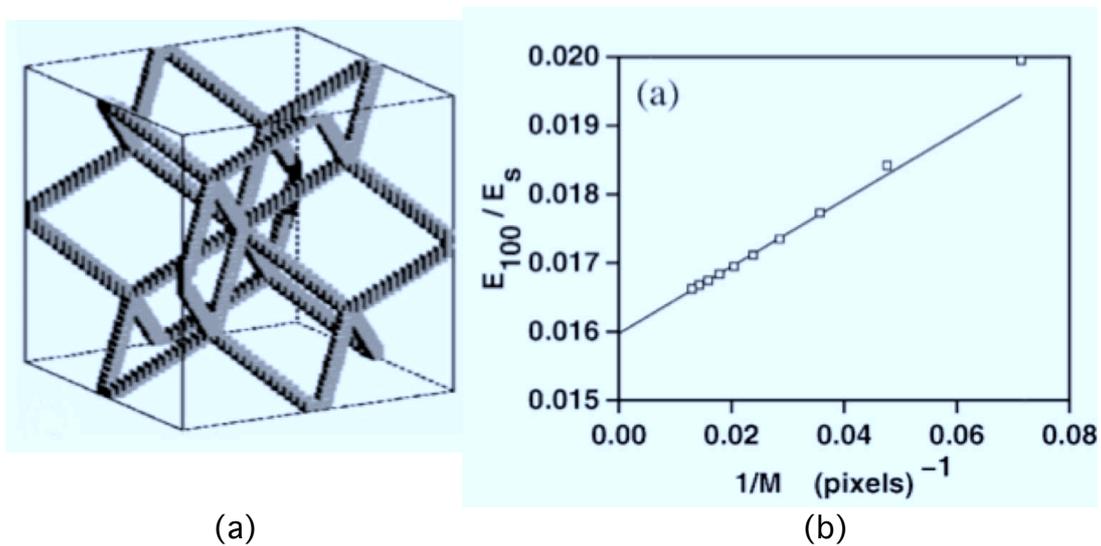


FIGURE 2.10: Résultats de Roberts et Garboczi [99]. Influence du nombre de maille M sur le module effectif (a) Modèle de mousse métallique. (b) Evolution du module effectif E adimensionné par la module sans pores E_s en fonction de l'inverse du nombre total de mailles.

linéaire est observée avec un module de Young croissant dans le cas des inclusions rigides, et décroissant dans le cas des inclusions poreuses, en fonction de l'augmentation de la résolution (diminution de L_n) :

$$\frac{E_{\text{eff}}}{E^{[p]}} \simeq \frac{E_{\text{eff}}}{E^{[p]}} \Big|_0 + \alpha_E L_n$$

où α_E est un coefficient et $\frac{E_{\text{eff}}}{E^{[p]}} \Big|_0$ représente la valeur 'exacte' du module de Young normalisé $E_{\text{eff}}/E^{[p]}$ pour une discrétisation infinie (la densité de maillage L_n tend vers zéro et le nombre d'éléments du réseau M tend vers $+\infty$). L'approximation linéaire permet d'évaluer cette valeur exacte. Dans les simulations réalisées dans cette étude, $L_n \simeq 0.01$ ce qui implique que l'erreur relative dans l'estimation des propriétés élastiques, en comparaison avec la valeur exacte, est de l'ordre de 10%.

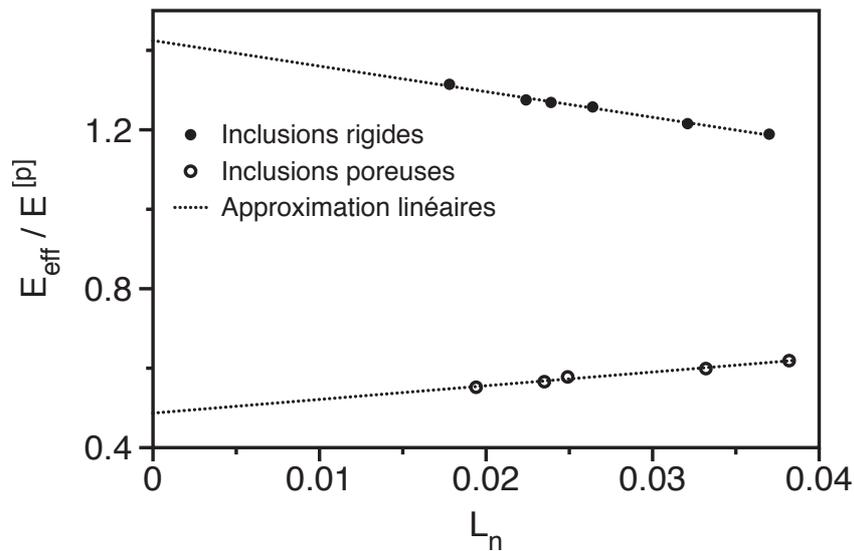


FIGURE 2.11: Module de Young normalisé pour un matériau à inclusions sphériques rigides ou poreuses en fonction de la densité de maillage (symboles) et de son approximation linéaire (lignes en pointillés).

Par ailleurs, il est intéressant de noter que ces résultats indiquent - pour la première fois à notre connaissance - que :

1. La méthode LEM converge avec la taille de maille
2. Sa vitesse de convergence est identique à celle des éléments finis, malgré une cinématique réduite.

2.4 Etude des mécanismes de rupture

2.4.1 Introduction

Les matériaux granulaires cimentés sont formés de plusieurs phases dont les volumes, les propriétés mécaniques et la distribution sont différents. Cette texture étant complexe, la compréhension des mécanismes physiques sous-jacents à leur comportement macroscopique et à leur fissuration est difficile. Il est certain que des paramètres tels que les effets volumiques des phases, leurs cohésions mutuelles ou encore la présence de défauts initiaux, comme les pores ou les microfissures, jouent un rôle prépondérant dans la réponse mécanique de ces matériaux, mais leurs contributions ne peuvent être considérées séparément. Une étude paramétrique en trois dimensions utilisant la méthode LEM a ainsi été entreprise afin de comprendre l'effet combiné de la cohésion entre les phases et de la quantité de matrice sur la propagation des fissures dans un milieu granulaire cohésif modèle : un granulat lié par une matrice poreuse. Les propriétés microstructurales visées sont la fraction volumique des phases et la cohésion des phases entre elles. De ce point de vue, les propriétés volumiques de chaque phase ne sont pas considérées comme des variables du problème, et l'hypothèse est faite que les résultats macroscopiques attendus sur la fissuration n'en seront que peu impactés. En d'autres termes, pour la présente analyse, des matériaux tels que les roches sédimentaires, les bétons ou tous autres matériaux granulaires cimentés peuvent être considérés comme équivalents.

Dans cette section, après une présentation du système et des paramètres de l'étude, le comportement élastique et la résistance à la traction du matériau modèle seront décrits. Les régimes de rupture et de fissuration seront caractérisés à travers la compréhension des mécanismes de transmission des contraintes au niveau de la microstructure et de leur corrélation avec la fraction volumique de matrice ρ^m et la cohésion à l'interface entre la matrice et les particules σ^{pm} .

2.4.2 Description du système et des paramètres de l'étude

Un squelette granulaire est obtenu en compactant isotropiquement un assemblage de sphères rigides par une méthode discrète, et une portion cubique de cet assemblage est isolée pour former l'échantillon numérique. Le volume total de matrice est distribué sous forme de ponts connectant les particules entre elles puis l'échantillon est discrétisé par des éléments tétraédriques. Pour modéliser numériquement les matériaux granulaires cimentés avec le modèle LEM en trois dimensions, il faut trouver un compromis entre la représentativité des échantillons numériques en termes de nombre de particules et la résolution spatiale en termes de nombre de nœuds et d'éléments dans chaque particule.

Dans l'étude présentée ici, les échantillons contiennent chacun 516 particules uniformément distribuées entre d_{min} et $d_{max} = 1.25d_{min}$ (voir figure 2.12). La fraction volumique des particules est de $\rho^m = 0.64$. Les échantillons sont maillés par $M = 1.3 \cdot 10^6$ éléments unidimensionnels et les particules contiennent environ 1550 éléments. Ces paramètres offrent un bon

accord entre l'efficacité numérique, la précision et la représentativité des structures générées.

A résolution spatiale donnée, la forme des particules peut être considérée comme une sphère à surface rugueuse. La rugosité est alors de l'ordre de $2a/d \simeq 0.2$, où d est le diamètre moyen des particules et a la longueur moyenne d'un élément de maillage. Neuf échantillons ont été préparés avec les valeurs de fraction volumique de matrice suivantes ρ^m : 0.06, 0.1, 0.13, 0.15, 0.17, 0.2, 0.225, 0.24 et 0.28. $\rho^m = 0.06$ étant le cas où le milieu est très poreux et $\rho^m = 0.28$ correspond à un échantillon entièrement rempli ne comportant pas de pores.

Dans tous ces échantillons, à l'exception de l'étude représentée dans la figure 2.16, l'adhésion entre les particules est considérée comme nulle ($\sigma^{pp} = 0$). Ce choix est en cohérence avec l'observation dans la plupart des matériaux granulaires cimentés, tels que les mortiers ou les bétons. La matrice liante représente la seule source de cohésion dans le système. Les contacts directs entre les particules deviennent alors des points faibles du matériau et peuvent être apparentés à des microfissures ou des clivages initialement présents dans les échantillons.

Les particules ont une rigidité trois fois plus élevée que celle de la matrice comme c'est le cas à peu près dans un béton réel ($E^p = 3E^{pm} = 3E^m$). Par ailleurs, pour ne pas avoir d'effets liés à la résistance des particules, leurs seuils de rupture en traction est le même que celui de la matrice ($f_c^p = f_c^m$).

Le but de cette section est d'étudier aussi bien l'influence de la quantité de matrice ρ^m que de l'adhésion à l'interface entre les particules et la matrice sur les mécanismes de rupture. L'adhésion σ^{pm} va varier entre 0.2 et 1.4 fois l'adhésion dans les particules ($0.2\sigma^p \leq \sigma^{pm} \leq 1.4\sigma^p$) ce qui porte le nombre total d'échantillons à 81. Cet espace paramétrique est schématisé dans la figure 2.13.

Pour observer l'influence de ρ^m et σ^{pm} sur la fissuration du milieu, des conditions aux bords simples sont considérées. Les échantillons sont sollicités en traction simple en régime quasi-statique par incrément vertical en déplacement de $3 \cdot 10^{-4}a$ par pas appliqué aux nœuds de la face supérieures des échantillons cubiques (a étant la longueur moyenne des éléments). Le déplacement des nœuds de la face inférieure est bloqué suivant l'axe de sollicitation et le reste de l'échantillon n'est soumis à aucun autre confinement. D'autre part, le rapport σ_c^ϕ/E_c^ϕ entre la contrainte de rupture et le module des éléments est ajusté de manière à ce que la déformation verticale macroscopique ne dépasse pas 1% afin de s'assurer que la déformation à la fin de l'essai reste faible.

Les simulations sont arrêtées quand les contraintes en traction s'annulent. Avant rupture, le temps CPU moyen par déplacement et par nœud est de 0.025 s sur un processeur Intel Xeon à 2.93 GHz. Des vidéos de ces simulations sont disponibles à l'adresse suivante : www.cgp-gateway.org/ref017.

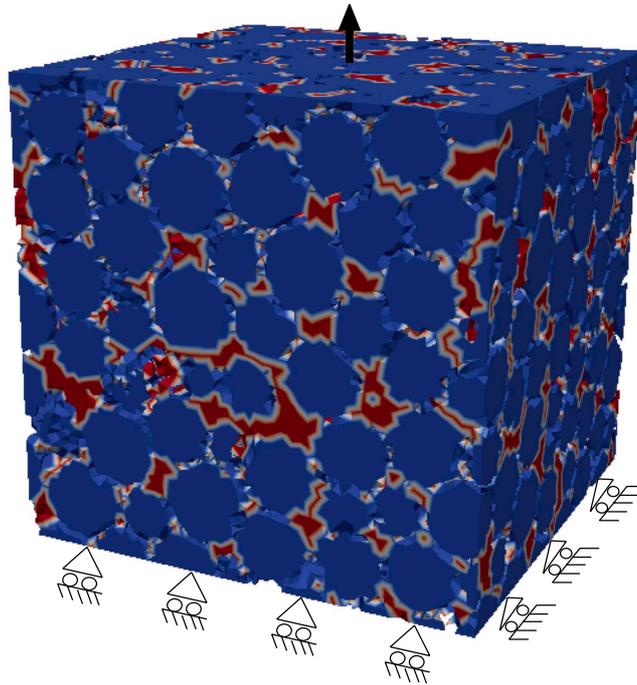


FIGURE 2.12: Echantillon numérique avec une fraction volumique de matrice de $\rho^m = 0.15$ soumis à un test de traction. Les particules sont en bleu, la matrice en rouge et l'interface particule/matrice en blanc. Des vides sont visibles entre les phases.

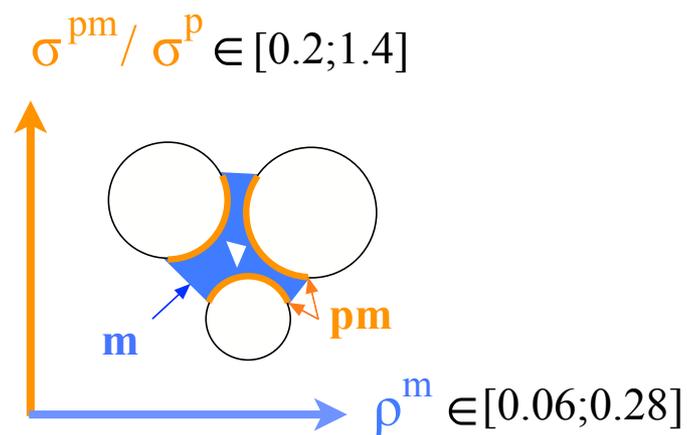


FIGURE 2.13: Illustration 2D de l'espace paramétrique. L'adhésion à l'interface particule/matrice σ^{pm} adimensionnée par l'adhésion dans les particules σ^p en orange varie entre 0.2 et 1.4. La fraction volumique de matrice ρ^m en bleu varie entre 0.06 et 0.28.

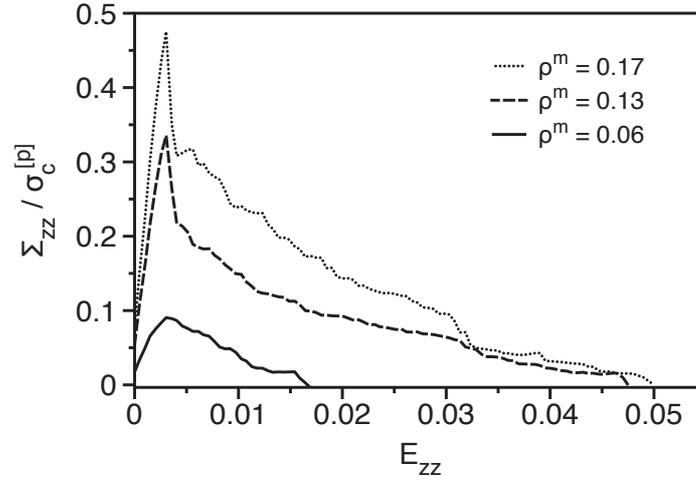


FIGURE 2.14: Contraintes verticales de traction normalisée par la résistance à la rupture des particules $\sigma_c^{[p]}$ en fonction de la déformation verticale pour différentes valeurs de fraction volumique de matrice ρ^m .

2.4.3 Comportement élastique

2.4.3.1 Description du comportement uniaxial apparent

La figure 2.14 montre les courbes types de la réponse macroscopique de l'échantillon modèle de MGC soumis à une traction simple pour trois valeurs de fraction volumique de matrice ρ^m . Le comportement est linéaire élastique quasi-fragile comme c'est le cas dans un béton. Ces courbes représentent les contraintes verticales cumulées Σ_{zz} , normalisées par le seuil de résistance à la traction $\sigma_c^{[p]} = \sigma_c^{[m]}$ des particules et de la matrice, en fonction du déplacement vertical E_{zz} .

Les courbes présentent une première partie linéaire élastique qui définit clairement la rigidité effective E_{eff} de l'échantillon suivie d'une partie croissante non linéaire allant jusqu'à la rupture. Le confinement latéral étant nul, E_{eff} correspond ici au module de Young du matériau. Dans une seconde partie des courbes, celle après la rupture, les contraintes de traction chutent brusquement dans un premier temps, puis progressivement jusqu'à l'endommagement total des échantillons. La contrainte à rupture augmente avec ρ^m et est atteinte à partir de $E_{zz} = 4 \cdot 10^{-3}$.

Les zones de contact direct entre les particules ne transmettent pas la traction ($f^{pp} = 0$) et se comportent comme des microfissures initialement présentes dans l'échantillon. Ces éléments vont rompre dès le début de la sollicitation et apparaître de façon diffuse dans l'échantillon, puis, se rejoindre progressivement (phénomène de coalescence), et former une ou plusieurs macrofissures qui vont se propager et conduire à la ruine de l'échantillon. La figure 2.15 représente les éléments rompus et la surface de rupture dans un échantillon dans la phase post-rupture.

L'évolution des contraintes après le pic est décrite par une suite de cycles "rupture-

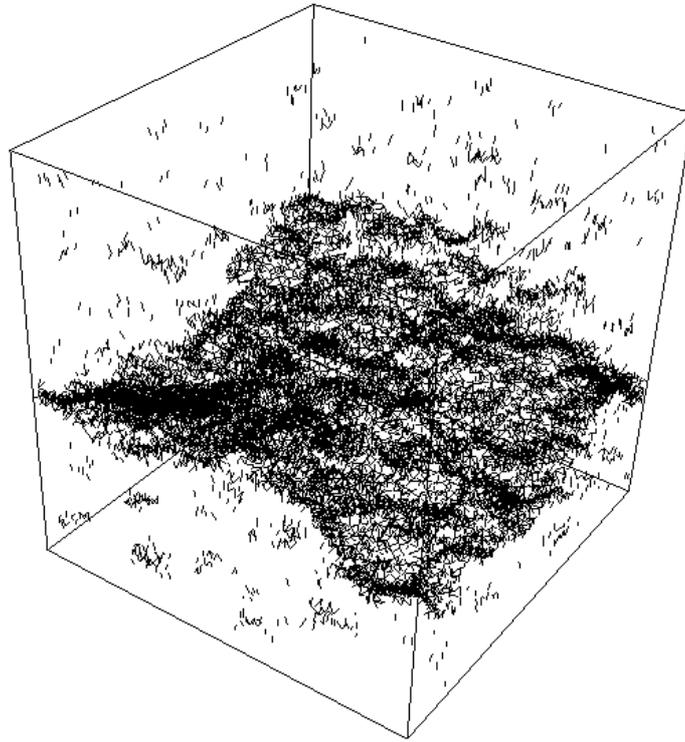


FIGURE 2.15: Représentation des éléments rompus (segments noirs) dans la phase postrupture.

chargement" représentative de la propagation non linéaire de la fissure principale. Chaque cycle est caractérisé par une phase où l'énergie élastique est accumulée, suivie d'une phase où l'énergie est dissipée lors de la rupture des éléments critiques. En conséquence, le module de Young diminue avec l'endommagement progressif du matériau.

La partie post-rupture dans les simulations en trois dimensions se caractérise par une chute plus progressive des contraintes, comparée à celle en deux dimensions [124]. En effet, en deux dimensions les ruptures apparaissent simplement à travers une ligne d'éléments rompus qui traversent l'échantillon alors que les échantillons en trois dimensions gardent leurs intégrités mécaniques jusqu'à la formation d'une surface de rupture.

2.4.3.2 Dépendance à la quantité de matrice

La rigidité effective du système ne dépend pas du paramètre de rupture σ^{pm} puisqu'elle est calculée avant l'endommagement du milieu. La figure 2.16 montre l'évolution du module de Young E_{eff} , normalisée par celui de la phase particulaire $E^{[p]}$, en fonction de ρ^m pour des échantillons ayant deux types d'adhésion au contact entre les particules. Dans un premier cas, figuré par les cercles rouges, cette adhésion est nulle ($\sigma^{pp} = 0$) et dans le deuxième, les carrés bleus, cette adhésion est égale à celle à l'interface entre les particules et la matrice ($\sigma^{pp} = \sigma^{pm}$). Pour tous ces échantillons et pour les deux valeurs de σ^{pp} , E_{eff} est une fonction linéaire de ρ^m .

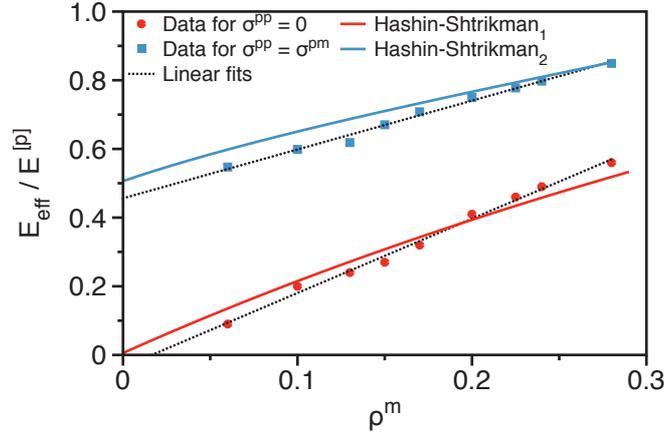


FIGURE 2.16: Module de Young initial normalisé sans adhésion entre les particules ($\sigma^{pp} = 0$, en rouge) et avec adhésion ($\sigma^{pp} = \sigma^{pm}$, en bleu), avec des régressions linéaires (lignes en pointillées) : les résultats numériques sont en symboles et les estimations théoriques (voir la section 2.4.3.3) en courbes.

Toutes les valeurs du module de Young effectif sont en dessous du module de la phase particulaire ($E^{[p]}$) révélant ainsi le rôle dominant de la matrice, qui est ici trois fois moins rigide que les particules, dans la réponse élastique au chargement en traction des MGC. Par ailleurs les particules renforcent la matrice. Pour les fractions volumiques de matrice élevées, le module de Young effectif atteint 1.6 et 2.5 fois la valeur du module de la matrice, respectivement, pour le cas sans et avec adhésion entre les particules en contact.

Dans la configuration avec les contacts cohésifs, le module de Young effectif approche celui de la phase particulaire montrant que les contraintes de traction peuvent aussi être supportées directement par le réseau de contacts entre les particules. Ce résultat est aussi valable dans le cas d'un chargement en compression dans lequel le squelette granulaire, à travers le contact direct entre les particules, contrôle la réponse mécanique du système. Ce résultat a été observé en deux dimensions sur des agrégats cimentés [124, 126].

L'évolution linéaire du module de Young effectif en fonction de ρ^m en tension peut être attribué à la combinaison de deux effets :

1. un effet de volume qui correspond simplement au fait que la porosité est réduite lorsque la quantité de matrice ρ^m augmente. Les contraintes sont alors réparties de manière plus homogène dans le milieu (concentrations de contraintes moins élevées) ce qui se traduit par une augmentation des valeurs du module effectif ;
2. un effet de surface qui est lié au fait que la surface spécifique de l'interface entre particules et matrice augmente avec ρ^m . Il en résulte une adhésion plus grande entre les particules et la matrice.

Dans le cas sans adhésion entre les particules en contact ($\sigma^{pp} = 0$), les données numériques tracées sur la figure 2.16 suggèrent que le module de Young effectif devrait s'annuler pour une valeur finie de fraction volumique de matrice $\rho^m \simeq 0.02$. Cette limite est la conséquence du

rôle de la matrice qui n'est pas uniquement de remplir les interstices par un matériau solide qui transmet les contraintes de traction, mais elle a aussi le rôle de liant qui confère la cohésion du système. En effet, pour les faibles valeurs de fraction volumique de matrice, et en raison de la discrétisation spatiale considérée, plusieurs ponts de matrice sont non-adhésifs. L'assemblage de particules acquiert une rigidité finie quand le matériau interstitiel est suffisamment présent pour créer un réseau percolant de particules interconnectées par les ponts de matrice liante.

Par ailleurs, dans le cas de contacts adhésifs entre les particules ($\sigma^{pp} = \sigma^{pm}$), cet effet disparaît et l'interpolation linéaire du module de Young effectif tend vers une valeur non nulle quand ρ^m tend vers zéro. Le réseau des particules en contact assure alors la cohésion de l'assemblage granulaire et confère au système une résistance à la traction. Ce comportement est similaire à celui des matériaux granulaires humides à l'état pendulaire, où la cohésion dépend du nombre de ponts capillaires et du volume total de liquide [135].

2.4.3.3 Comparaison avec les modèles théoriques d'homogénéisation

1. Modèles théoriques d'homogénéisation pour les MGC

Hypothèse de Voigt

En considérant les déformations uniformes dans le matériau ($\epsilon = E$), le tenseur d'élasticité effectif C^{eff} s'écrit, en fonction des modules des constituants C :

$$C^{\text{eff}} = C_{\text{Voigt}} = \langle C \rangle$$

C_{Voigt} constitue une borne supérieure pour le tenseur d'élasticité effectif [66]. Pour un matériau biphasique, on a :

$$C^{\text{eff}} = \rho^{\text{phase1}} C^{\text{phase1}} + \rho^{\text{phase2}} C^{\text{phase2}} \quad (2.16)$$

où ρ est la fraction volumique de la phase.

Estimation de Hashin-Shtrikman [44]

L'approche de Hashin-Shtrikman est une approche variationnelle basée sur un champ de polarisation τ associé un milieu de référence homogène C^0 . Le champ local du composite hétérogène est approché par le champ apparaissant dans un problème thermoélastique sur le milieu de référence C^0 et soumis à un chargement à l'infini ϵ_0 :

$$\sigma(x) = C(x) : \epsilon(x) = C^0(x) : \epsilon(x) + \tau(x)$$

où σ et ϵ sont respectivement la contrainte et la déformation locales et C le tenseur d'élasticité du milieu hétérogène. En supposant que le champ de polarisation est constant par

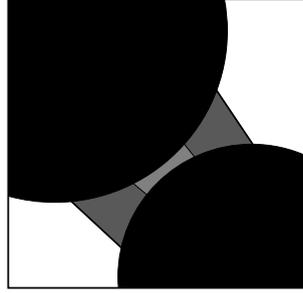


FIGURE 2.17: Illustration d'un matériau granulaire cimenté poreux. Trois phases : les particules en noir, les pores en blanc, et l'interface *iph* composé de l'interface particule/particule en gris clair confiné dans un anneau de matrice en gris.

phase, l'estimation de Hashin-Shtrikman donne :

$$\mathbf{C}^{HS}(\mathbf{C}^0) = \left[\sum_{j=1}^N \rho^j \mathbf{C}_j : (\mathbf{C}^* + \mathbf{C}_j)^{-1} \right] : \left[\sum_{j=1}^N \rho^j (\mathbf{C}^* + \mathbf{C}_j)^{-1} \right]^{-1}$$

qui peut être exprimée sous la forme [66] :

$$\mathbf{C}^{HS}(\mathbf{C}^0) = \left[\sum_{j=1}^N \rho^j (\mathbf{C}^* + \mathbf{C}_j)^{-1} \right]^{-1} - \mathbf{C}^* \quad (2.17)$$

où \mathbf{C}^* est le tenseur d'influence de Hill.

2. Evolution du module élastique en fonction de la quantité de matrice dans le matériau modèle

Les propriétés élastiques effectives des matériaux granulaires cimentés et poreux (voir figure 2.2) peuvent être estimées avec une approche à deux étapes.

La première étape, concerne l'*interface* entre les particules (voir la figure 2.17). Cette interface, notée ici *iph*, est composée de l'interface particule/particule, dont le tenseur de rigidité du quatrième ordre est $\mathbf{C}^{[pp]}$ et la fraction volumique est ρ^{pp} , confiné dans un anneau de matrice dont le tenseur de rigidité est $\mathbf{C}^{[m]}$ et la fraction volumique est ρ^m . Les propriétés élastiques effectives de cette *interface* peuvent être déduites à partir des bornes de Voigt (voir equation (2.16)) :

$$\mathbf{C}^{[iph]} = \frac{\rho^m}{\rho^{pp} + \rho^m} \mathbf{C}^{[m]} + \frac{\rho^{pp}}{\rho^{pp} + \rho^m} \mathbf{C}^{[pp]}.$$

où la fraction volumique relative de l'interface particule/particule et de la matrice sont respectivement $\rho^{pp}/(\rho^{pp} + \rho^m)$ et $\rho^m/(\rho^{pp} + \rho^m)$.

La seconde étape consiste à considérer un composite à trois phases : les particules, dont le tenseur de rigidité est $\mathbf{C}^{[p]}$ et la fraction volumique est ρ^p , les vides dont le tenseur de rigidité est nul et la fraction volumique est ρ^v , et l'interface iph définie à la première étape et dont le tenseur de rigidité est $\mathbf{C}^{[iph]}$ et la fraction volumique $\rho^{iph} = 1 - \rho^p - \rho^v$. En première approximation, chaque phase est considérée comme distribuée aléatoirement dans l'espace. Les propriétés élastiques effectives \mathbf{C}_{eff} de ce composite sont alors estimées en utilisant l'équation (2.17) :

$$\begin{aligned} (\mathbf{C}_{\text{eff}} + \mathbf{C}^*(\mathbf{C}^0))^{-1} &= \rho^p (\mathbf{C}^{[p]} + \mathbf{C}^*(\mathbf{C}^0))^{-1} \\ &+ \rho^{iph} (\mathbf{C}^{[iph]} + \mathbf{C}^*(\mathbf{C}^0))^{-1} \\ &+ \rho^v \mathbf{C}^*(\mathbf{C}^0)^{-1} \end{aligned} \quad (2.18)$$

où $\mathbf{C}^*(\mathbf{C}^0)$ est le tenseur d'influence de Hill associé au tenseur de rigidité de quatrième ordre \mathbf{C}^0 du matériau de référence. Pour une distribution aléatoire des phases, ce tenseur d'influence s'écrit :

$$\mathbf{C}^*(\mathbf{C}^0) = 4\mu^0 \mathbf{J} + \frac{\mu^0(9\kappa^0 + 8\mu^0)}{3(\kappa^0 + \mu^0)} \mathbf{K}$$

où κ^0 et μ^0 sont respectivement le module de rigidité et de cisaillement du matériau de référence.

La microstructure considérée est alors globalement isotrope et l'équation (2.18) permet d'avoir le module d'élasticité isostatique κ_{eff} et le module de cisaillement effectif μ_{eff} comme étant $\mathbf{C}_{\text{eff}} = 3\kappa_{\text{eff}} \mathbf{J} + 2\mu_{\text{eff}} \mathbf{K}$. Le module de Young effectif est alors :

$$E_{\text{eff}} = \frac{9\kappa_{\text{eff}}\mu_{\text{eff}}}{3\kappa_{\text{eff}} + \mu_{\text{eff}}}.$$

Cette approche en deux étapes basée sur les bornes de Voigt puis sur l'estimation de Hashin-Shtrikman permet d'obtenir une bonne estimation de l'évolution du module de Young adimensionné $E_{\text{eff}}/E^{[p]}$ en fonction de la fraction volumique de matrice, tracé sur la figure 2.16 en courbes monochromes :

– dans le cas sans adhésion entre les particules en contacts ($\sigma^{pp} = 0$), le module de Young effectif (courbe rouge) est obtenu avec un tenseur de rigidité nul pour l'interface particule/particule et l'interface iph comme matériau de référence ;

$$\mathbf{C}^{[pp]} = 0, \quad \mathbf{C}^0 = \mathbf{C}^{[iph]} \quad \text{sans adhésion au contacts entre particules}$$

– dans le cas avec adhésion entre les particules en contact ($\sigma^{pp} = \sigma^{pm}$), le module de Young effectif (courbe bleue) est obtenu avec les mêmes propriétés élastiques aux deux interfaces (particule/particule et particule/matrice) et les particules comme matériau de référence ;

$$\mathbf{C}^{[pp]} = \mathbf{C}^{[pm]}, \quad \mathbf{C}^0 = \mathbf{C}^{[p]} \quad \text{avec des contacts adhésifs entre les particules.}$$

Un bon accord théorie/simulation est observé sur la figure 2.16 confirmant le rôle essentiel de l'interface liante.

2.4.4 Transmission des contraintes

L'hétérogénéité de la distribution des contraintes à l'échelle des particules est un facteur important qui contrôle l'initiation et la propagation des fissures dans les matériaux granulaires cimentés. La transmission des contraintes dans ces matériaux a lieu à travers les chaînes de contact fortement chargées qui transmettent l'intégralité des contraintes de cisaillement [95, 126]. Dans le cas des matériaux granulaires cimentés denses, l'établissement de ces chaînes de contact est possible grâce à la rigidité élevée des particules et à leurs capacité à transmettre les chargements. Les simulations par le modèle LEM 3D donnent les contraintes aux nœuds dans les différentes phases et leurs interfaces (voir la section 2.3.2.4). La figure 2.18 montre les contraintes uniaxiales suivant l'axe de sollicitation σ_{zz}^i dans trois échantillons contenant des fractions volumiques de matrice ρ^m différentes. Bien que l'échantillon soit soumis à une traction uniaxiale, des contraintes verticales en traction et en compression sont présentes.

Des chaînes de fortes contraintes traversent les particules et se concentrent au niveau des zones de contact. Cette gamme de contraintes peut être assimilée au "réseau fort" observé dans les matériaux granulaires secs, pour lesquels une petite partie des forces de contact (le réseau fort) transmet la quasi-totalité des contraintes déviatoriques du système alors qu'une proportion importante de contacts faibles sont mobilisés pour soutenir le réseau fort [95]. On remarque que dans le modèle LEM, les contraintes sont distribuées dans les particules, la matrice et les interfaces, alors que dans les modèles de type DEM seules les forces au contact entre les particules peuvent être calculées. Le "réseau fort", déterminé grâce aux méthodes discrètes, est donc localisé exclusivement aux contacts.

La figure 2.19 représente la densité de probabilité (pdf) de la composante verticale des contraintes aux nœuds σ_{zz}^i pour les mêmes volumes de matrice. Le pdf est ici normalisé par la valeur moyenne des contraintes dans l'échantillon, et exprimé sur une échelle logarithmique.

En comparant avec les distributions de contrainte obtenues en 2D sur des MGC [124, 126], les distributions 3D sont plus larges et ont donc un degré d'hétérogénéité plus élevé. La similarité entre la distribution des contraintes et la distribution des forces dans les milieux granulaires qui va jusqu'à avoir une même évolution des forces en fonction de la quantité de matrice, indique que la concentration de contraintes dans les MGC est contrôlée principalement par le désordre du réseau de contacts. C'est une caractéristique des MGC par rapport aux composites classiques où la concentration de contrainte est contrôlée par l'espace poral, voir par exemple [24].

L'effet de la fraction de matrice est de redistribuer de manière plus homogène les contraintes aux nœuds (effet volumique). En effet, l'augmentation du volume de matrice ρ^m se traduit par l'élargissement des ponts de matrice entre les particules ce qui permet un meilleur transfert de charge entre les deux phases. A l'inverse, quand la valeur de ρ^m baisse, la distribution des contraintes devient de plus en plus hétérogène à cause des ponts de matrice d'épaisseur faible qui concentrent les contraintes. Cette hétérogénéité se traduit par une distribution plus large du pdf. Pour les contraintes les plus élevées, le pdf chute de façon exponentielle :

$$P(\sigma_{zz}^i) \propto e^{-\beta \sigma_{zz}^i / \Sigma_{zz}} \quad (2.19)$$

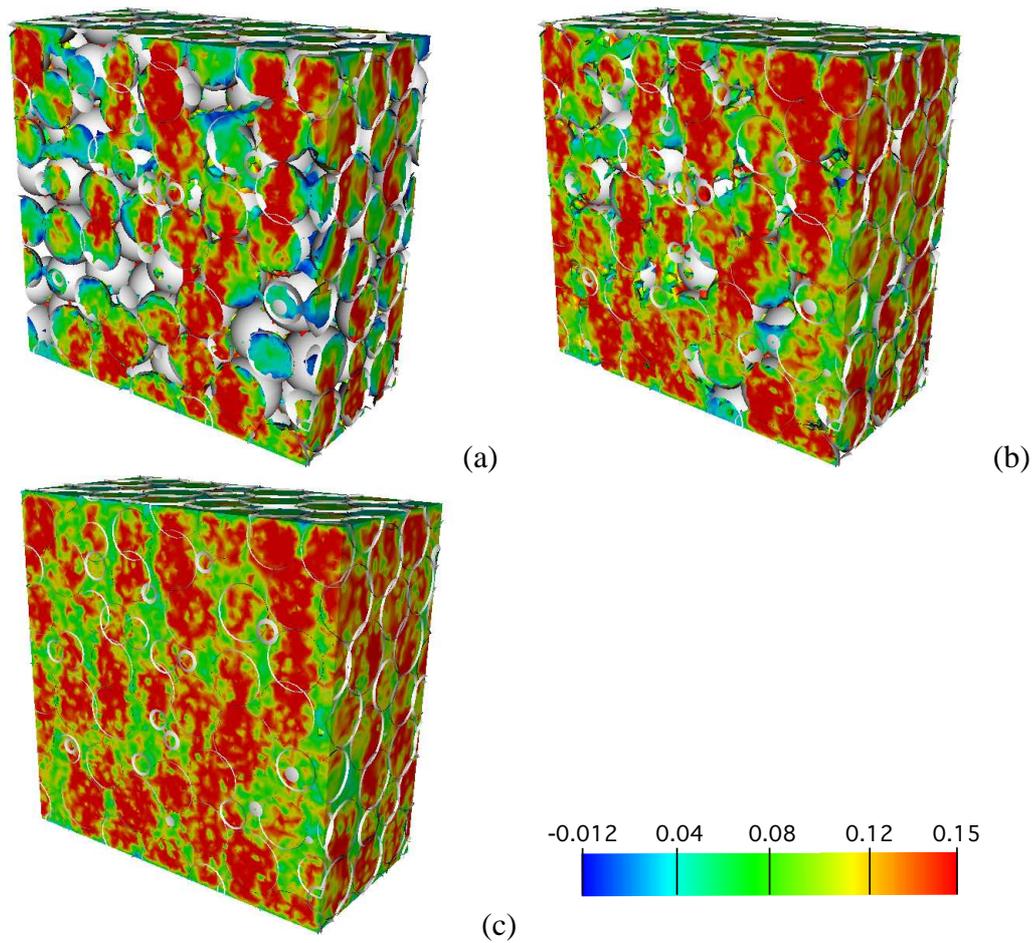


FIGURE 2.18: Une carte des contraintes verticales σ_{zz} dans une coupe d'un matériau granulaire cimenté soumis à un test de traction pour trois valeurs de fraction volumique de matrice différentes : (a) 0.06, (b) 0.17 et (c) 0.28. L'échelle de couleur permet de voir le gradient des contraintes de traction (valeurs positives) et de compression (valeurs négatives).

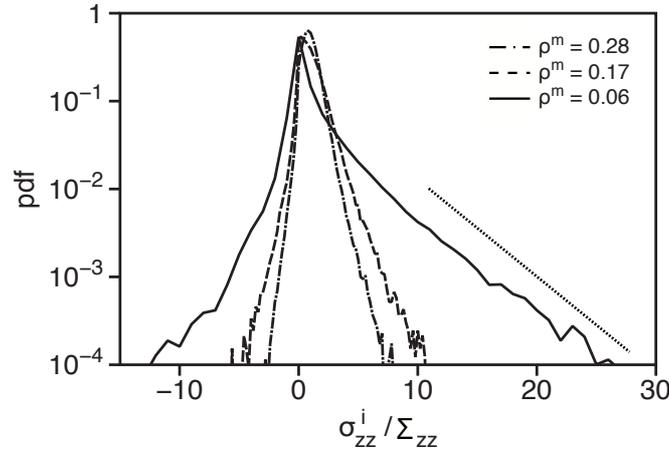


FIGURE 2.19: Densité de probabilité (pdf) de la composante verticale des contraintes aux nœuds σ_{zz}^i normalisée par leurs valeurs moyennes dans trois échantillons avec des volumes de matrice différents ; voir la figure 2.18. La ligne en pointillé met en évidence la queue exponentielle du pdf dans la zone des fortes contraintes de traction.

Cette distribution, qui est une signature des matériaux granulaires, s'élargit quand la quantité de matrice baisse dans l'échantillon et se rapproche des distributions obtenues par les méthodes DEM où la matrice n'est pas prise en compte et où seules les interactions au niveau des contacts entre les particules régissent le comportement du matériau [65, 92, 116, 135]. L'exposant β varie ici de $\simeq 0.7$ à $\simeq 2.1$ quand ρ^m augmente de 0.06 à 0.28. Les autres composantes du tenseur de contrainte présentent les mêmes tendances. Par ailleurs, bien que les contraintes en compression soient plus faibles, elles semblent présenter également une distribution décroissante exponentielle comme c'est le cas pour les valeurs élevées en traction.

Le pdf atteint un pic aux alentours de la valeur moyenne des contraintes dans les échantillons, à la valeur unitaire. De même, pour les faibles contraintes de traction (valeurs positives) et de compression (valeurs négatives) le pdf est non nul et a une valeur finie élevée. Il y a donc une grande probabilité de trouver des zones très déchargées dans l'échantillon ce qui est une signature de l'effet de voûte au sein du milieu [92, 95, 94, 125]. Cet effet de voûte traduit l'établissement d'un réseau de contacts privilégiés dans le volume. Les contraintes ne sont donc pas transmises de façon homogène dans tout l'échantillon mais suivent des chemins privilégiés passant par des ponts de matrice et des contacts entre particules fortement sollicités, déchargeant ainsi les contraintes dans une grande partie du volume. Ces chaînes de contraintes sont visibles sur la figure 2.18.

2.4.5 Résistance à la traction

La rupture dans les matériaux granulaires cimentés est initiée par un décollement diffus dans l'ensemble du volume du matériau, puis accélérée par la coalescence des microfissures en une

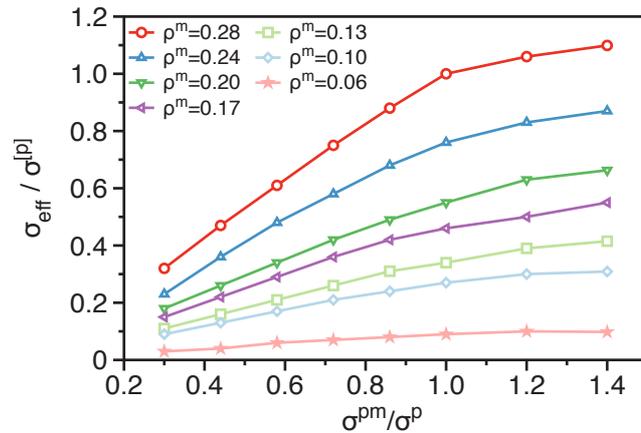


FIGURE 2.20: Résistance à la traction effective σ_{eff} en fonction de l'adhésion à l'interface entre les particules et la matrice σ^{pm} pour différentes valeurs de fraction volumiques de matrice ρ^m . σ_{eff} est adimensionnée par la résistance à la traction des particules $\sigma^{[p]}$ et σ^{pm} par l'adhésion dans les particules σ^p .

surface de rupture. Dans cette étude on suppose que les phases matricielle et particulaire ont la même résistance effective à la traction ($\sigma^{[p]} = \sigma^{[m]}$) et qu'il n'y a pas de cohésion à l'interface particule/particule ($\sigma^{pp} = 0$), la résistance effective à la traction du matériau dépend uniquement de l'adhésion à l'interface particule/matrice σ^{pm} et de la fraction volumique de matrice ρ^m , qui, elle, contrôle la porosité de l'agrégat.

La résistance à la rupture effective σ_{eff} est définie comme la contrainte critique atteinte dans la réponse contrainte/déplacement. Comme le montre la figure 2.20, σ_{eff} , ici adimensionnée par la résistance à la traction des particules $\sigma^{[p]}$, est une fonction croissante à la fois de l'adhésion entre la matrice et les particules σ^{pm} adimensionnée par l'adhésion dans les particules σ^p , et de la fraction volumique de matrice ρ^m . L'interface entre les deux phases est ici renforcée par l'augmentation de σ^{pm} qui a pour effet d'entraver la propagation des fissures. Cet effet est néanmoins moindre pour les faibles valeurs de ρ^m (donc pour les grandes porosités) où la transmission de contrainte est gouvernée par l'espace poral plutôt que par l'interface particule/matrice. En revanche, pour les valeurs élevées de ρ^m , le rôle des zones d'interface prévaut, et la résistance à la traction augmente rapidement avec σ^{pm} . Cette augmentation se poursuit pour les valeurs où $\sigma^{pm} > \sigma^{[p]}$, mais avec une tendance à la saturation. Avec des adhésions supérieures à celles des autres phases (dont celle des particules σ^p), l'interface particule/matrice se comporte comme une coque solide qui protège les particules de la fissuration ou de la pénétration par des fissures déjà initiées dans la matrice. A cause de cet effet de coque, la valeur supérieure de σ_{eff} est significativement au-dessus de celle de $\sigma^{[p]}$ pour $\sigma^{pm} > \sigma^{[p]}$ dans le cas sans pores ($\rho^m = 0.28$).

Dans le but de comprendre l'influence de ρ^m sur la résistance à la traction, une distinction sera faite entre :

- les ponts de matrice entre les particules qui sont responsables de la transmission des contraintes dans la phase particulaire sous un chargement en traction, l'effet de liaison,

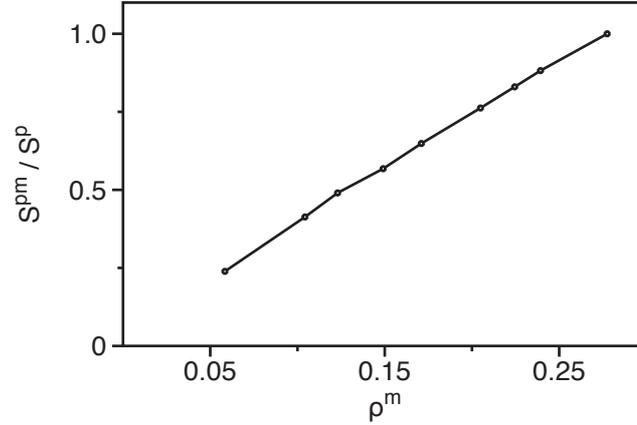


FIGURE 2.21: Surface couverte par l'interface particule/matrice S^{pm} normalisée par la surface totale des particules S^p en fonction de la fraction volumique de matrice ρ^m .

- la transmission volumique des contraintes de traction dans la phase matricielle, l'effet volumique.

Soit deux particules de même rayon R reliées par un pont de matrice cylindrique comme le montre la figure 2.1, la surface totale couverte par la matrice est alors donnée par l'équation :

$$S = 4\pi R^2(1 - \cos \theta), \quad (2.20)$$

où θ est l'angle de remplissage qui contrôle la largeur du pont de matrice et donc son volume, en considérant qu'un pont participe au recouvrement de la surface de deux particules.

La plus grande force de traction supportée par un élément de l'interface particule/matrice $\mathbf{n}'dS$, où \mathbf{n}' est le vecteur normal extérieur à la surface d'une particule, est $d\mathbf{f} = \sigma^{pm}\mathbf{n}'dS$. Par suite, la plus grande force supportée par le pont est obtenue en intégrant la projection de $d\mathbf{f}$ le long de l'axe du pont, \mathbf{n} , sur l'aire couverte :

$$f_c = \int_{\text{aire couverte}} \mathbf{n} \cdot d\mathbf{f} = \frac{1}{2}\pi R^2 \sigma^{pm} (1 - \cos 2\theta). \quad (2.21)$$

Cette force peut être exprimée en fonction de la surface spécifique locale $S' = S/(4\pi R^2)$ ce qui élimine θ en combinant (2.20) et (2.21) :

$$f_c = \pi R^2 \sigma^{pm} S' (2 - S'). \quad (2.22)$$

Le facteur $2 - S'$ reflète la surface couverte par l'interface. Il est clair que f_c est une fonction croissante avec S' et atteint sa valeur maximum $\pi R^2 \sigma^{pm}$ quand $S' = 1$.

Dans une approximation de type *champ moyen*, la faible polydispersité des particules peut être négligée et f_c remplacé par la force de traction moyenne à la rupture entre les particules.

De la même façon S' représente la surface spécifique de l'interface particule/matrice. Elle est définie comme la surface couverte par l'interface normalisée par la surface totale des particules S^p .

La figure 2.21 montre l'évolution de la surface couverte par l'interface particule/matrice S^{pm} en fonction de la fraction volumique de matrice ρ^m . La surface spécifique S^{pm} augmente linéairement avec ρ^m et les particules sont entièrement recouvertes de matrice ($S^{pm} = 1$) uniquement quand l'ensemble de l'espace poral est rempli ($\rho^m = \rho_f^m = 0.28$). Ce phénomène est la conséquence de la procédure de remplissage par augmentation de l'épaisseur des ponts de matrice entre les particules. Ce qui donne la relation suivante :

$$\frac{S^{pm}}{S^p} = \frac{\rho^m}{0.28} = \frac{\rho^m}{\rho_f^m} \quad (2.23)$$

En supposant que le comportement moyen est la conséquence du modèle de la force locale donnée par l'équation (2.22), l'expression de la force de traction moyenne devient :

$$\langle f_c \rangle = \pi R^2 \sigma^{pm} \frac{\rho^m}{\rho_f^m} \left(2 - \frac{\rho^m}{\rho_f^m} \right) \quad (2.24)$$

De nouveau, l'approximation de type champ moyen permet de considérer que la contrainte de traction moyenne σ_{eff}^p transmise par les particules et soutenue par les ponts de matrice interparticulaires, est proportionnelle à la force moyenne $\langle f_c \rangle$ divisée par la surface de la section moyenne d'une particule πR^2 :

$$\sigma_{\text{eff}}^p \propto \sigma^{pm} \frac{\rho^m}{\rho_f^m} \left(2 - \frac{\rho^m}{\rho_f^m} \right). \quad (2.25)$$

Le facteur de proportionnalité est uniquement une fonction de la structure de l'assemblage et du nombre de ponts de matrice par particule. Ce dernier est de l'ordre de 9 et n'évolue pas avec ρ^m à l'exception pour la valeur la plus faible $\rho^m = 0.06$ où le nombre de ponts est de 6.

La contrainte de traction σ_{eff}^p représente une fraction des contraintes totales σ_{eff} à la rupture. Quand ρ^m augmente, la fraction du chargement en traction transmise au volume de la phase matricielle augmente. En supposant que cette fraction augmente linéairement avec ρ^m , la relation suivante peut être établie :

$$\sigma_{\text{eff}}^p = (1 - c\rho^m)\sigma_{\text{eff}}, \quad (2.26)$$

où c est une constante indépendante de ρ^m . Cette relation combinée à 2.25 donne finalement la mise à l'échelle de la résistance à la traction suivante :

$$\frac{\sigma_{\text{eff}}}{\sigma^{pm}} = A \frac{\rho^m (2\rho_f^m - \rho^m)}{1 - c\rho^m}, \quad (2.27)$$

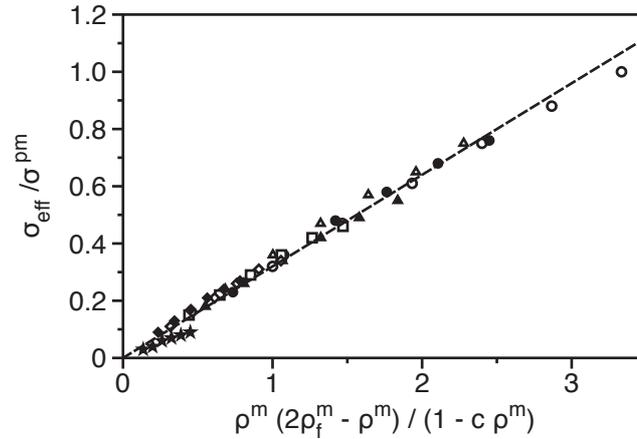


FIGURE 2.22: La mise à l'échelle de la résistance à la traction normalisée par l'adhésion dans l'interface particule/matrice pour toutes les valeurs de la fraction volumique de matrice ρ^m (les différents symboles). La ligne en pointillé donne la tendance moyenne selon l'équation (2.27) avec $c = 2.5$.

où A est la constante de remplissage.

Sur la figure 2.22, l'ensemble des données de la résistance à la traction normalisée $\sigma_{\text{eff}} / \sigma^{pm}$ obtenues à partir de la figure 2.20 sont représentées en fonction de $\rho^m (2\rho_f^m - \rho^m) / (1 - c\rho^m)$. Toutes les données se regroupent sur une droite en affectant $c \simeq 2.5$ et $A \simeq 0.3$. Les données correspondant à $\rho^m = 0.06$ présentent une pente légèrement plus basse ($\simeq 0.2$) en conséquence du nombre plus faible de ponts matriciels entre les particules. Cette mise à l'échelle des données relative à la résistance à la traction montre très clairement le rôle de la matrice à la fois comme une phase de remplissage (report de charges) et comme une phase liante en jouant sur la surface d'adhésion.

2.4.6 Régimes de rupture

Dans les modèles sur réseau tels que la LEM 3D, le nombre des éléments rompus est souvent utilisé comme mesure de l'endommagement [46]. Dans les matériaux granulaires cimentés, des éléments peuvent rompre dans la phase matricielle, particulaire ou à leurs interfaces. Afin de quantifier l'influence de l'adhésion σ^{pm} entre particules et matrice et de la fraction volumique de matrice ρ^m sur la propagation de la fissure dans le milieu, la proportion n_b d'éléments rompus à l'intérieur des particules par rapport au nombre total d'éléments rompus est considérée. Le cas limite $n_b = 0$ correspond à la situation où les particules ne sont pas endommagées et où les micro et les macrofissures se propagent uniquement dans la matrice ou le long de l'interface particule/matrice. La limite $n_b = 1$ correspond à un MGC avec des particules beaucoup plus fragiles que la matrice qui perdent complètement leur intégrité dès sollicitation.

Dans le système considéré dans cette étude, le choix d'une même adhésion dans la matrice

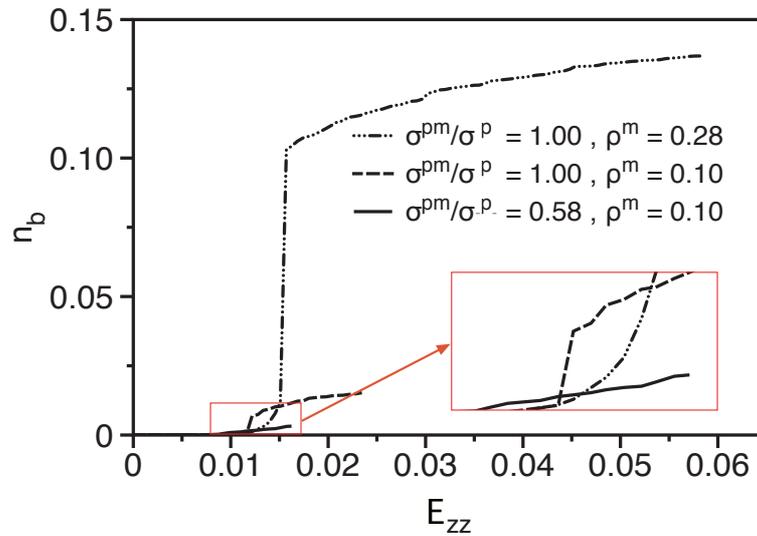


FIGURE 2.23: Proportion d'éléments endommagés dans la phase particulaire en fonction de la déformation pour différents jeux de paramètres d'adhésion à l'interface σ^{pm} , adimensionnée par l'adhésion à l'intérieur des particules σ^p , et de fraction volumique de matrice ρ^m . Le graphe contient un zoom sur les données.

et dans les particules $\sigma^p = \sigma^m$ permet aux fissures de se propager à partir des zones de faiblesses telles que les surfaces de contact entre les particules, les pores ou les éléments les plus chargés dans les interfaces, et de pénétrer plus ou moins facilement dans les particules en fonction des propriétés de l'interface particule/matrice et de la quantité de matrice. L'évolution de n_b est alors un bon indicateur de l'endommagement des particules et des chemins qu'empruntent les fissures.

La figure 2.23 montre l'évolution de n_b en fonction de la déformation axiale E_{zz} pour trois différents jeux de paramètres. Pour les valeurs assez faibles de σ^{pm} , ici adimensionnée par l'adhésion à l'intérieur des particules σ^p , l'endommagement des particules est négligeable, quelle que soit la fraction volumique de matrice ρ^m . Il est évident que dans ce cas, les fissures se propagent préférentiellement le long de l'interface particule/matrice. Pour les valeurs assez grandes de σ^{pm}/σ^p , n_b reste faible jusqu'à atteindre un seuil critique, puis subit une augmentation rapide due à l'apparition de la surface de rupture. Il continue à augmenter faiblement dans la phase post-rupture. La dégradation des échantillons se fait de manière brutale en conséquence du caractère fragile du matériau en traction uniaxiale, ce phénomène est plus visible dans le cas où les particules sont fortement endommagées par la surface de rupture. Pour une même valeur d'adhésion à l'interface entre les deux phases, quand la quantité de matrice augmente, l'échantillon résiste à une déformation plus élevée avant l'apparition de la surface de rupture. La surface recouverte par l'interface étant plus importante quand ρ^m augmente, pour une adhésion importante, l'endommagement des particules après propagation de la fissure principale augmente.

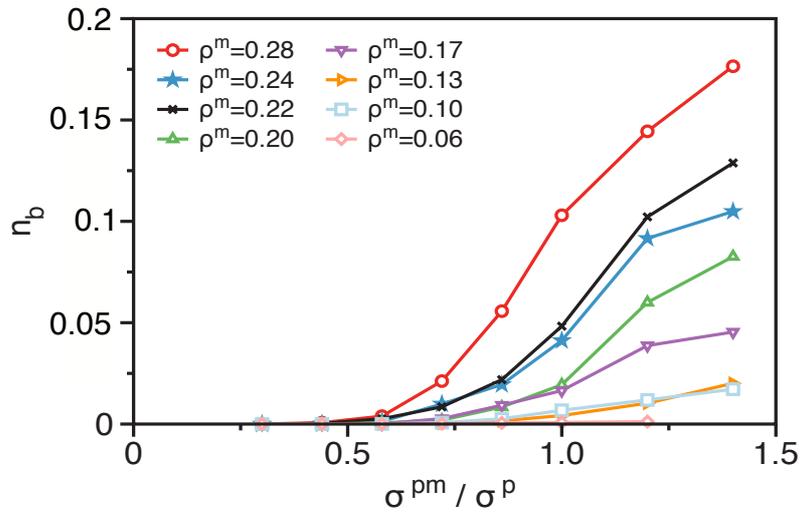


FIGURE 2.24: Proportion d'éléments endommagés dans la phase particulaire après la rupture en fonction de l'adhésion à l'interface adimensionnée pour différentes valeurs de fractions volumique de matrice.

La figure 2.24 représente l'évolution de n_b après la rupture en fonction de σ^{pm}/σ^p pour différentes valeurs de ρ^m . n_b commence à augmenter à partir de zéro pour une valeur finie de σ^{pm} qui dépend directement de ρ^m . Par la suite, l'accroissement de n_b avec σ^{pm} est non linéaire : un fort taux d'accroissement qui subit une baisse au point d'inflexion $\sigma^{pm} \simeq \sigma^p$. Le nombre d'éléments rompus dans la phase particulaire est aussi une fonction croissante de la quantité de matrice ρ^m comme observé dans la figure 2.23 pour les fortes adhésions. Pour la plus faible quantité de matrice $\rho^m = 0.06$, le nombre d'éléments rompus reste très faible.

Une carte en niveaux de gris représentant n_b dans l'espace paramétrique $(\rho^m, \sigma^{pm}/\sigma^p)$ est exprimée dans la figure 2.25. En dessous d'une certaine limite très bien définie et représentée par une courbe bleue en pointillé, les particules ne subissent aucun endommagement ($n_b \simeq 0$). Cela veut dire, que pour cet intervalle de paramètres, correspondant aux faibles valeurs de ρ^m ou de σ^{pm} , les fissures se propagent soit dans la matrice soit dans l'interface particule/matrice. Au dessus de cette limite d'endommagement des particules, les lignes d'isovaleurs de n_b restent parallèle à la courbe limite et augmentent de façon non linéaire avec l'augmentation de ρ^m et σ^{pm} . Il est aussi observable qu'au dessus d'une certaine valeur de $\rho^m \simeq 0.25$ le taux d'accroissement de n_b baisse et ne dépend presque plus de ρ^m . Cette transition est liée au fait que pour des fractions volumiques de matrice supérieures à 0.25, les particules sont quasiment toutes recouvertes de matrice qui commencent à percoler dans le matériau. A partir de ce seuil de percolation, l'influence de ρ^m sur l'endommagement des particules est donc réduite. L'observation de ces résultats suggère qu'il existe deux régimes de propagation de fissures bien distincts :

1. au dessous de la limite d'endommagement des particules, les fissures contournent les particules et se propagent le long de la matrice, des pores ou le long de l'interface particule/matrice

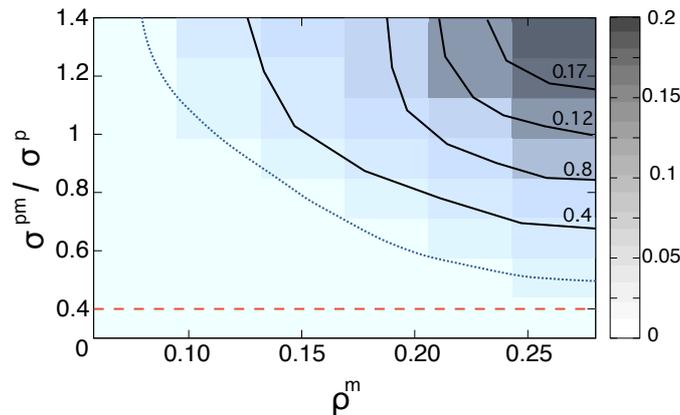


FIGURE 2.25: Carte en niveaux de gris de la proportion d'éléments rompus dans la phase particulaire pour différentes valeurs de fraction volumique de matrice ρ^m et d'adhésion à l'interface entre particules et matrice σ^{pm} adimensionnée par l'adhésion à l'intérieur des particules σ^p . La courbe en pointillés bleus représente la limite du domaine d'endommagement des particules (équation (2.33) avec $K_{limite}^r = 0.7$). La ligne en pointillés rouges représente la limite d'endommagement liée à l'adhésion à l'interface obtenue par l'approche du maillon faible (équation (2.32) avec $K_{limite}^r \simeq 0.4$).

2. au dessus de cette limite, les fissures peuvent pénétrer dans les particules à partir de la matrice ou des interfaces provoquant leurs endommagement.

Le point correspondant au seuil de percolation pourrait représenter la frontière d'un troisième régime intermédiaire entre ces deux régimes de rupture comme cela a été observé numériquement et expérimentalement sur des agrégats cimentés en deux dimensions [124]. $\rho^m = 0.25$ serait alors la valeur au-dessous de laquelle les fissures ne pénétreraient que partiellement dans les particules depuis les ponts de matrice de faible épaisseur qui concentreraient les contraintes. Au-dessus de cette valeur, les fissures pénétreraient dans les particules de façon à les fragmenter. La forme plus complexe des ponts de matrice et la dimension supérieure que doit satisfaire la percolation rendent ce troisième régime moins distinct en trois dimensions qu'en deux dimensions.

2.4.7 Ténacité relative entre phases

La limite d'endommagement des particules est une conséquence de l'action combinée entre la fraction volumique de matrice et l'adhésion entre les particules et la matrice, sur la pénétration des fissures dans les particules. Conformément à la mécanique de la rupture linéaire, la pénétration d'une fissure dans la particule implique que la particule est moins résistante que l'interface particule/matrice. Autrement, la fissure aurait été dévié par l'interface, voir par exemple [45]. Dans le cas d'une traction pure (mode I), la ténacité d'une phase ϕ correspondant au facteur

d'intensité de contrainte critique est donnée par :

$$K_c^\phi = \sqrt{E^{[\phi]} G_c^\phi} \quad (2.28)$$

qui combine le module de Young effectif de la phase $E^{[\phi]}$ avec le taux critique de restitution d'énergie G_c^ϕ . L'énergie élastique stockée dans un élément de la phase ϕ est égale à $W_e = (f^\phi)^2 / 2k^\phi$ ou k^ϕ est la raideur de l'élément et f^ϕ la force qui résulte de sa déformation. Cette énergie est totalement dissipée à sa rupture. Par conséquent, l'énergie nécessaire à créer une fissure par unité de surface en mode I et en 3 dimensions, G_c^ϕ donc, s'écrit :

$$G_c^\phi = \frac{a (\sigma^\phi)^2}{2 E^\phi}. \quad (2.29)$$

où a est la longueur de l'élément du réseau et $\sigma^\phi = f^\phi / a^2$ est la contrainte à la rupture de l'élément (la cohésion dans la phase ϕ). La relation entre le module effectif et la raideur des éléments de la phase $E^{[\phi]} = k^\phi / a$ est utilisée pour obtenir la relation 2.29.

La ténacité relative entre l'interface particule/matrice et la particule est définie comme :

$$K_c^r = K_c^{pm} / K_c^p \quad (2.30)$$

où K_c^{pm} et K_c^p sont respectivement la ténacité de l'interface particule/matrice et des particules. En considérant l'équation (2.28) et l'équation (2.29), cette relation s'écrit :

$$K_c^r = \sqrt{\frac{E^{[pm]} E^p \sigma^{pm}}{E^{[p]} E^{pm} \sigma^p}}. \quad (2.31)$$

Afin d'obtenir différentes estimations de cette ténacité relative entre particules et interface, le module de Young effectif $E^{[pm]}$ de l'interface particule/matrice est remplacé dans l'équation (2.31) par le module de Young d'un matériau de référence E^0 . Un premier choix simple pour E^0 est d'adopter l'approche du maillon faible de façon à affecter au ratio effectif $E^{[pm]} / E^{[p]}$ le ratio local E^{pm} / E^p . Dans ce cas, la ténacité relative entre l'interface et les particules devient :

$$K_c^r = \frac{\sigma^{pm}}{\sigma^p}. \quad (2.32)$$

La figure 2.24 montre l'évolution du nombre d'éléments rompus dans les particules n_b en fonction de K_c^r en considérant l'approche du maillon faible. Au-dessous d'une certaine ténacité relative limite K_{limite}^r , il n'y a pas d'endommagement dans les particules. K_{limite}^r représente physiquement le point la transition entre un régime où les fissures sont défléchies dans l'interface entre les particules, et la matrice et le régime où les fissures pénètrent les particules. K_{limite}^r dans ce cas correspond à $K_c^r \simeq 0.4$, et est en accord avec la limite la plus basse $\sigma^{pm} / \sigma^p \simeq 0.4$ des données obtenues dans la figure 2.25 (ligne en pointillés rouges).

Un autre choix possible pour E^0 est l'estimation de la limite d'endommagement des particules en affectant le module de Young effectif au module de Young effectif du matériau de référence $E^0 = E_{eff}$:

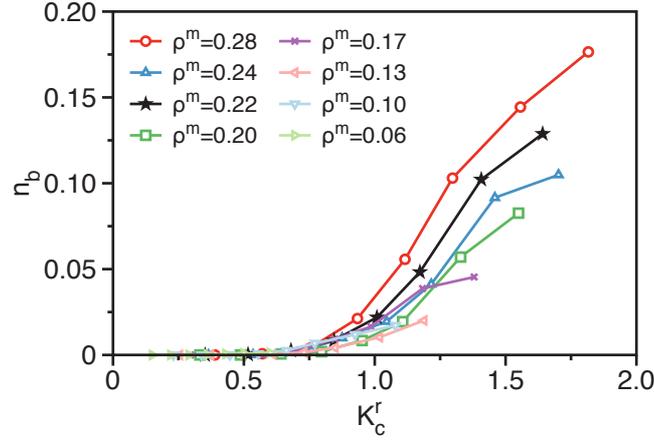


FIGURE 2.26: Proportion n_b d'éléments endommagés dans la phase particulaire en fonction de la ténacité relative (2.33) entre l'interface particule/matrice et la phase particulaire.

$$K_c^r = \sqrt{\frac{E_{\text{eff}}}{E^{[p]}} \frac{E^p}{E^{pm}} \frac{\sigma^{pm}}{\sigma^p}}. \quad (2.33)$$

La figure 2.26 montre la proportion n_b des éléments rompus à l'intérieur des particules en fonction de K_c^r pour toutes les configurations de l'espace paramétrique (ρ^m , σ^{pm}/σ^p). En comparaison avec la figure 2.24 (première estimation de la ténacité relative), les points sont clairement moins dispersés. Ce choix de module de Young pour le module de référence est motivé par le fait que l'énergie élastique disponible pour la propagation des fissures est stockée dans l'ensemble du matériau. De cette façon, la ténacité relative fournit un critère d'endommagement pour une particule, qui combine les deux paramètres ρ^m (qui dépend par ailleurs du module de Young effectif, voir figure 2.16), et de σ^{pm} (impliqué dans l'équation (2.33)). Dans ce cas, la figure 2.26 donne la valeur la ténacité relative limite $K_{\text{limite}}^r \simeq 0.7$ au-dessous de laquelle aucun endommagement de particules ne se produit.

La courbe limite de l'endommagement des particules représentée dans la figure 2.25 (en pointillés bleus) est simplement donnée par l'équation (2.33) dans laquelle K_c^r est remplacé par la valeur de la ténacité relative limite $\simeq 0.7$ et le ratio $E_{\text{eff}}/E^{[p]}$ par les données de la figure 2.16. Il est clair ici, que la courbe représente correctement la frontière du domaine combinant l'influence de ρ^m et σ^{pm} dans l'endommagement des particules.

Par ailleurs, la figure 2.16 indique qu'un rapport $E_{\text{eff}}/E^{[p]} \simeq 0.85$ est obtenu en absence de vide ($\rho^m = 0.36$) et dans le cas d'une interface particule/matrice adhérente. Un critère de pénétration-déflexion peut alors être défini par (en combinant 2.28 et 2.30) :

$$\frac{G_c^{pm}}{G_c^p} = (K_c^r)^2 \frac{E^{[p]}}{E_{\text{eff}}} \simeq (0.7)^2 \cdot \frac{1}{0.85} \simeq 0.57 \quad (2.34)$$

Au-delà de cette valeur, la fissure pénètre les inclusions polydisperses sphériques ; en-deçà, elle

les contourne. Comme attendu, cette valeur est supérieure à l'estimation majorante de $\simeq 0.3$ proposée dans le cas des composites à inclusions unidimensionnelles (section 1.4.2) : Il est plus aisé pour une fissure de contourner une inclusion sphérique qu'une inclusion de type fibre longue.

2.5 Conclusion

Dans ce chapitre, l'approche LEM en trois dimensions a été introduite et appliquée à la modélisation des matériaux granulaires cimentés. Cette méthode, qui modélise le matériau par un réseau de nœuds interconnectés par des éléments unidimensionnels, s'avère être adaptée à la simulation de la déformation et de la rupture d'un agrégat composé d'un nombre relativement grand de particules et d'une matrice remplissant tout ou partie de l'espace poral. La rigidité et la résistance à la rupture de chaque phase et interface peuvent être ajustés et les fissures sont gérées naturellement par rupture des éléments. Le modèle mécanique de type champ moyen est adapté au comportement élastique fragile mais peut être complexifié et adapté à d'autres comportements.

L'influence de la fraction volumique de matrice et de l'adhésion à l'interface particule/matrice sur la rigidité effective, la résistance à la traction et les mécanismes de propagation de fissure ont été étudiés dans un matériau modèle. La rigidité effective s'est avérée être une fonction linéaire de la fraction volumique de matrice malgré la complexité de la forme des ponts qui la composent. La résistance à la traction est une fonction croissante de la combinaison entre la fraction volumique de matrice et l'adhésion à l'interface. L'augmentation du volume de la matrice améliore la résistance à la traction en augmentant la surface d'adhésion entre la matrice et les particules d'une part, et en rendant plus homogène le transfert de charge entre les particules et la matrice, d'autre part.

La rupture par propagation de fissure des matériaux granulaires cimentés est un processus complexe. En fonction de la fraction volumique de matrice et de l'adhésion à l'interface, les fissures initiées dans la matrice ou dans l'interface particule/matrice vont pénétrer dans les particules ou être déviées dans les zones interfaciales. L'endommagement des particules semble être contrôlé par la ténacité relative entre l'interface et les particules.

Ces études ont été menées sur des MGC ayant le même assemblage de particules. La structure et la morphologie de la surface de rupture sont des paramètres importants dans les analyses d'étanchéité des enceintes en béton fissurées et doivent dépendre d'autres paramètres microstructuraux. Pour enrichir l'étude présentée dans ce chapitre, il serait intéressant de se placer dans la zone de l'espace paramétrique proche des propriétés réelles du béton et dont l'influence de la fraction volumique de matrice et de l'adhésion à l'interface particule/matrice sur le mode de propagation des fissures est désormais explicitée.

La situation où les fissures sont défléchies dans l'interface entre les granulats et la pâte de ciment est symptomatique du béton. Afin de s'assurer d'être dans ce régime, une interface parti-

culé/matrice faible et une absence de pores dans le système sont nécessaires. Cette configuration n'est pas en désaccord avec la microstructure du béton où la porosité, principalement localisée dans cette interface, est de l'ordre de 10% du volume.

Par ailleurs, une analyse statistique intensive est nécessaire à la compréhension de l'influence des paramètres de la microstructure d'un béton sur la morphologie des fissures qui peuvent y apparaître. Cette analyse peut être entreprise, dans un premier temps, en deux dimensions pour affiner notre approche en gardant des temps de calcul raisonnables, puis étendue à trois dimensions.

Relation entre la microstructure et la morphologie des fissures.

Sommaire

3.1	Introduction	75
3.2	Caractérisation de la microstructure du béton	77
3.2.1	Traitement d'images	78
3.2.2	Agencement spatial des phases	79
3.2.3	Courbe granulométrique	81
3.3	Génération d'assemblages granulaires représentatifs	82
3.3.1	Génération de la courbe granulométrique	82
3.3.2	Distribution granulaire	84
3.3.3	Choix d'un espace paramétrique	87
3.4	Représentativité des échantillons numériques	88
3.4.1	Comparaison des granulométries	89
3.4.2	Comparaison des covariogrammes	90
3.4.3	Approche statistique par descripteurs géométriques	90
3.4.4	Conclusion sur la représentativité statistique	95
3.5	Influence de la microstructure sur la tortuosité des fissures	96
3.5.1	Paramètres numériques	96

3.5.2	Comportement sous chargement	97
3.5.3	Calcul de la tortuosité	98
3.5.4	Observations préliminaires	101
3.5.5	Prise en compte de l'ordre local	103
3.6	Conclusion	109

3.1 Introduction

Le béton est un matériau évolutif qui tend à se fissurer naturellement dans le temps. Le vieillissement des centrales nucléaires ou encore le stockage profond des déchets dans les sols pose la question de l'intégrité des structures de confinement en béton et de leur étanchéité aux radioéléments ou aux polluants.

Comme vu dans le chapitre précédent, la fissuration dans le béton se fait essentiellement par rupture de la matrice cimentaire et contournement des granulats, l'interface ciment/granat étant la zone faible du matériau. Le travail présenté dans ce chapitre vise à relier la microstructure d'un béton à la morphologie du réseau de fissure qui peut y apparaître et qui sera considéré comme une "empreinte" de la microstructure.

En ayant à l'esprit les problèmes de transport de fluides en milieu fissuré, la tortuosité des fissures est la grandeur d'intérêt qui sera traitée. Elle est définie en 3D (resp. 2D) comme l'aire (resp. la longueur) de la fissure percolante sur son aire (reps. longueur) projetée (figure 3.1). Cette quantité est un nombre sans dimension, supérieur à 1 : plus elle est élevée, plus un fluide cherchant à s'écouler dans le réseau fissuré doit parcourir un chemin long, d'où son intérêt dans les problèmes d'étanchéité. La question principale traitée dans ce chapitre est de connaître l'évolution de cette tortuosité τ avec la fraction volumique des granulats ρ^p et leur étalement η . L'étalement η est défini comme le ratio du plus grand diamètre de particule sur le plus petit : $\eta = d_{max}/d_{min}$. En l'absence de vide dans la phase matricielle ($\rho^v = 0$), la fraction volumique des granulats est complémentaire à celle de la matrice : $\rho^p = 1 - \rho^m$.

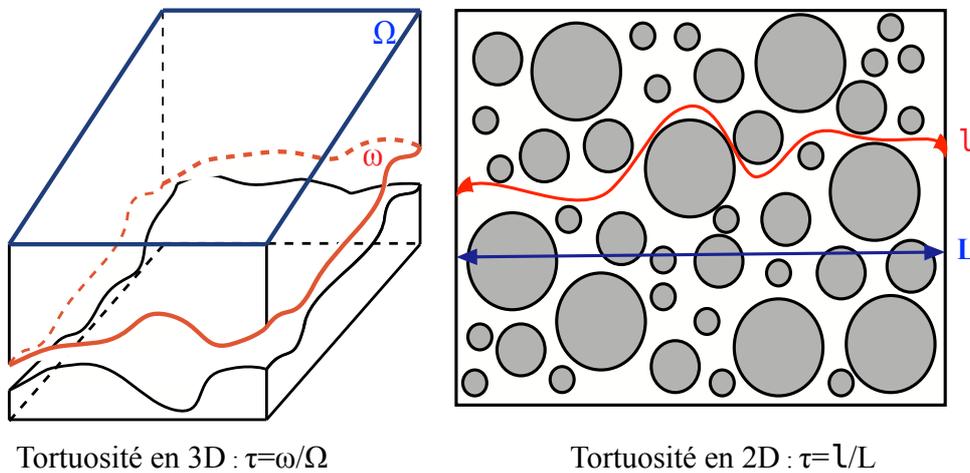


FIGURE 3.1: Illustration de la mesure de la tortuosité d'une fissure en deux et trois dimensions.

Le cas des fissures macroscopiquement planes (figure 3.2) a été résolu théoriquement par Stroeven [119]. Le cas des fissures macroscopiquement non planes n'est pas résolu à notre connaissance. Le cas plan correspond à une situation idéalisée pour laquelle le trajet de la fissure principale n'est que localement modifié par la microstructure. Le cas non plan correspond à une situation réelle pour laquelle le trajet de la fissure principale est localement modifié par la

présence de la microstructure. Cette dernière situation consiste à dire que la fissure se réoriente en permanence de manière à parcourir le trajet énergétiquement le moins coûteux. La différence entre les deux situations est schématisée aussi en 2D sur la figure 3.2.

Dans une première section, une méthodologie basée sur les outils de la morphologie mathématique sera présentée et utilisée pour caractériser la microstructure d'un béton à partir d'images de coupes. Les indicateurs morphologiques identifiés seront utilisés pour la génération d'échantillons numériques représentatifs en se basant sur des méthodes détaillées dans la section 2. Dans une troisième section, des descripteurs géométriques de microstructure seront introduits et appliqués pour s'assurer de la représentativité des bétons numériques générés.

La quatrième section sera consacrée à l'étude statistique de l'influence de la fraction volumique des inclusions et de l'étalement granulométrique sur la tortuosité des réseaux de fissures non planes. Cette étude sera menée sur des échantillons bidimensionnels en utilisant la méthode LEM introduite dans le chapitre précédent et les mécanismes de rupture qui y ont été identifiés. Les résultats seront confrontés aux résultats théoriques de Stroeven [119] concernant les fissures macroscopiquement planes. Dans cette section sera aussi présentée une méthodologie originale pour le calcul de la tortuosité sur des réseaux de fissures complexes.

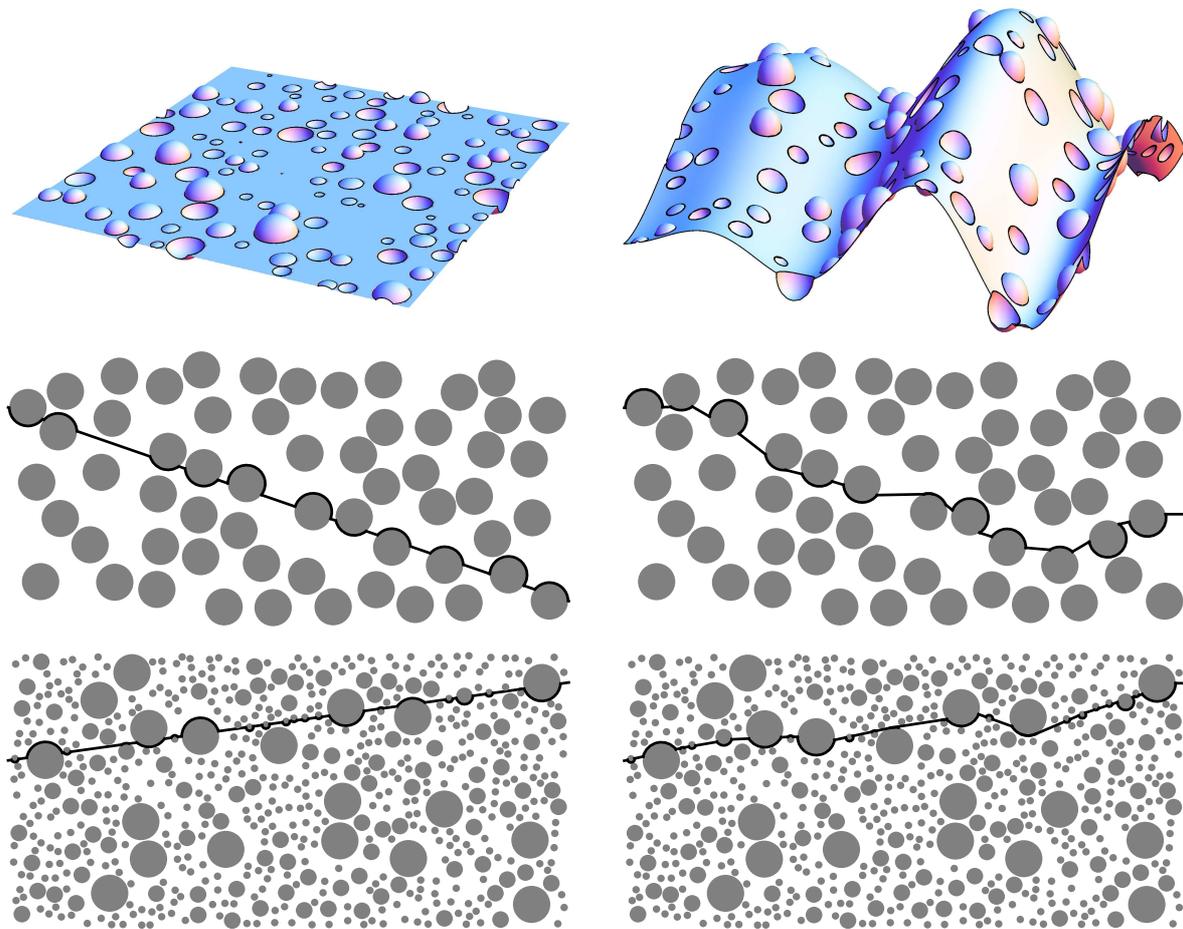


FIGURE 3.2: Schémas de la fissure principale comme une "empreinte" de la microstructure. En haut : cas 3D polydisperse ; au milieu : cas 2D monodisperse ; en bas : cas 2D polydisperse. Colonne de gauche : fissure macroscopiquement plane ; colonne de droite : fissure macroscopiquement non plane. Pour les cas 2D de fissures planes, la fissure débute et termine au droit des inclusions de plus grande taille les plus près des bords latéraux. Pour les cas 2D de fissures non planes, la fissure débute au droit de la plus grande inclusion la plus proche du bord gauche puis suit un trajet consistant à maximiser la surface d'inclusions rencontrées dans un angle de parcours de $\pm 10^\circ$ autour de l'axe horizontal. [Ces schémas ne sont pas obtenues par simulation numérique. Ils sont générés informatiquement] sur la base d'une approche purement géométrique.

3.2 Caractérisation de la microstructure du béton

Il est indispensable de caractériser quantitativement les hétérogénéités de la microstructure du béton afin de pouvoir étudier leur influence sur la morphologie des fissures. L'idée est d'arriver à reproduire des échantillons numériques dont les propriétés structurelles restent les plus fidèles possible au béton réel, tout en tenant compte de la variabilité de sa microstructure.

Des bétons ordinaires rencontrés dans la littérature ont été utilisés comme support (plaques minces et polies). Les hétérogénéités visibles à la surface de ces coupes bidimensionnelles forment des structures géométriques qui peuvent être quantifiées par des critères morphologiques. Deux outils de la morphologie mathématique seront utilisés :

- la covariance, qui permet d'étudier l'agencement spatial des phases dans la microstructure,
- la granulométrie, utilisée ici pour étudier la distribution de la taille des agrégats visibles dans la pâte de ciment solide.

3.2.1 Traitement d'images

La caractérisation de la microstructure à partir de critères morphologiques est accessible par analyse d'images. Plusieurs transformations de base doivent être appliquées, avec un minimum de perte d'informations, afin d'obtenir les images binaires exploitables par les outils de morphologie mathématique. Une coupe de béton type sera utilisée tout au long de ce chapitre pour illustrer les différentes étapes. La figure 3.3 montre une image de cette coupe. La microstructure visible peut être approchée par un biphasique formé de granulats et d'une matrice. Il est donc nécessaire de distinguer ces deux phases.

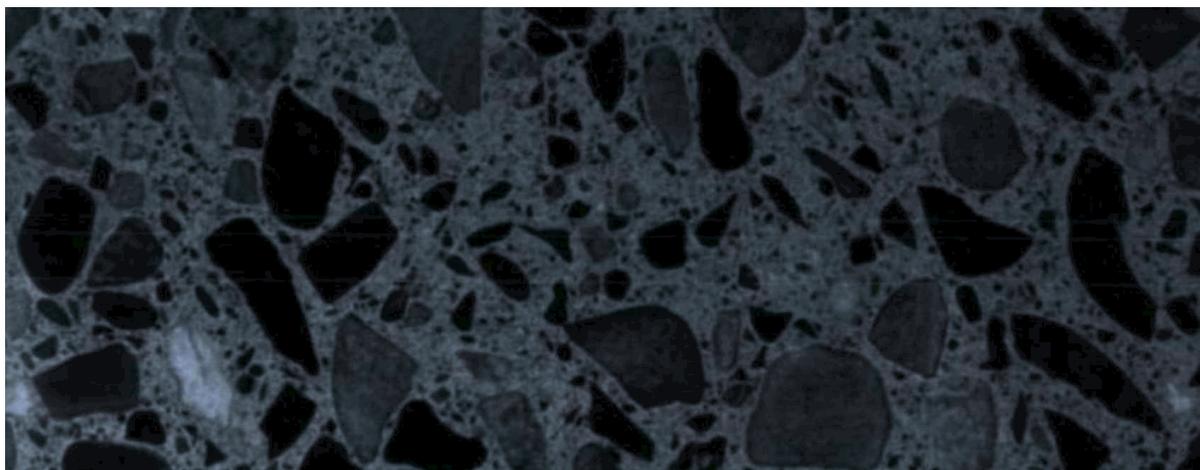


FIGURE 3.3: Coupe d'un béton ordinaire poli de 0.14 m de large révélant une microstructure type [134].

Dans une première étape, un filtre passe-bas uniforme est appliqué. Il consiste à remplacer la valeur de chaque pixel par la valeur moyenne de ses proches voisins. Ce filtre permet d'éliminer les petites fluctuations de l'image et de réduire le bruit. Il peut cependant modifier les petits détails de l'image. La séparation des deux phases passe aussi par un seuillage adéquat. L'image est alors convertie en niveaux de gris (image 8 bit). Une analyse de teintes permet d'appliquer un seuillage manuel en ne retenant dans l'image que les pixels qui ont un niveau de gris supérieur ou inférieur à un seuil donné choisi autour des deux pics correspondant aux couleurs des

phases. Une partie du bruit de l'image est ensuite éliminée. Cette opération est réalisée par ouverture morphologique ou tamisage : érosion suivie d'une dilatation de l'image par un élément structurant carré. C'est la taille de cet élément structurant qui fixe la taille des objets (bruit) à nettoyer. La figure 3.4 montre le résultat obtenu après l'application de ces opérations.

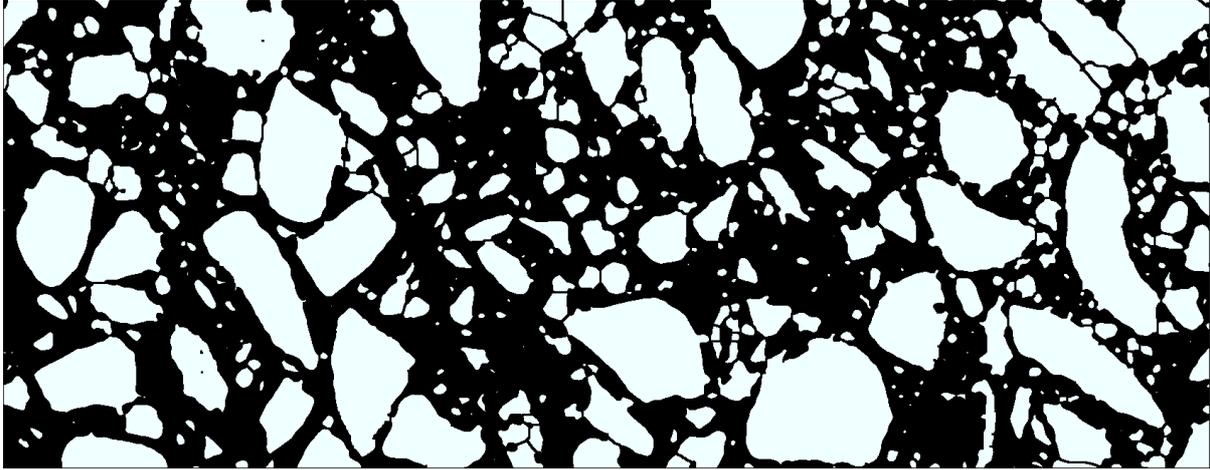


FIGURE 3.4: Image binaire de la coupe du béton obtenue après seuillage et élimination de bruits. Les granulats sont en blanc et la matrice de ciment en noir.

3.2.2 Agencement spatial des phases

La covariance sera introduite dans cette section et utilisée pour quantifier la distribution et l'organisation relative des deux phases : les granulats et la matrice, respectivement en blanc et en noir sur la figure 3.4.

La fonction covariance $C(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{h})$ d'un ensemble aléatoire A , ici les granulats, est la probabilité qu'un point \mathbf{x} et son translaté $\mathbf{x} + \mathbf{h}$ appartiennent à A (e.g. Jeulin[54]) :

$$C(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{h}) = P(\mathbf{x} \in A, \mathbf{x} + \mathbf{h} \in A). \quad (3.1)$$

Elle dépend seulement du vecteur de translation \mathbf{h} et s'écrit $C(\mathbf{h})$ pour un ensemble aléatoire stationnaire si le matériau est macroscopiquement homogène. Si, de plus, A est ergodique, $C(\mathbf{h})$ s'exprime par la fraction volumique de l'intersection entre A et le translaté de A selon \mathbf{h} :

$$C(\mathbf{h}) = \rho^{(A \cap A_{-\mathbf{h}})}. \quad (3.2)$$

La covariance est estimée à partir d'images obtenues à l'intérieur d'un masque X , au moyen des covariogrammes géométriques des ensembles $A \cap X$ et X . Le résultat de l'érosion par $(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{h})$, qui dépend du module $h = \|\mathbf{h}\|$ et de l'orientation α du vecteur \mathbf{h} , est caractéristique de la taille et de l'agencement d'objets connexes constituant l'ensemble A . Les propriétés principales de la covariance sont les suivantes [69, 110] :

- $C(0) = P(\mathbf{x} \in A) = \rho^X$. La valeur à l'origine du covariogramme donne la fraction volumique initiale de la teneur en X
- la covariance admet une valeur asymptotique théorique égale au carré de la teneur en X en fonction de h : pour l'orientation α , $C(\mathbf{h})$ atteint son palier à la distance L_α (ou portée, échelle de longueur caractéristique de la structure) ; $C(L_\alpha) = (\rho^X)^2$
- la covariance présente un caractère directionnel et renseigne sur l'anisotropie de la phase X
- si la covariance n'atteint pas son palier asymptotique, cela signifie qu'il existe une macrostructure à plus grande échelle
- s'il y a périodicité dans le covariogramme alors il y a périodicité dans l'image
- la pente à l'origine du covariogramme est liée à la surface spécifique de l'ensemble A .

La figure 3.5 montre l'évolution de la fonction covariance $C(\mathbf{h})$ de la phase granulat en fonction de la distance h dans le béton étudié, suivant trois directions : horizontale, verticale et à 45° . La valeur asymptotique théorique est également tracée. Cette valeur est égale au carré de la fraction volumique des granulats, qui, elle, est donnée par la valeur à l'origine $C(0) = \rho^p = 0.38$. Pour les trois orientations, la covariance diminue progressivement en fonction de la distance, jusqu'à atteindre un palier, à partir d'une certaine distance L_α . Ce palier converge bien vers la valeur asymptotique théorique de 0.15. L_α définit la dimension caractéristique de la microstructure (ici, environ 0.025 m). Par ailleurs, le covariogramme donne des résultats à peu près similaires suivant les trois orientations (fraction initiale, asymptote, pente à l'origine) : l'hypothèse est formulée que les phases sont approximativement distribuées de manière isotrope.

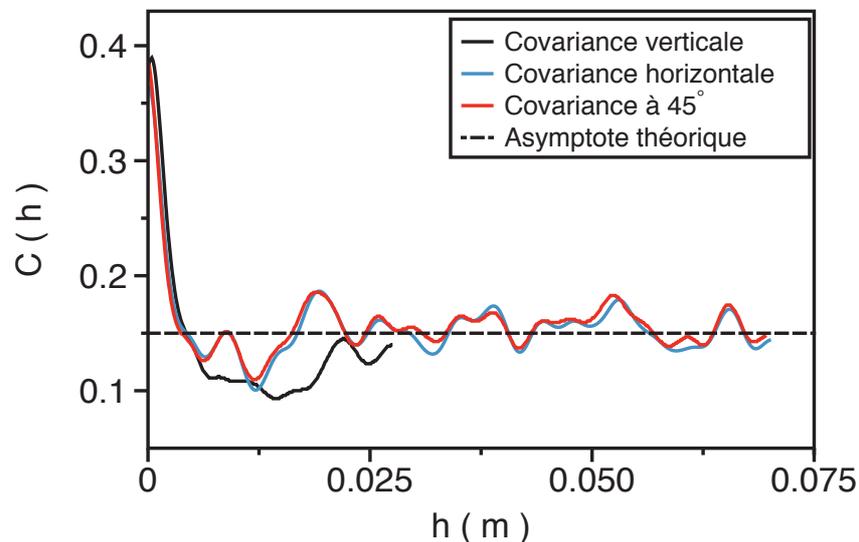


FIGURE 3.5: Covariogramme du béton de la figure 3.3 montrant l'évolution de la covariance de la phase granulat (X) en fonction de la distance h en mètre dans trois directions : horizontale, verticale et à 45° .

3.2.3 Courbe granulométrique

La courbe granulométrique représente la distribution statistiques des différentes tailles d'inclusions présentes au sein du matériau. Le logiciel libre *ImageJ*, permet de scanner les images binaires de béton et de détecter et délimiter les bords des granulats. Il est évident que les granulats ne sont pas circulaires, mais au vu de l'histogramme sur l'indice de leurs circularité tracé sur la figure 3.6 (l'indice est égal à 1 pour une inclusion circulaire) et présentant une grande fréquence d'indices élevés de circularité et au vue des facilités numériques qu'offrent les particules circulaires, cette hypothèse sera considérée.

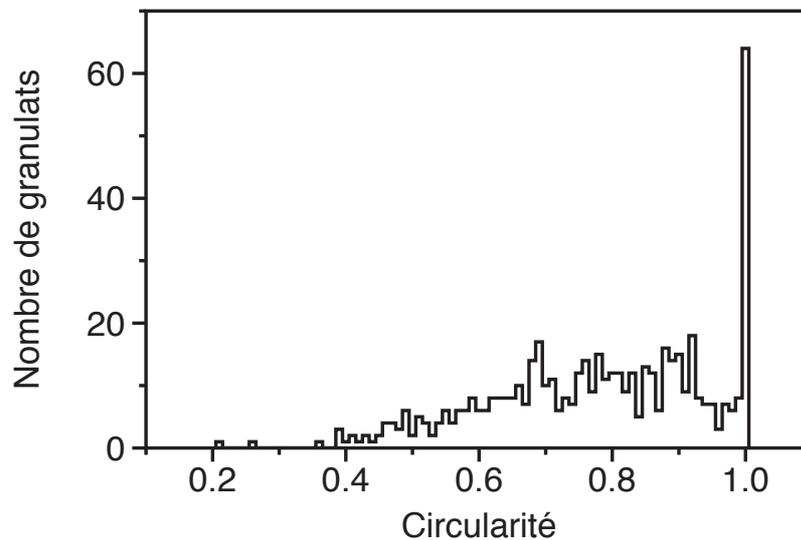


FIGURE 3.6: *Histogramme des l'indices de circularité des granulats du béton de la figure 3.3. L'indice est compris entre 0 et 1 et est égal à 1 si le granulat est circulaire.*

L'aire des granulats est par la suite mesurée et leurs rayons équivalents sont calculés. Ces rayons correspondent aux rayons de disques qui auraient les mêmes aires que les granulats. Les granulats dans le béton seront donc approchés par des particules circulaires. La figure 3.7 montre l'histogramme des rayons équivalents ainsi que leur fonction de distribution cumulée (cdf) en fonction des rayons équivalents. Ce type de courbe servira de support pour générer la granulométrie utilisée dans les échantillons numériques.

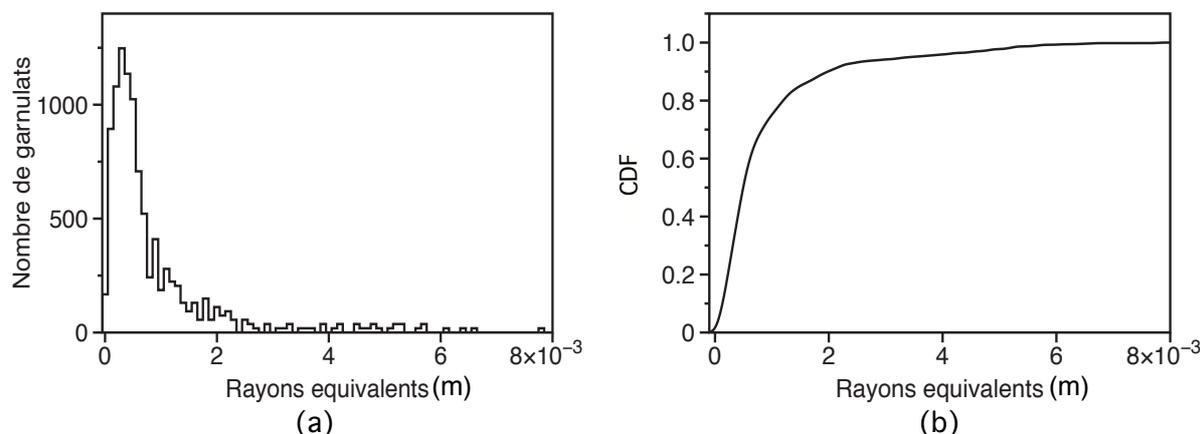


FIGURE 3.7: *Granulométrie équivalente. (a) Histogramme des rayons équivalents. (b) Fonction de distribution cumulée (cdf) en fonction des rayons équivalents.*

3.3 Génération d'assemblages granulaires représentatifs

Le comportement du béton est régi par les propriétés mécaniques des phases mais aussi par leur agencement dans le matériau. En absence de porosité, l'organisation des phases est dominée par celle des particules. Cette section présente un ensemble d'outils numériques permettant de réaliser des échantillons dans lesquels la taille, la disposition et l'organisation des particules sont maîtrisées. L'enjeu est de construire des assemblages granulaires proches de ceux d'un béton réel et de pouvoir contrôler leurs textures dans le but de quantifier leurs influences sur la morphologie des fissures.

3.3.1 Génération de la courbe granulométrique

Dans cette partie est présentée une méthode permettant de générer une distribution de tailles de particules statistiquement représentative d'une courbe granulométrique donnée. Cette méthode est appliquée à un modèle de courbe granulométrique permettant de piloter la forme et l'étalement de la distribution des tailles de particules.

3.3.1.1 Génération de la distribution de tailles

La méthode utilisée est celle proposée par Voivret [139]. Cette méthode évalue de manière implicite la fonction de répartition d'une distribution volumique donnée de particules tout en contrôlant le nombre de particules générées et leur représentativité statistique et volumique, autant à l'échelle de la distribution (globale) qu'à l'échelle de chaque classe de tailles (locale). Grâce à des critères de représentativité explicites, cette méthode garantit que les particules rares

soient statistiquement représentées et que le volume d'une seule particule soit faible devant celui de toute la classe.

Dans cette méthode, la distribution volumique cumulée des particules est discrétisée en N_c classes. Chaque classe contient N_i particules données par la partie entière de l'expression suivante :

$$N_i = \frac{N_p^{min}}{N'_p} N'_i \quad \text{avec} \quad N'_i = \frac{N_{p/c}^{min}}{\min(n_i)} n_i \quad (3.3)$$

et où N_p^{min} et $N_{p/c}^{min}$ sont respectivement le nombre minimum de particules total et le nombre minimum de particules dans chaque classe, assurant ainsi le représentativité statistique des particules. N'_p est une estimation du nombre total de particule dans la distribution ($N'_p = \sum_{i=1}^{N_c} N'_i$), n_i la quantité de particules (non entière) dans chaque classe et $\min(n_i)$ représente la valeur de n_i dans la classe la moins peuplée.

La fonction de répartition $F(d)$ est obtenue par la somme des répartitions de densité de probabilité $P_i(d)$ des tailles d pour chaque classe i avec $P_i(d) = N_i/N_p$ où N_p est le nombre total de particules.

A partir de la distribution volumique des tailles de particules dans le béton obtenu dans la section 3.2.3, il est possible de générer la distribution de tailles correspondante.

3.3.1.2 Modélisation de la courbe granulométrique

Pour générer l'éventail d'échantillons numériques nécessaire à l'étude de l'influence de la microstructure du béton sur la morphologie des fissures, il est important de disposer d'une forme analytique générale de la courbe granulométrique permettant de faire varier au moins deux paramètres essentiels de la granulométrie : l'*étalement relatif* et la forme de la distribution volumique. L'*étalement relatif* d'une courbe représente la taille relative entre les plus grosses et les plus petites particules et la courbure caractérise l'importance relative de ces deux classes. Voivret [139] a développé un modèle permettant de répondre à ces critères qui s'exprime comme une loi β sous sa forme cumulée et dépend de trois paramètres : $\beta(s, a, b)$. Les paramètres a et b permettent de faire varier la forme de la distribution volumique mais n'ont aucune influence sur l'*étalement relatif* qui, lui, est contrôlé par le paramètre s :

$$s = \frac{d_{max} - d_{min}}{d_{max} + d_{min}} = \frac{\eta - 1}{\eta + 1} \quad (3.4)$$

où d_{max} et d_{min} correspondent aux diamètres maximum et minimum des particules et η l'*étalement*. Quelles que soient les tailles extrêmes mises en jeu, l'*étalement relatif* présente l'avantage de varier dans l'intervalle $[0, 1]$. Le cas $s = 0$ correspond à une distribution monodisperse tandis que $s = 1$ correspond à une distribution infiniment polydisperse. Ce modèle de courbe granulométrique nécessite un nombre limité de paramètres scalaires tout en permettant l'accès à un riche éventail de formes de distribution contenant la distribution du béton. La figure 3.8

présente des exemples de distributions cumulées exprimées en fonction du diamètre réduit :

$$d_r(d) = \frac{d - d_{min}}{d_{max} - d_{min}}. \quad (3.5)$$

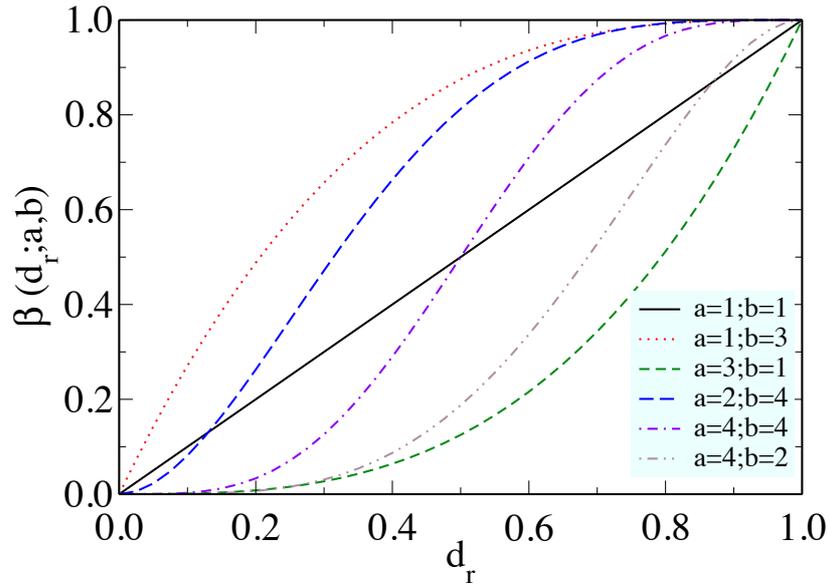


FIGURE 3.8: Exemple de distributions cumulées en fonction des paramètres de forme a et b et du diamètre réduit d_r .

3.3.2 Distribution granulaire

Après avoir défini la courbe granulométrique à travers les paramètres de forme a et b ainsi que l'étalement relatif s et après avoir obtenu une génération de cette distribution statistiquement et volumiquement représentative, le problème de l'assemblage granulaire se pose. L'enjeu est non seulement de réaliser des configurations proches de l'équilibre mécanique mais aussi de pouvoir contrôler les propriétés géométriques. Il est souhaitable, par exemple, d'atteindre une compacité cible avec un étalement donné.

La fraction volumique de la phase granulaire des bétons varie, typiquement entre 0.4 et 0.8. Pour créer ce type d'assemblage, les méthodes purement géométriques seront privilégiées en raison de leur rapidité d'exécution comparée aux méthodes de type DEM. L'absence d'informations sur les forces de contact et l'état mécanique peu stable des assemblages obtenus ne posent pas de problème dans la mesure où la rhéologie du béton ne dépend pas uniquement des interactions entre les particules en contact, comme c'est le cas des assemblages secs, mais aussi des effets liés à la matrice solide qui, dans cette étude, remplira entièrement l'espace interstitiel.

3.3.2.1 Choix d'une méthode géométrique

La polydispersité des particules fait apparaître lors de la distribution granulaire un phénomène de ségrégation de taille. Un mélange initialement homogène de particules de tailles différentes a alors naturellement tendance à disparaître au profit de rassemblements de particules de même propriétés, créant ainsi des mélanges non homogènes. Par exemple, les bétons autoplaçants sont plus fluides que les bétons classiques pour faciliter leur mise en œuvre mais sont plus sujets à ségrégation. En effet, les particules étant plus libres, elles ont plus facilement tendance à se séparer au cours de la mise en place et donnent lieu à un béton plus hétérogène. La formulation d'un tel béton doit être adaptée pour minimiser la ségrégation.

La ségrégation granulaire rend aussi l'application des méthodes d'assemblage numérique plus délicate et plus coûteuse en temps de calcul, et ceci d'autant plus que l'étalement des tailles augmente. Différentes méthodes ont été développées et testées dans le cadre de cette thèse afin d'essayer d'approcher au mieux la microstructure granulaire du béton. Quelques unes sont présentées dans cette section et sont applicables en deux et en trois dimensions. Dans toutes ces méthodes, l'interpénétration entre les particules ainsi qu'entre les particules et les parois du domaine ne sont pas autorisées.

Méthode par minimisation de potentiel.

Dans une première étape les particules sont disposées aléatoirement sur une grille bi- ou tri- dimensionnelle et séparées d'une distance l_{max} les unes des autres. Le principe de la méthode est de tirer aléatoirement une particule puis de lui imposer un déplacement dans une direction tout aussi aléatoire. Le déplacement est accepté s'il minimise une fonction énergétique ψ , et refusé avec une certaine probabilité s'il l'augmente, introduisant ainsi un phénomène aléatoire supplémentaire. Cette fonction peut prendre différentes formes selon le résultat souhaité.

Par exemple, dans le cas où ψ représente l'énergie d'une particule de masse m dans le champ de pesanteur g ($\psi = mg\hat{z}$ où \hat{z} est l'altitude du centre de gravité), les déplacements qui minimisent l'énergie sont ceux qui abaissent la position des particules. Ce modèle est très rapide mais induit une ségrégation importante qui augmente avec l'étalement et conduit à l'accumulation des petites particules au fond du domaine, puisqu'il leur est plus facile de traverser les vides entre les particules que c'est le cas pour les plus grosses particules. Pour éviter ce mécanisme, la fonction énergétique suivante a été définie :

$$\psi = -E - K(R_i - R_j) \quad \text{pour } l < l_{lim} \quad (3.6)$$

$$\psi = -K(R_i - R_j) \quad \text{pour } l > l_{lim} \quad (3.7)$$

où R_i et R_j sont les rayons de deux particules, l la distance entre leurs centres, et K et E deux constantes positives. Cette formulation favorise le rapprochement entre les particules de rayons très différents et s'amplifie au dessous d'une certaine distance l_{lim} entre les particules. Ce potentiel limite ainsi le phénomène de ségrégation mais ne le supprime pas pour les grands

étalements. Il permet néanmoins d'atteindre des compacités plus élevées qu'avec un potentiel gravitaire.

Méthode par regroupement aléatoire.

La méthode consiste à tirer aléatoirement les particules par couple : à la première est imposé un déplacement suivant la droite inter-centre de façon à réduire la distance qui les sépare. L'amplitude du déplacement est fonction du volume total qu'occupent les particules. Cette méthode est plus rapide que la méthode par potentiel et permet d'obtenir des compacités élevées, mais nécessite une procédure supplémentaire pour éviter la ségrégation dans les échantillons polydisperses. Une solution testée consiste à faire une partie du calcul sur des particules monodisperses, jusqu'à atteindre une compacité élevée, puis de réintroduire aléatoirement la polydispersité de façon à respecter la granulométrie initiale.

Dans ces deux méthodes géométriques l'évolution des particules est limitée par de simples règles de déplacement (figure 3.9). En règle générale, ce processus peut être collectif comme dans l'algorithme de Han et al [41], ou séquentiel comme dans les méthodes inspirées par les travaux de Vold [140] comme c'est le cas pour Visscher et al [136] ou encore Jullien et Meakin [56, 57, 59, 58] qui ont popularisé cette approche.

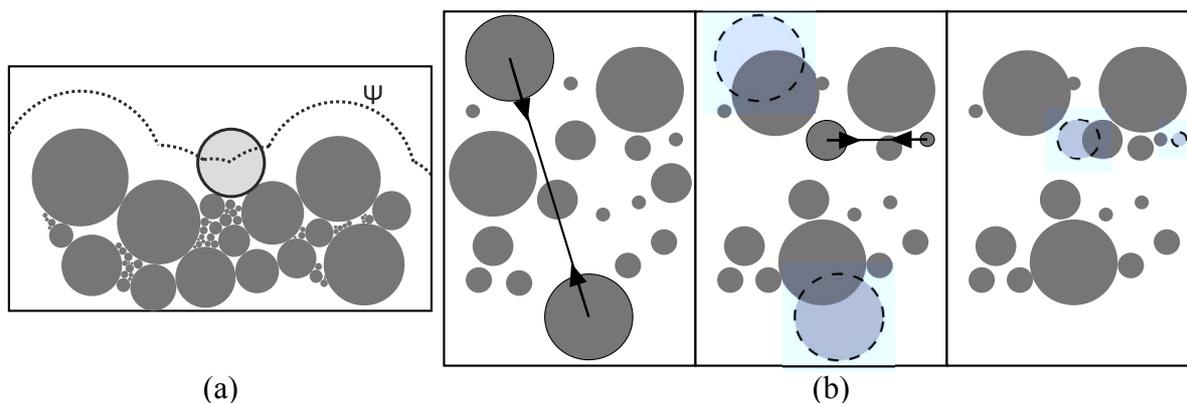


FIGURE 3.9: Illustration des méthodes géométriques. (a) Méthode par minimisation de potentiel : placement direct à la position la plus basse en fonction de la taille de la particule à placer. (b) Illustration de deux pas de calcul de la méthode par regroupement aléatoire : rapprochement de deux particules tirées aléatoirement suivant la droite inter-centres

Méthode d'addition séquentielle aléatoire [144, 127, 128].

Cette méthode s'inspire du problème unidimensionnel du parking [97]. Elle consiste à placer successivement et aléatoirement des particules dans un espace fini. Pour chaque particule,

n positions aléatoires sont testées jusqu'à satisfaire les conditions d'interpénétration avec les autres particules et les limites du domaine. Une hiérarchie dans l'ordre de dépôt est introduite pour accélérer cette procédure. Cette méthode permet d'obtenir des échantillons homogènes même avec une granulométrie fortement polydispense.

La méthode par regroupement aléatoire introduit de la ségrégation mais est la méthode la plus rapide pour obtenir des échantillons denses. Elle est donc retenue pour les distributions monodisperses. Nos études nécessitant une large gamme de distributions granulaires, la méthode d'addition séquentielle aléatoire avec hiérarchie dans l'ordre de dépôt sera utilisée pour les cas polydispersés. Ce choix est motivé par la faible ségrégation de taille introduite par cette méthode. Ces deux méthodes seront appliquées jusqu'à obtention des fractions volumiques de particules désirées, puis un échantillon sera découpé loin des frontières pour éviter les effets de bords.

3.3.3 Choix d'un espace paramétrique

La méthode d'assemblage granulaire à partir d'une courbe granulométrique introduite dans la section 3.3 a été utilisée pour approcher la texture des bétons réels établie à partir des images de coupes. Un critère important de cette méthode est le nombre de classes de tailles de particules (N_c) utilisé pour discrétiser l'intervalle entre le diamètre le plus grand et le diamètre le plus petit, respectivement d_{max} et d_{min} . Un nombre élevé de classes va fournir une bonne approximation de la courbe granulométrique mais la fraction volumique représentée par chaque classe va diminuer à mesure que N_c augmente. Ce point est particulièrement critique pour les classes des plus grosses particules où toute la fraction volumique peut être représentée par une seule particule. Dans cette étude le choix de trois classes isovolumiques a été fait ($N_c = 3$). Ce nombre permet d'approcher correctement les courbes granulométriques tout en garantissant la représentativité de chaque classe indépendamment de la fraction volumique des particules et de l'étalement choisi. De cette manière on a la relation :

$$N_1 V(d_1) = N_2 V(d_2) = N_3 V(d_3) \quad (3.8)$$

où $V(d_i)$ est le volume d'une particule de diamètre d_i : $V(d_i) = \pi(d_i/2)^2$ en deux dimensions ; $V(d_i) = \frac{4}{3}\pi(d_i/2)^3$ en trois dimensions.

Dans les simulations LEM appliquées aux matériaux à inclusions granulaires, un juste équilibre doit être trouvé entre le nombre d'éléments par particule nécessaire à la précision de la méthode, le nombre total de particules pour une bonne représentativité statistique de l'échantillon, et le respect de la granulométrie désirée. Les échantillons considérés comme représentatifs d'un béton comprennent en moyenne dix particules de plus grande taille par direction, soit une moyenne de cent particules de plus grande taille en deux dimensions (voir section 3.5.5.2). Le nombre des particules de tailles moyennes et petites dépend alors de la compacité et de l'étalement choisis.

D'autre part, pour avoir une bonne représentativité géométrique des particules dans les méthodes sur réseau telles que la LEM, il faut un minimum d'environ dix éléments unidimension-

nels par diamètre de particules [124]. Par conséquent, lorsque le rapport entre la plus grande et la plus petite taille de particules augmente, le nombre d'éléments nécessaire à une discrétisation convenable augmente de manière très significative : le temps de calcul augmente fortement avec l'étalement.

Pour une fraction volumique de particule $\rho^p = 0.46$ et une distribution granulaire obtenues à partir des coupes de béton, le tableau 3.10 donne l'évolution du nombre total de particules et des éléments en fonction de l'étalement η . Ce calcul est exécuté dans un échantillon carré de $22 d_{max}$ de côté avec $d_{min} = 10 a$, où a est la taille d'un élément du maillage. La génération d'un échantillon de $1.5 \cdot 10^6$ éléments dure environ 6 heures et un test de traction simple jusqu'à rupture, une semaine en utilisant un processeur Intel Xeon de 2.93 GHz . Pour des étalements supérieurs à $\eta = 6$, les temps de calcul ne sont plus adaptés à l'étude statistique nécessaire à la compréhension de la relation entre microstructure et morphologie des fissures.

Etalement η	1	3	5	6
Nombre de particules	298	1 295	3 094	4 292
Nombre d'éléments	51 219	460 972	$1.28 \cdot 10^6$	$1.84 \cdot 10^6$

FIGURE 3.10: Evolution du nombre de particules et d'éléments en fonction de l'étalement dans un échantillon fini.

Dans le but d'étudier le rôle de la microstructure sur la morphologie des fissures, quatre fractions volumiques de particules, encadrant les fractions mesurées dans les coupes de béton, et quatre étalements différents ont été considérés, $\rho^p = 0.3, 0.4, 0.5$ et 0.7 ainsi que $\eta = 1$ (le cas monodisperse), 3, 5, et 6. Pour chacune de ces seize granulométries, cinq distributions granulaires ont été effectuées, portant le nombre d'échantillon à quatre-vingt. La figure 3.11 montre un exemple d'échantillons avec $\eta = 3$ et $\rho^p = 0.4$.

3.4 Représentativité des échantillons numériques

Dans cette section, les microstructures des bétons numériques générées seront analysées et comparées aux bétons réels. Des indicateurs morphologiques et géométriques seront utilisés pour s'assurer de la représentativité des échantillons numériques. Certains traitements sont nécessaires pour pouvoir comparer, toutes choses égales par ailleurs, ces échantillons.

Les particules ou les granulats se trouvant coupés par les bords des échantillons sont ainsi supprimés et la compacité du matériau est recalculée pour assurer la comparaison d'échantillons ayant des fractions volumique de phases similaires. La figure 3.12 représente l'échantillon modèle et un échantillon numérique ainsi traités.

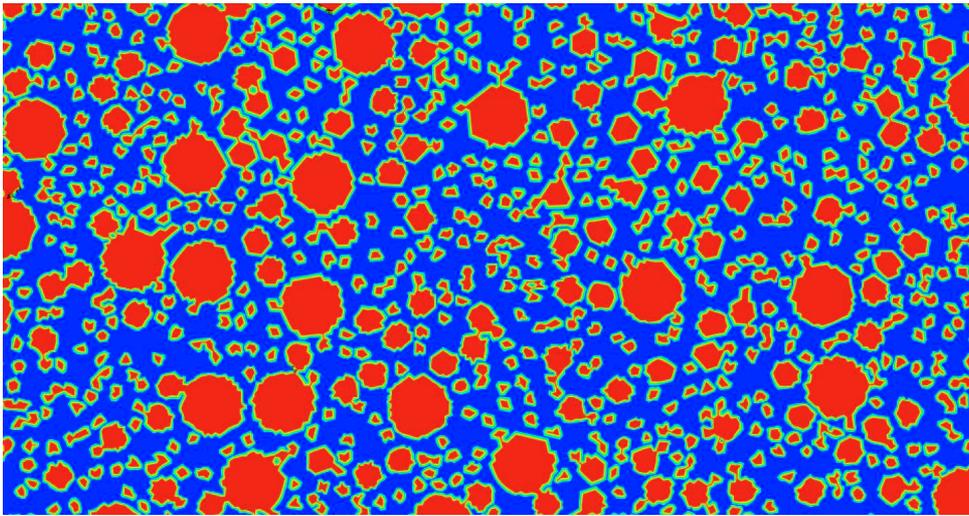


FIGURE 3.11: Echantillon numérique obtenu par la méthode LEM avec comme propriétés micro-structurales $\eta = 3$ et $\rho^p = 0.4$. Les particules sont représentées en rouge, la matrice en bleu et les interfaces en vert.

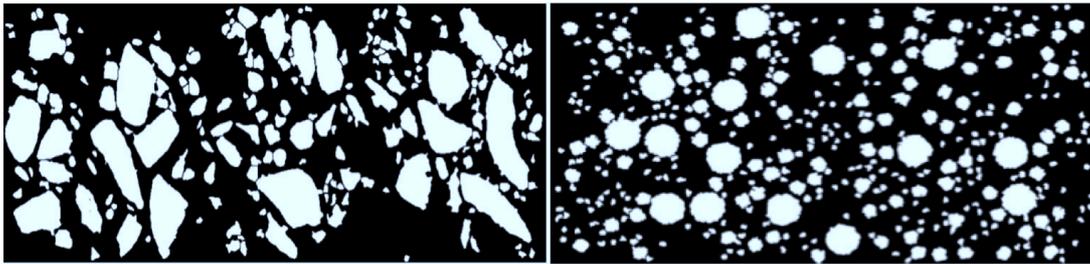


FIGURE 3.12: Suppression des particules coupées par les bords de l'échantillon modèle (à gauche) ainsi que dans l'échantillon numérique correspondant de la figure 3.11 (à droite).

3.4.1 Comparaison des granulométries

La méthodologie utilisée pour approcher la texture du béton réel introduit trois erreurs principales dans la granulométrie numérique générée :

- la granulométrie est distribuée seulement sur trois classes isovolumiques de particules,
- les granulats sont approchés par des particules circulaires,
- le discrétisation spatiale utilisée ne permet pas d'épouser parfaitement la forme des particules.

Par ailleurs, la loi β introduite dans la section 3.3.1.2 permet d'approcher la courbe granulométrique réelle par les paramètres de forme a et b . Dans le cas du béton modèle, en vue de la fonction de distribution cumulée des rayons équivalents exprimée dans la figure 3.7, les paramètres $a = 1$ et $b = 9$ sont normalement nécessaires pour approcher sa granulométrie. Une correction de ces paramètres de forme permet de pallier aux erreurs numériques introduites. La figure 3.13 montre la superposition de la granulométrie réel du béton modèle et celle calculée

à partir d'un béton numérique généré avec les paramètres de forme $a = 1$ et $b = 3$. Cette figure montre que toutes les hypothèses émises se compensent pour donner une granulométrie numérique équivalente à celle du béton réel modèle avec une bonne approximation.

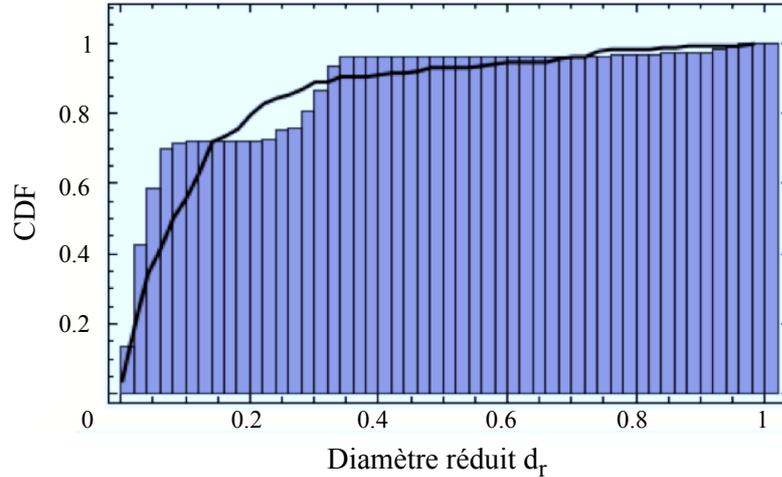


FIGURE 3.13: Fonction de distribution cumulée (CDF) en fonction du diamètre réduit d_r des particules. En trait noir pour le béton modèle. En histogramme l'échantillon numérique.

3.4.2 Comparaison des covariogrammes

La figure 3.14 montre l'évolution de la fonction covariance de la phase particulière en fonction de la distance h dans le béton modèle et dans un échantillon généré numériquement. Les tracés sont lissés et la figure présente une image des échantillons. La covariance est calculée dans chaque échantillon suivant la direction horizontale et verticale. Sa valeur à l'origine montre bien que la fraction volumique réelle de ces échantillons (après suppression des particules coupées par les bords) est de $\rho^p = 0.3$. Les tracés tendent tous vers une valeur asymptotique de l'ordre de $(\rho^p)^2 = 0.1$. Les fonctions covariances dans les deux directions et dans chaque échantillon sont confondues montrant que la distribution des phases dans l'échantillon numérique, tout comme dans le béton réel, est isotrope.

3.4.3 Approche statistique par descripteurs géométriques

La représentativité des échantillons numériques peut aussi être évaluée à travers la distribution spatiale des centres des particules. Pour les interactions à longue distance, la fonction de Ripley $K(r)$ (ou the second order intensity function) et la fonction de distribution radiale $g(r)$ forment de bons outils. Bien que $g(r)$ et $K(r)$ soient reliés, ils donnent une information physique différente. $K(r)$ peut distinguer entre les différentes distributions de points et détecter les régularités, alors que la fonction de distribution radiale $g(r)$, renseigne sur la probabilité d'occurrence de la distance intercentres des particules. Ces deux fonctions statistiques permettent

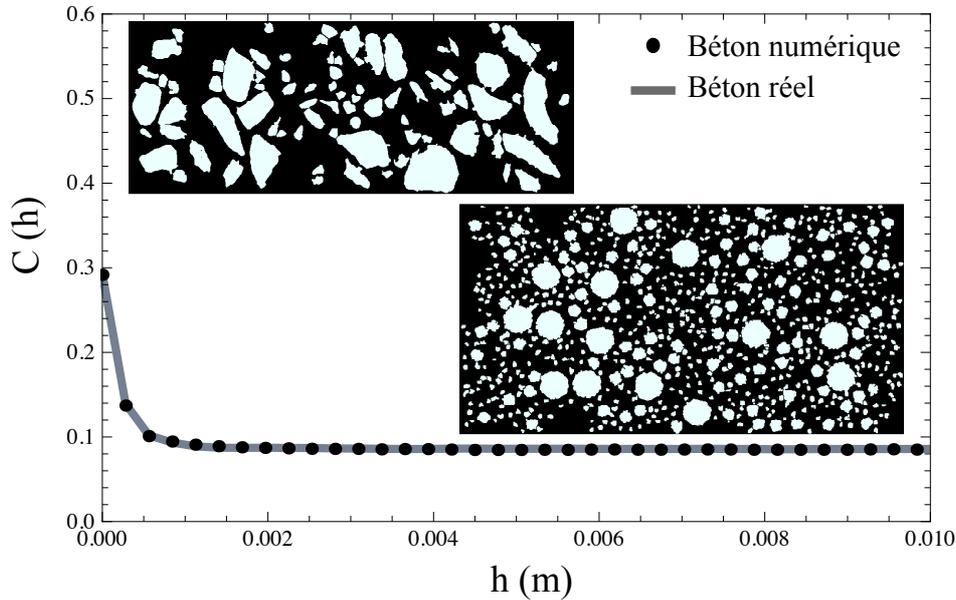


FIGURE 3.14: Comparaison entre le covariogramme du béton modèle et celui d'un béton généré numériquement. Les deux tracés montrent une même valeur à l'origine, présentent la même pente et tendent vers la même valeur asymptotique démontrant le caractère isotrope de la distribution des phases dans les échantillons.

une bonne caractérisation des microstructures et forment de bon indicateurs de la représentativité des bétons numériques.

3.4.3.1 Fonction $K(r)$ de Ripley (second order intensity function)

Pyrz [89, 90] suggère que la fonction $K(r)$ de Ripley est le descripteur morphologique le plus pertinent quant à la caractérisation d'une distribution spatiale de points. Il est défini comme étant le nombre de points (ou centres de particules) qui se trouve dans un cercle de rayon r centré sur un point aléatoire de la distribution, divisé par la densité de points (nombre total de points de la zone d'analyse par unité de surface). Cette mesure est appliquée aux centres des particules dans une fenêtre finie de surface Ω de l'échantillon et peut être estimée après correction des effets de bord [90] par l'expression :

$$K(r) = \frac{\Omega}{N^2} \sum_{k=1}^N \frac{I_k(r)}{w_k} \quad (3.9)$$

où N est le nombre total de points, $I_k(r)$ est le nombre de points se trouvant dans le cercle de rayon r et w_k est le ratio de la circonférence de ce cercle qui se trouve à l'intérieur de la fenêtre de mesure. $I_k(r)$ est estimé en comptabilisant les points qui se trouvent dans le cercle de rayon

r et centré sur le centre d'une particule. La procédure est répétée pour tous les rayons et pour chaque centre de particule pour obtenir $K(r)$ par l'équation (3.9). Une limitation sur la taille maximale de r permet d'éviter une mésestimation des poids w_k , $0 < r < 0.3\sqrt{\Omega}$ (figure 3.15).

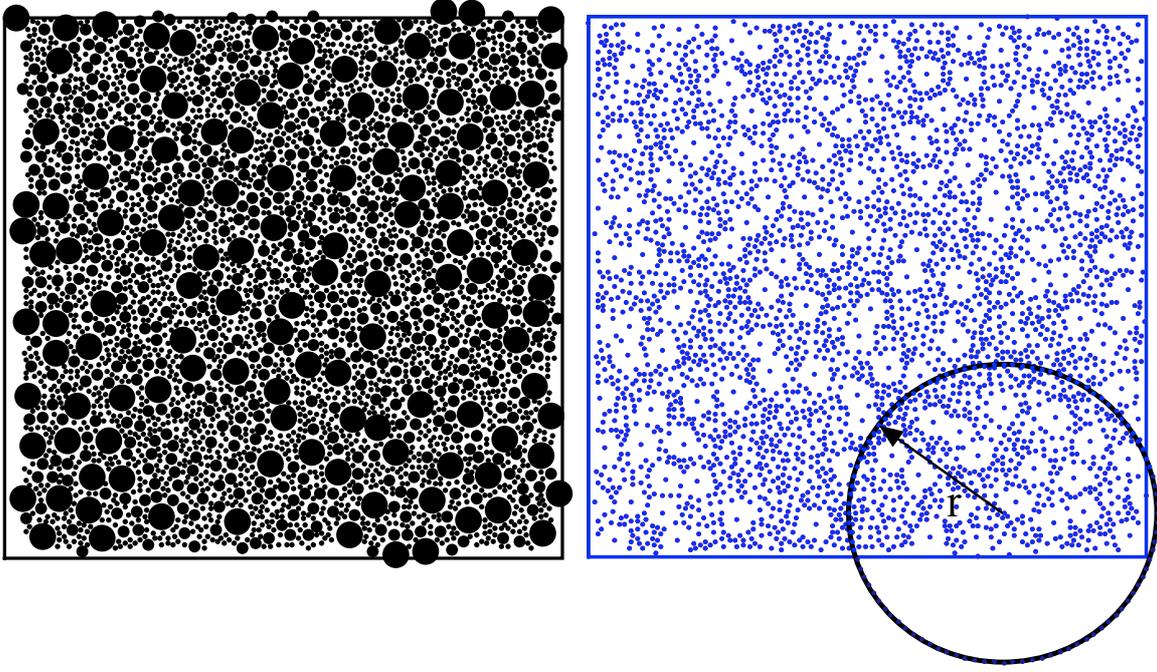


FIGURE 3.15: Illustration d'un échantillon numérique (à gauche) et de l'estimation de la fonction $K(r)$ sur les centres de ses particules (à droite). En bleu les centres des particules, $I_k(r)$ est le nombre de points se trouvant à l'intérieur du cercle de rayon r et w_k est le ratio de la circonférence de ce cercle qui se trouve à l'intérieur de la fenêtre de mesure. N est le nombre total de centres et Ω est l'aire la surface délimitée par les traits bleus.

La fonction de Ripley permet de différencier entre différents types de distribution en considérant la distribution de Poisson (complètement aléatoire) comme référence. Cette dernière, dans un domaine bidimensionnel, est donnée par $K_p(r) = \pi r^2$ avec $r > 0$ [55]. Par exemple, une distribution présentant des amas sera située au dessus de la courbe de la distribution de Poisson alors qu'une distribution régulière sera en dessous [90, 89, 1].

Dans la figure 3.16 (a), la fonction $K(r)$ de Ripley est évaluée dans des échantillons numériques carrés de 0.14 m de coté ayant une fraction volumiques de particule constante $\rho^p = 0.5$ et des étalements variant de $\eta = d_{max}/d_{min} = 1$ (le cas monodisperse) à $\eta = 5$ puis pour un étalement constant ($\eta = 5$) et des ρ^p variant entre 0.3 et 0.7. Cette figure montre que $K(r)$ se confond pratiquement à la courbe de distribution poissonnienne dans tous les échantillons sans être influencée par l'étalement ou la fraction volumique des particules, indiquant ainsi l'absence de cluster (regroupement de particules) dans les échantillons numériques. Sur cette même figure, un zoom révèle qu'il existe une très légère divergence entre les courbes et la distribution Poissonnienne pour les grandes valeurs de r . Cet écart s'explique par la hiérarchie introduite dans l'ordre de dépôt des particules dans la méthode de distribution granulaire utilisée. En effet les

plus petites particules, déposées en dernier, ont tendance à se retrouver dans les espaces réduits laissés par les plus grandes particules créant ainsi un léger phénomène de regroupement. La détection de ces clusters s'amplifie avec la taille des fenêtres de calcul (quand r augmente). Par ailleurs, pour les grandes distances, l'évolution de $K(r)$ tend à devenir linéaire. Ceci traduit le fait qu'au-dessus d'une certaine valeur de r , le nombre de particules évolue proportionnellement à l'aire des échantillons.

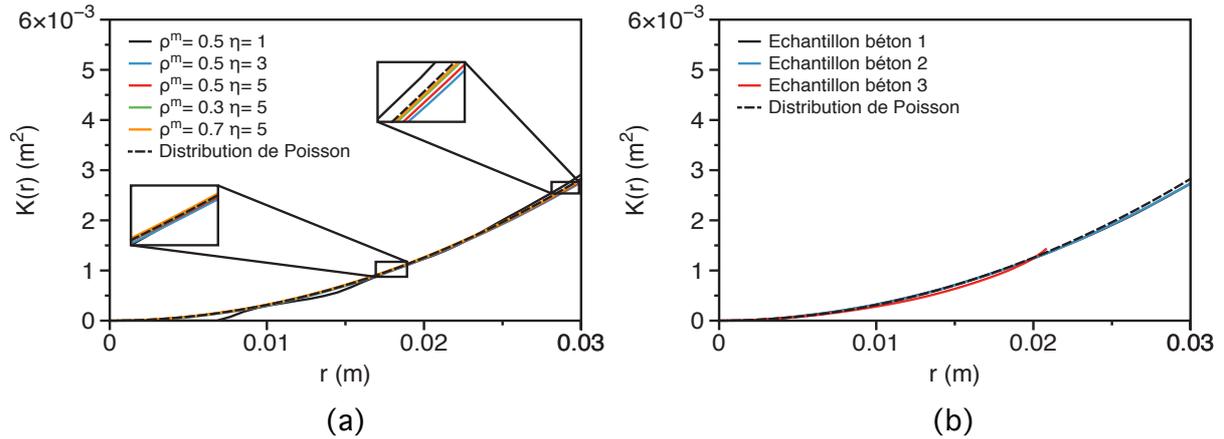


FIGURE 3.16: Evolution de la fonction $K(r)$ de Ripley en fonction de la distance r . (a) Dans des échantillons numériques contenant des fractions volumiques de particules allant de $\rho^p = 0.4$ à $\rho^p = 0.7$ et des étalements de $\eta = 1$ à $\eta = 5$. (b) Dans trois échantillons de béton issus de structures du génie civil. La fonction $K(r)$ est aussi calculée pour une distribution de Poisson et tracée en pointillés noirs dans les deux figures.

La figure 3.16 (b) montre l'évolution des fonctions $K(r)$ de Ripley en fonction de la distance r dans trois échantillons issus de structures du génie civil. Les tracés sont tous les trois pratiquement confondus à la distribution poissonnienne. Ainsi, cette fonction donne des tendances identiques entre les échantillons de bétons réels et numériques.

3.4.3.2 Fonction de distribution radiale $g(r)$ (pair distribution function)

La fonction de distribution radiale $g(r)$ donne la probabilité de trouver une particule dont le centre se trouve dans une région circulaire infinitésimale de rayon dr centré sur un autre point r de la distribution. $g(r)$ est relié à $K(r)$ par la relation [90] :

$$g(r) = \frac{1}{2\pi r} \frac{dK(r)}{dr} \quad (3.10)$$

où $dK(r)/dr$ est évalué numériquement à partir de l'évolution de $K(r)$ en fonction de r . Contrairement à $K(r)$ qui discrimine entre les échantillons, $g(r)$ quantifie la probabilité d'occurrence des distances au plus proche voisin. Pour une distribution de Poisson, $g(r)$ prend la valeur unitaire signifiant une même probabilité d'occurrence de la distance aux plus proches

voisins. Dans le tracé de $g(r)$ en fonction de r , un maximum local indique la distance la plus fréquente entre les centres des particules et un minimum local, la distance la moins fréquente.

Par exemple dans la figure 3.17 (a), un pic est très prononcé pour le cas monodisperse ($\eta = 1$). Il indique que la distance proche de 0.008 m entre les centres des particules est très fréquente dans cette distribution. Cette distance est légèrement supérieure aux diamètres des inclusions ($d_{max} = 0.0072$ m). Ce pic se justifie donc par la densité relativement élevée des particules ($\rho^p = 0.5$) dans l'échantillon. Par ailleurs, et pour la même fraction volumique de particule, l'échantillon ayant un étalement de $\eta = 5$ présente un pic plus élevé que celui avec un étalement de $\eta = 3$ mais pour une distance intercentres de particules plus faible. Ce résultat est lié à la distribution des tailles des particules en trois classes isovolumiques. Pour un volume donné, plus l'étalement est grand, plus le diamètre des plus petites particules est faible et plus le nombre nécessaire pour atteindre ce volume augmente.

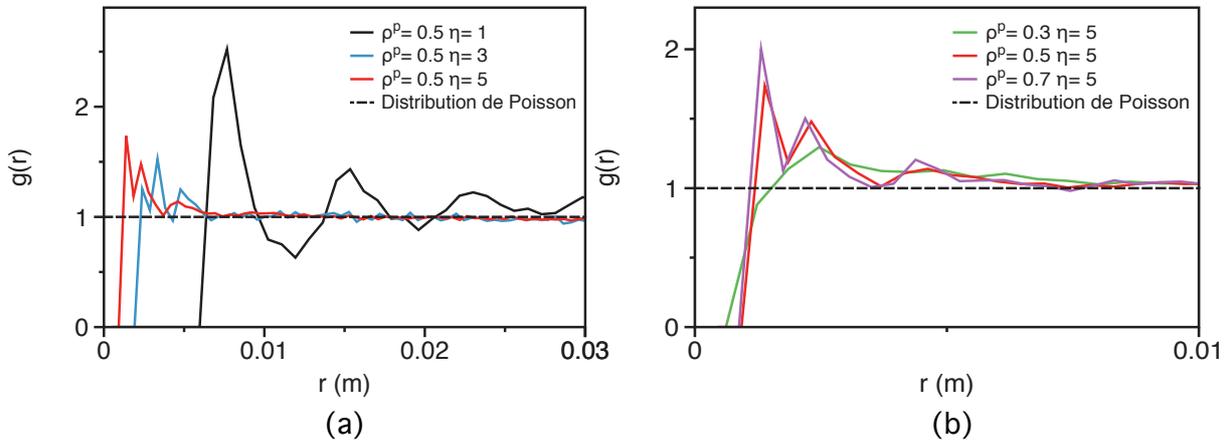


FIGURE 3.17: Fonction de distribution radiale $g(r)$ dans des échantillons numériques. (a) Les échantillons contiennent une fraction volumique de particules constante $\rho^p = 0.5$ et des étalements allant du cas monodisperse $\eta = 1$ à $\eta = 5$. (b) Les échantillons ont différentes fractions volumiques de particules ($\rho^p = 0.3$, $\rho^p = 0.5$ et $\rho^p = 0.7$) et un étalement constant $\eta = 5$. La distribution complètement aléatoire est aussi tracée en ligne pointillée.

La figure 3.17 (b) montre la fonction de distribution radiale $g(r)$ pour des échantillons ayant un étalement fixe de $\eta = 5$ et trois fractions volumiques de particules. $g(r)$ augmente avec ρ^p pour atteindre son maximum pour $\rho^p = 0.7$ et une distance intercentre de particule de $r = 0.0014 = d_{max}/\eta$. Quand la fraction volumique des particules baisse, la valeur du pic de $g(r)$ baisse mais elle est atteinte pour une distance r plus grande. Cette évolution traduit l'augmentation de l'espacement entre les particules et la baisse de leur nombre dans l'échantillon.

Dans la figure 3.17 (a) et (b), la valeur de $g(r)$ converge vers la valeur unitaire correspondant à la distribution poissonnienne, et ce, pour toutes les configurations microstructurales. Dans ces échantillons, la distance interparticulaire dominante correspond à celle du diamètre des plus petites particules. Ceci se traduit par un pic dans la fonction $g(r)$ aux alentours de cette distance et implique l'absence d'agglomérat de particules, même dans les légers regroupement identifiés

avec la fonction $K(r)$ de Ripley.

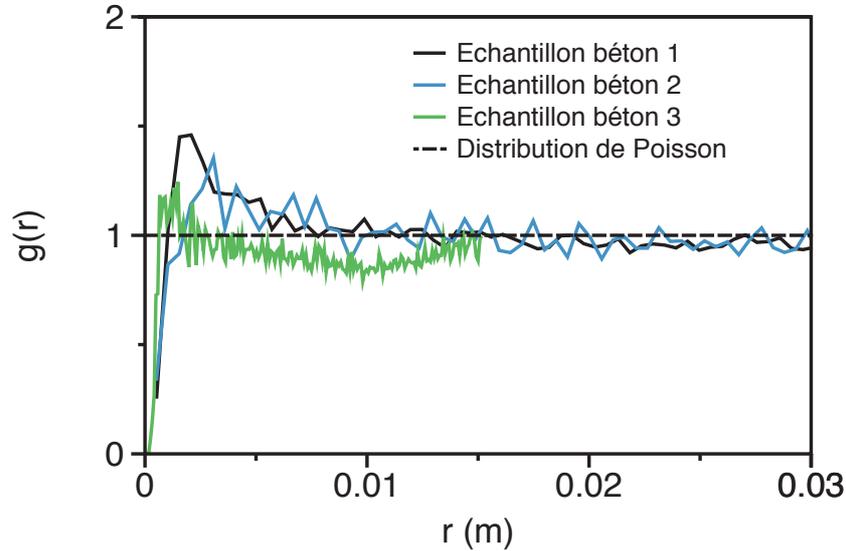


FIGURE 3.18: Fonction de distribution radiale $g(r)$ dans trois échantillons de béton réels issus de structures du génie civil. La distribution complètement aléatoire est aussi tracée en ligne pointillée.

La figure 3.18 montre l'évolution des fonctions $g(r)$ en fonction de la distance r dans trois échantillons issus de structures du génie civil. La fonction converge vers la valeur unitaire correspondant à une distribution uniforme, ce qui indique l'absence d'ordre à grande échelle. Mais on observe un ordre local lié aux exclusions stériques entre les particules.

La figure 3.19 présente une comparaison de l'évolution de la fonction $g(r)$ entre le béton modèle de cette étude et un béton généré numériquement. Les deux tracés présentent un pic aux faibles distances r puis tendent vers la valeur unitaire de référence.

3.4.4 Conclusion sur la représentativité statistique

La comparaison des granulométries montre une bonne représentativité statistique et volumique de la distribution des classes de taille de particules entre les échantillons numériques et réels. La fonction covariance appliquée à la phase granulaire dévoile par ailleurs qu'elle est distribuée de façon homogène dans toutes les directions. D'autre part, les descripteurs géométrique $K(r)$ et $g(r)$ appliqués aux échantillons numériques et réels de béton ont été comparés à la distribution poissonnienne. Il n'y a pas de différence marquante entre les fonctions $K(r)$ des différents échantillons. Elles sont aussi très proches de la fonction d'une distribution totalement aléatoire (légèrement en dessous pour les interactions à grande distance dans les deux types d'échantillons). Toutes les fonctions $g(r)$ convergent vers 1, valeur de la fonction pour une distribution complètement aléatoire. Elles exhibent une fréquence de présence élevée de la distance intercentres correspondant aux diamètres des plus petites particules. Elles sont donc

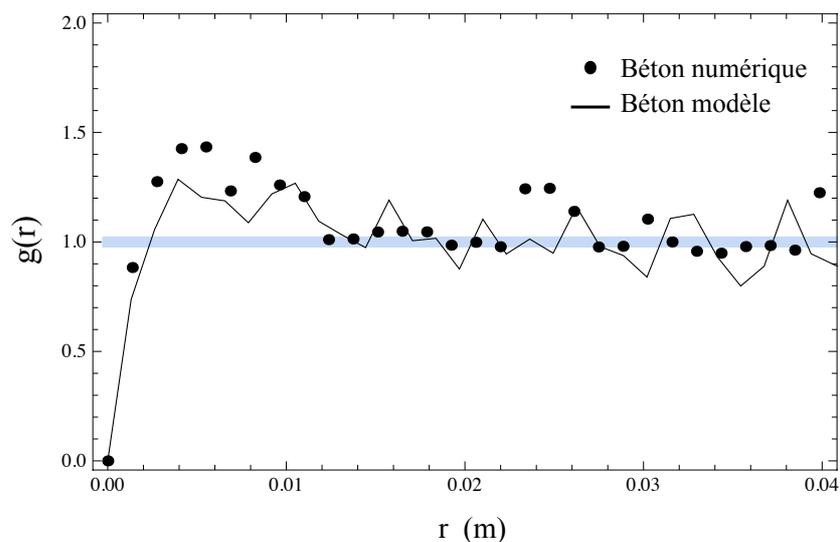


FIGURE 3.19: Comparaison de la fonction de distribution radiale $g(r)$ entre le béton modèle de la figure 3.11 et un béton numérique ayant la même texture granulométrique.

présentes en plus grand nombre dans la microstructure du béton. Chaque fonction $g(r)$ présente également des oscillations d'amplitude décroissantes avant d'atteindre la distribution uniforme.

Les hypothèses formulées dans la méthodologie de génération et de distribution des particules semblent se compenser pour donner des microstructures numériques en accord avec le béton réel. Ces échantillons sont donc considérés comme représentatifs en termes morphologiques et seront utilisés dans la suite de l'étude.

3.5 Influence de la microstructure sur la tortuosité des fissures

3.5.1 Paramètres numériques

Le but de cette section est d'identifier l'influence de la fraction volumique des particules ρ^p et de leur étalement η sur la morphologie des fissures dans une optique d'analyse d'étanchéité dans le béton fissuré. La méthode LEM sera appliquée en deux dimensions pour la simulation d'échantillons numériques ayant une porosité nulle et une adhésion à l'interface particule/matrice faible. Ces deux propriétés, identifiées dans le chapitre précédent, assurent les mécanismes de propagation de fissures et le régime de rupture présent dans le béton. Dans les simulations LEM de cette étude les éléments sont élastiques linéaires fragiles, caractérisés par une raideur notée k et un seuil de rupture critique en force noté f_c .

Les granulats présents dans ce béton sont représentés par des particules circulaires. Leur module de Young est de $E^{[p]} = 60$ GPa et leur énergie de rupture vaut $G^{[p]} = 60$ J/m². De même, le ciment liant les granulats est représenté par une matrice continue de module de Young $E^{[m]} = 15$ GPa et d'énergie de rupture $G^{[m]} = 20$ J/m². Ces données sont issues de la littérature sur les bétons des centrales électronucléaires françaises [39]. Les relations introduites dans le chapitre précédent ont servi à convertir ces données matériaux en paramètres pour les phases particulières et matricielles des échantillons numériques :

$$G^\phi = \frac{1}{2} \frac{\sigma_c^\phi{}^2}{E^\phi}; \quad \sigma_c^\phi = \frac{f_c^\phi}{a^2}; \quad E^\phi = \frac{k^\phi}{a} \quad (3.11)$$

où G^ϕ est l'énergie de rupture de la phase ϕ , σ_c et f_c sont respectivement les seuils de rupture en contrainte et en force du matériau ϕ , E^ϕ est son module de Young et a la taille de ses éléments.

Les éléments situés dans les zones d'interface particule/matrice et particule/particule possèdent les mêmes propriétés élastiques que la matrice ($k^{pp} = k^{pm} = k^m$) mais se différencient par des seuils de rupture deux fois plus faibles ($f_{pp} = f_{pm} = 0.5f_m$). Cette adhésion plus faible aux interfaces traduit une propagation préférentielle des fissures dans ces zones comme cela est souvent noté dans les bétons réels (les fissures passent principalement par les clivages initialement présents entre les granulats en contact et par les interfaces granulats/ciment naturellement plus fragiles appelés zone interfaciale de transition ou ITZ [61]). Ces paramètres donnent une ténacité relative entre l'interface particule/matrice et la particule de $K_c^r = 0.43$ par l'approche du maillon faible (équation 2.32) et de $K_c^r = 0.63$ avec le module de Young du matériau comme module de référence (équation 2.33). Ces deux critères, pour une fraction volumique de vide nulle ($\rho^v = 0$, la matrice remplissant tout l'espace inter-particulaire), sont légèrement au dessus de la limite d'endommagement des particules K_{limite}^r . Ce positionnement confirme la prédiction d'un régime de rupture de déflexion des fissures dans les zones d'interfaces.

Comme détaillé dans la section précédente, cette étude sera limitée dans un premier temps à quatre fractions volumiques de particules et à quatre étalements différents distribués sur trois classes isovolumiques. Pour chacune des configurations, un ensemble de réalisations d'échantillons sous forme de plaques minces carrées est réalisé. Ils ont une épaisseur de $2a$ et contiennent entre 1500 et 4500 particules circulaires et entre 10^5 et 10^6 éléments. Ces échantillons sont soumis à des essais de traction simple : les frontières latérales de l'échantillon sont laissées libres ; la frontière inférieure est bloquée suivant l'axe de sollicitation ; un déplacement vertical est appliqué aux nœuds de la frontière supérieure. Ce type de sollicitation permet de rester dans le cadre de l'étude paramétrique du chapitre précédent et de retrouver les mécanismes de fissuration identifiés.

3.5.2 Comportement sous chargement

Les microstructures choisies présentent un comportement élastique fragile avec un module élastique effectif E_{eff} et un seuil de résistance à la traction effective σ_{eff} bien définis. Le com-

portement typique d'un béton sous traction simple est observé et représenté sur la figure 3.20.

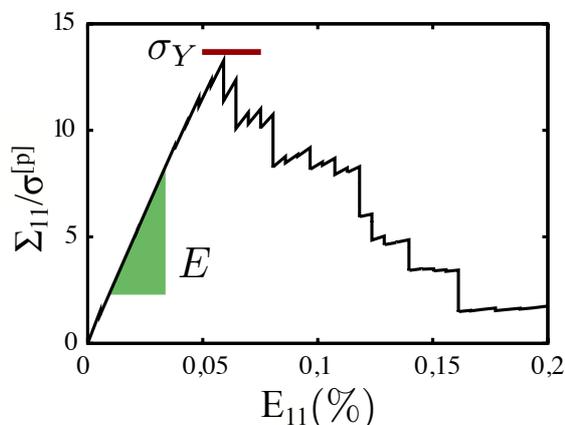


FIGURE 3.20: Evolution de la contrainte effective adimensionnée en fonction de la déformation imposée pendant les simulations LEM.

La déformation à rupture est de moins de 2%. Les interfaces, dont la tenue est limitée en traction, sont le lieu d'une fissuration initialement diffuse telle qu'elle peut apparaître dans les matériaux possédant des défauts issus de la fabrication (pores, micro-fissures, etc.). Ces fissures diffuses croissent rapidement et coalescent pour conduire de façon brutale à une fissure principale responsable de la ruine de l'échantillon.

L'évolution de la contrainte après le pic est alors décrite par une chute importante suivie d'une série de *charges/décharges* représentatives de la propagation de la fissure principale entre les inclusions de plus grosse taille (figure 3.20).

Les simulations sont arrêtées quand la moyenne des contraintes suivant l'axe de sollicitation s'annule (critère de rupture globale).

3.5.3 Calcul de la tortuosité

3.5.3.1 Détection et isolation de la fissure principale

Une première étape dans la caractérisation de la morphologie de la fissure consiste à isoler la fissure principale percolante de la collection des microfissures diffuses. Pour ce faire, un algorithme de percolation a été développé.

Dans la méthode LEM, les éléments unidimensionnels qui forment le réseau sont obtenus à partir des arêtes d'un maillage en tétraèdres. Un tétraèdre est considéré comme rompu quand la fissure, matérialisée par des éléments rompus, passe par deux de ses faces. Un algorithme permet de repérer puis de marquer tous les tétraèdres rompus formant un même réseau continu à partir des éléments qui les composent et des faces impliquées. La plus grande fissure percolante est alors le plus grand ensemble de tétraèdres portant le même marqueur. La figure 3.21 illustre

l'ensemble des fissures obtenues dans un échantillon après sollicitation, avec en bleu la fissure principale isolée. C'est cette fissure qui sera considérée pour le calcul de la tortuosité.

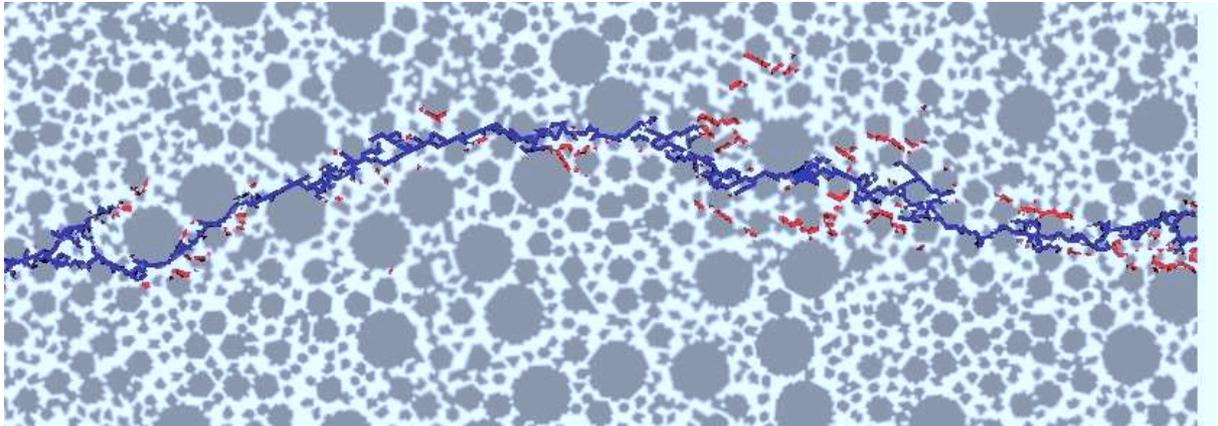


FIGURE 3.21: En couleurs, l'ensemble des fissures obtenues après sollicitation. En bleu, la fissure principale isolée.

3.5.3.2 Analyse d'image

Devant la faible épaisseur des échantillons, les fissures sont considérées comme bidimensionnelles (présence de maximum deux tétraèdres dans l'épaisseur de la fissure) et la tortuosité est alors définie comme le rapport entre la longueur de la fissure et la longueur de sa projetée sur la section de l'échantillon dans la direction parallèle au sens de propagation de la fissure. Une telle caractérisation est numériquement accessible par analyse d'image et une première étape est alors de convertir la fissure en une image binaire pixelisée.

Une grille à mailles carrées, correspondant aux pixels d'une image, est superposée à l'échantillon et un algorithme d'identification est appliqué. Chaque pixel fait $a/10$ de côté et est codé en noir ou en blanc selon s'il fait parti de la fissure principale ou du reste de l'échantillon. Un algorithme de squelettisation est appliqué à l'image ainsi obtenue pour réduire la fissure en un ensemble de courbes centrées dans la structure d'origine. La squelettisation est un outil d'analyse de forme non scalaire, qui conserve les propriétés topologiques et les propriétés géométriques de la forme initiale.

Chaque pixel du squelette est identifié, en fonction de ces huit voisins, comme faisant partie d'une branche de la fissure, d'une jonction entre plusieurs branches ou d'une extrémité. Un algorithme, basé sur l'algorithme de *Floyd – Warshal* [17], est par la suite appliqué au squelette caractérisé pour identifier les plus courts chemins entre deux pixels identifiés comme extrémités. La longueur de la fissure est obtenue comme la plus grande longueur des plus courts chemins percolants. Cette procédure permet d'écarter tous les branchements secondaires et de réduire la mesure à une ligne percollante. La tortuosité est obtenue en divisant cette longueur par sa projetée.

Les traitements présentés ici sont développés et appliqués avec le logiciel libre ImageJ [2] et illustrés sur la figure 3.22.

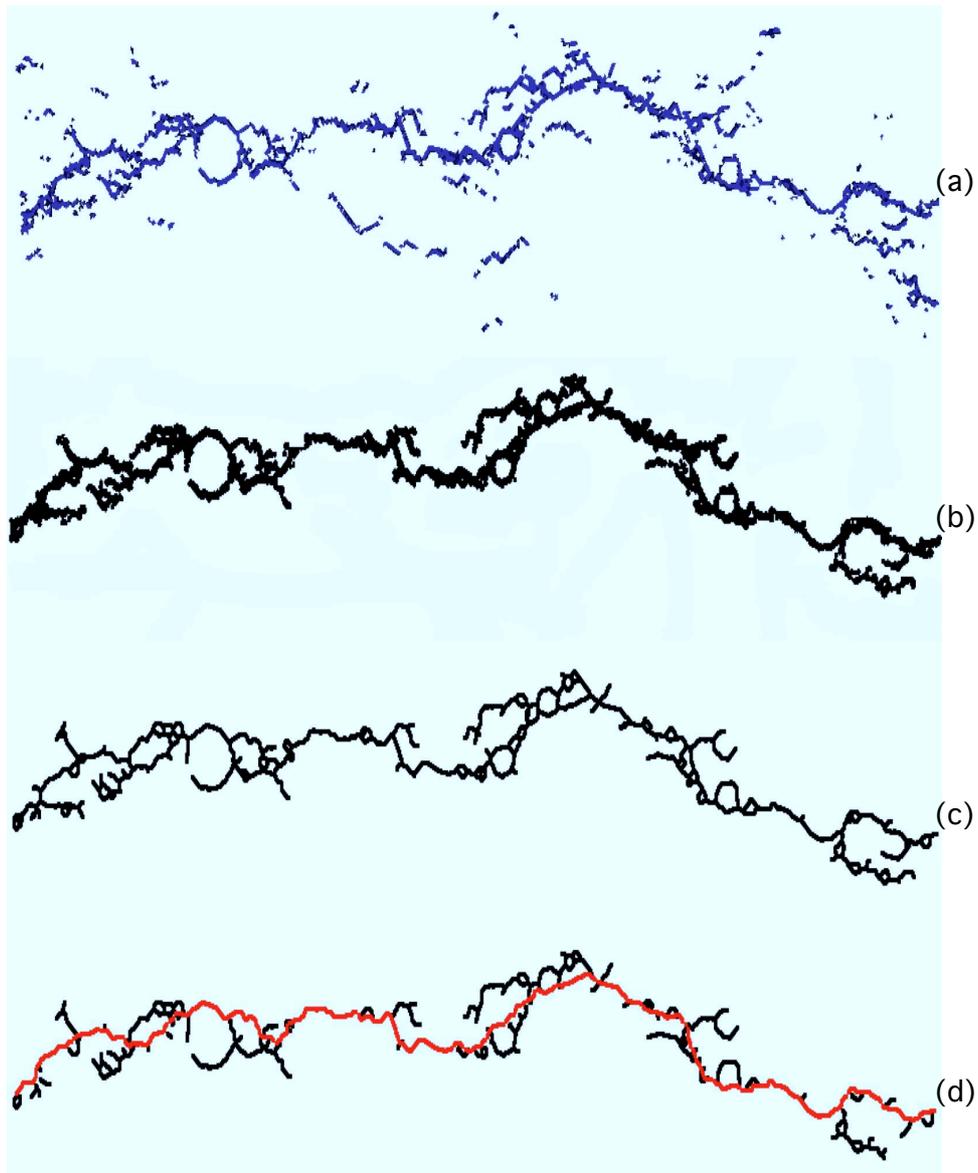


FIGURE 3.22: Traitements pour le calcul de la tortuosité. (a) L'ensemble des fissures et des microfissures obtenues après sollicitation et modélisé par des tétraèdres. (b) Fissure principale isolée et pixelisée. (c) Squelette de la fissure principale. (d) La plus grande longueur des plus courts chemins (en rouge), la tortuosité est calculée en mesurant cette longueur et en la divisant par sa projetée.

3.5.4 Observations préliminaires

La figure 3.23 montre les résultats de l'évolution de la tortuosité en fonction de l'étalement pour trois valeurs de fraction volumique de particule ρ^p . Chaque point de la courbe correspond à la moyenne des mesures de tortuosité d'un ensemble de réalisations ayant les mêmes propriétés microstructurales, la barre verticale étant l'écart type sur ces mesures. Un premier résultat marquant est la valeur de la tortuosité obtenue par ces simulations, qui varie autour de 1.3. Cette valeur concorde avec les mesures expérimentales sur ce type de matériaux [73, 111, 32]. Pour une valeur fixe de fraction volumique de particules, la tortuosité augmente avec l'étalement, et inversement, pour une même valeur d'étalement, la tortuosité baisse avec l'augmentation de la fraction volumique. L'observation des fissures permet de mieux comprendre les mécanismes qui régissent l'évolution de leur morphologie. La figure 3.24 représente une visualisation d'une simulation après rupture d'un cas limite dans l'espace paramétrique, celui avec une fraction volumique de 0.7 et un étalement de 3. Il apparaît clair que les grandes particules donnent ici les directions principales de la fissure (en noir) et entre deux particules de grande taille, la fissure contourne l'ensemble des moyennes et petites particules de la façon la moins coûteuse énergétiquement ; ce phénomène de contournement donnerait lieu à une augmentation de la tortuosité lorsque l'étalement augmente.

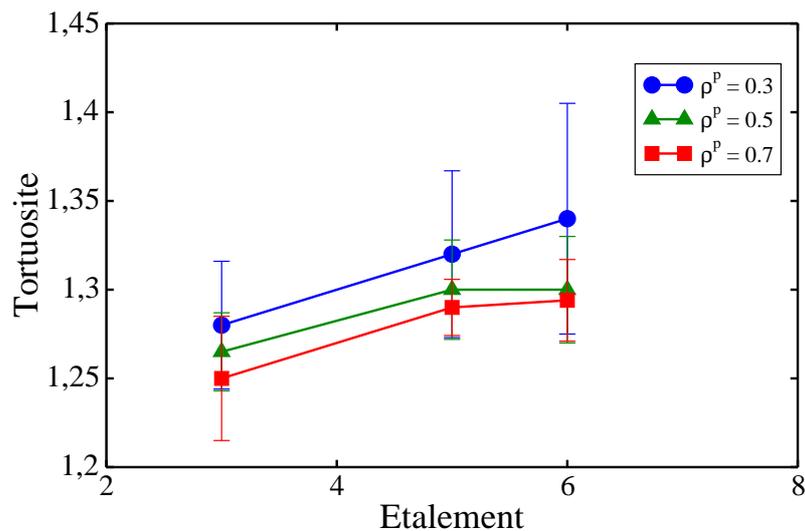


FIGURE 3.23: Evolution de la tortuosité en fonction de l'étalement pour trois valeurs de fractions volumiques de particules différentes.

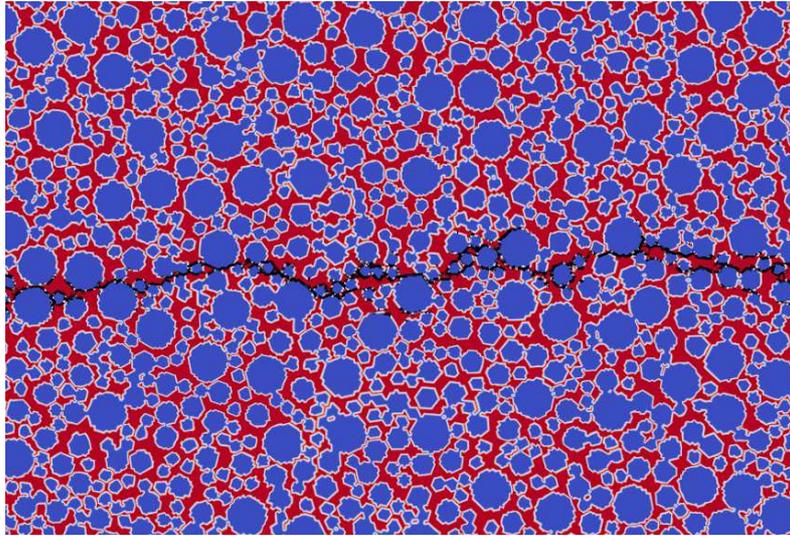


FIGURE 3.24: Illustration d'un échantillon après rupture avec un étalement $\eta = 3$ et une fraction volumique de particule de $\rho^p = 0.7$. Les particules sont représentées en bleu, la matrice en rouge, les interfaces en blanc et la fissure en noir.

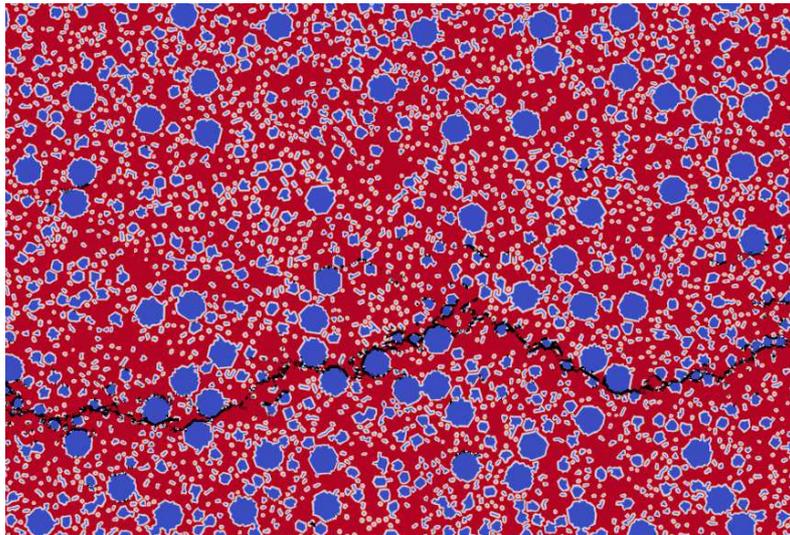


FIGURE 3.25: Illustration d'un échantillon après rupture avec un étalement $\eta = 6$ et une fraction volumique de particule de $\rho^p = 0.3$. Les particules sont représentées en bleu, la matrice en rouge, les interfaces en blanc et la fissure en noir.

La figure 3.25 représente un autre cas limite, avec une fraction volumique de 0.3 et un étalement de 6 en utilisant le même code de couleurs. Les grandes particules donnent ici aussi les directions principales de la fissure, à la différence que dans cette configuration la fissure traverse un chemin plus long pour les rejoindre du fait de leur faible fraction volumique, ce qui expliquerait l'augmentation de la tortuosité avec la baisse du volume des particules dans

l'échantillon.

Malgré des tendances claires sur les moyennes des mesures, la largeur de l'écart type sur l'ensemble des réalisations pour une configuration donnée reste à clarifier à ce stade de l'étude.

3.5.5 Prise en compte de l'ordre local

En étudiant un grand nombre d'échantillons après rupture, il est clair que la propagation de la fissure dépend très fortement de l'ordre local. La figure 3.26 illustre ce phénomène. Dans cet échantillon, la fissure se propageant de gauche à droite, est face à une configuration particulière, repérée par un cadre : elle se scinde en deux pour arriver d'un côté sur une bande de matrice et de l'autre sur un agglomérat compact de particules qu'elle finira par contourner. Ce deuxième chemin est donc moins coûteux énergétiquement mais augmente considérablement la tortuosité.

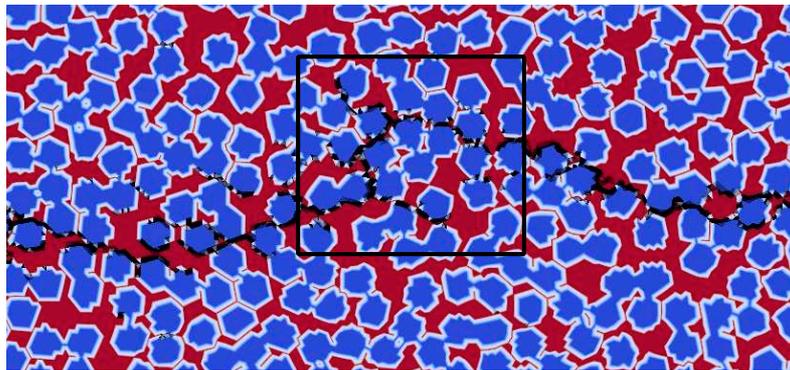


FIGURE 3.26: Illustration de la dépendance de la tortuosité à la configuration locale.

Ce type de comportement, fortement dépendant de la configuration locale, pourrait expliquer l'écart sur les mesures de tortuosité d'un échantillon à un autre ayant la même compacité et la même distribution granulométrique.

Afin d'explorer cette hypothèse, la notion de *configuration locale* a été introduite en calculant la tortuosité non plus sur la fissure de chaque échantillon séparément, mais sur des sous-domaines (fenêtres carrées de côté l) obtenus à partir des fissures de tous les échantillons ayant les mêmes propriétés, les considérant comme un seul et unique échantillon. La figure 3.27 illustre cette *superfissure* et montre des fenêtres dans lesquelles la tortuosité sera mesurée. Ces fenêtres sont tirées aléatoirement de façon à être toujours centrées sur la fissure. Leur nombre est une fonction du rapport entre la longueur projetée de la *superfissure* et la longueur de la fenêtre.

Ces fenêtres élémentaires de mesures doivent contenir suffisamment d'information pour être représentatives de tous les mécanismes locaux qui interviennent dans la fissuration. Elles s'apparentent alors à un volume élémentaire représentatif (VER) dont la taille est un paramètre déterminant.

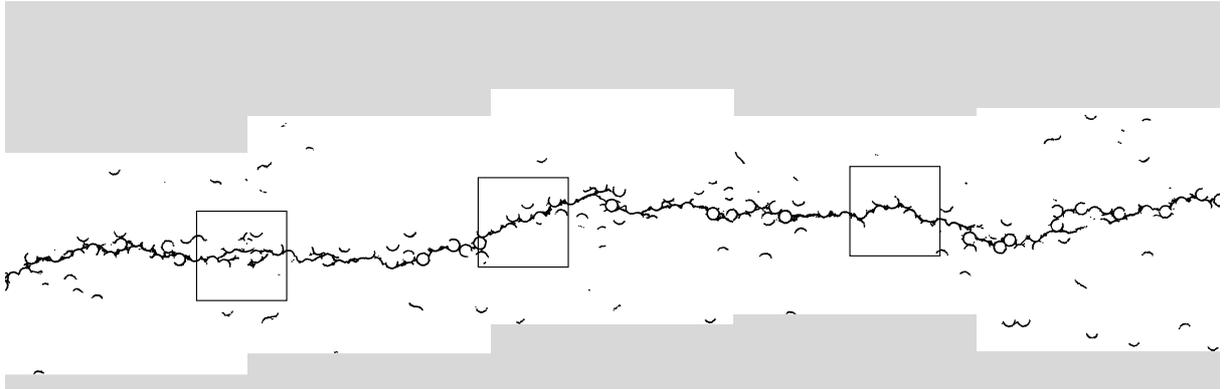


FIGURE 3.27: Construction d'un macro échantillon unitaire à partir des échantillons unitaires obtenus par LEM. Tirage aléatoire de VER carrés de côté l dans ce macro échantillon.

3.5.5.1 Rappels sur les volumes élémentaires représentatifs (VER) [84]

Il existe différentes définitions du VER appliqué à la mécanique des matériaux hétérogènes.

Le VER peut être considéré comme un volume suffisamment grand pour contenir un échantillon de chaque hétérogénéité de façon à être statistiquement représentatif du matériau [60]. Cette définition se base sur la connaissance statistique de la nature de la microstructure pour caractériser la réponse macroscopique du milieu hétérogène.

Une deuxième définition se base sur les propriétés statistiques. Le VER doit contenir une précision donnée des propriétés globales estimées par une moyenne spatiale des contraintes, de la déformation ou des champs d'énergie [60]. Cette définition comprend la dépendance de la taille du VER au comportement mécanique considéré. Il a été montré, par exemple, que la taille du VER augmente avec la non linéarité du comportement considéré [50] et du degré de localité de la propriété étudiée : déterminer une quantité locale (second moment d'un champ de contrainte ou de déformation) avec précision demande un VER plus grand que pour une quantité globale (valeur moyenne de la contrainte ou de la déformation).

Dans une autre définition, donné par Drugan and Willis [25], le VER est présenté comme étant "le plus petit volume élémentaire matériel du composite pour lequel la représentation de la constante spatiale macroscopique constitutive (le module global) est suffisamment présente pour représenter la réponse constitutive moyenne". Cette approche nécessite une homogénéisation du composite et ne considère pas les fluctuations statistiques des propriétés effectives.

Les VER ont été définis dans différentes études et pour diverses applications. La synthèse de Pelissou et al [84] montre que :

- le VER doit contenir suffisamment d'informations sur la microstructure [42] ;
- le VER doit être suffisamment petit par rapport aux dimensions de la macrostructure [143] et suffisamment grand par rapport à la taille de la microstructure [25] ;
- le VER doit inclure un grand nombre d'hétérogénéités (inclusions, vides, particules...)

[48];

- Les propriétés statistiques homogènes et ergodique assurent que le VER est statistiquement représentatif de la réponse macroscopique [82];
- la réponse du VER doit être indépendante du type de conditions aux limites [82, 104];
- la taille d'un VER est donnée pour une propriété effective donnée [60, 37] et pour une fraction volumique de micro-hétérogénéités [109].

Traditionnellement, la taille des VER est définie comme étant la taille minimale d'une cellule microstructurale qui répond à l'exigence de l'homogénéité statistique. Cette définition donne la borne inférieure : les grandes cellules microstructurales, contrairement aux petites, ont ce type de comportement. Ostoja-Starzewski [82] a noté que le VER est parfaitement défini dans deux cas : le cas d'une cellule élémentaire dans une structure périodique et le cas où le volume contient une très grande (mathématiquement infini) série d'hétérogénéités à l'échelle microstructurale possédants des propriétés homogènes et ergodiques.

3.5.5.2 Taille du VER

Ces travaux s'appuient sur ceux de Pelissou et al [84] et dont les résultats principaux sont rappelés ici .

Sur un volume donné V , le nombre de réalisations nécessaires N pour atteindre une précision ε_{rel} sur la moyenne d'ensemble M d'une propriété Z (de variance $D_Z^2(V)$ et de variance ponctuelle D_Z^2) peut être estimé par :

$$N = \frac{4 D_Z^2(V)}{\varepsilon_{rel}^2 M^2} = \frac{4}{\varepsilon_{rel}^2 M^2} D_Z^2 \left(\frac{\mathcal{A}}{V} \right)^\alpha \quad (3.12)$$

où \mathcal{A} est la portée intégrale associée à la propriété Z .

Lorsque le nombre de réalisations N est relativement petit, la moyenne M et la variance D_Z^2 ne sont pas stabilisées. Elles peuvent alors être considérées comme des variables aléatoires qui peuvent prendre des valeurs dans des intervalles de type $[M_{min}; M_{max}]$ et $[D_{Z,min}^2(V); D_{Z,max}^2(V)]$.

Pour la moyenne, un intervalle de confiance à 95% peut être choisi en supposant que M suit une loi de Student à $N - 1$ paramètres.

Pour la variance, une méthode de Bootstrap permet de préciser l'intervalle $[D_{Z,min}^2(V); D_{Z,max}^2(V)]$ ainsi qu'un estimateur de la variance. La borne inférieure $D_{Z,min}^2(V)$ correspond à une approche "optimiste", l'indicateur à une approche "moyenne" et la borne supérieure $D_{Z,max}^2(V)$ à une approche "pessimiste" (la plus contraignante).

La propagation de ces incertitudes conduit à une plage d'incertitudes pour l'erreur relative $[\varepsilon_{rel,min}; \varepsilon_{rel,max}]$.

Pré-estimation de la fraction volumique ρ^p conduisant aux VER de plus grande taille

A partir de maintenant, la variable d'intérêt Z est la tortuosité τ . La figure 3.28 montre pour différents étalements que la variance D_τ^2 n'est pas constante avec la fraction volumique ρ^p . Elle atteint un maximum pour $\rho^p \simeq 0.4 - 0.5$. Une fraction volumique de $\rho^p = 50\%$ est retenue pour faire l'analyse de VER.

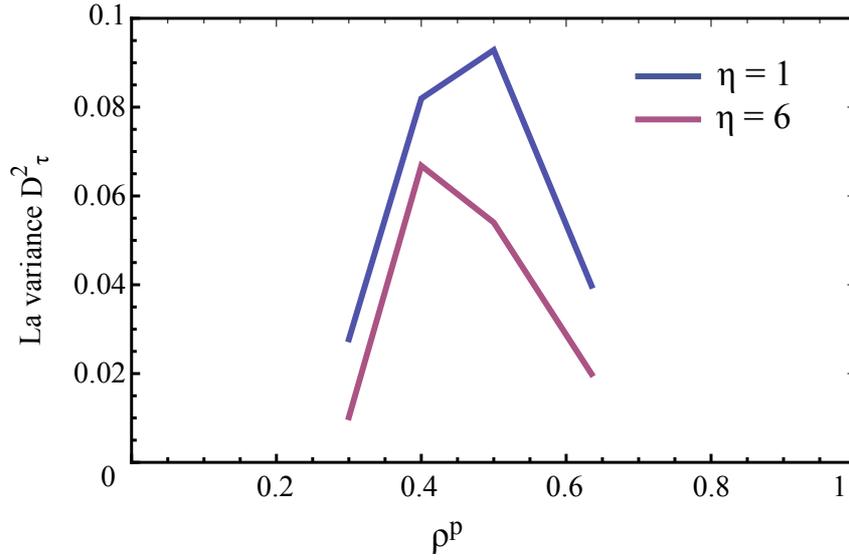


FIGURE 3.28: Evolution de la variance D_τ^2 en fonction de la fraction volumique, pour deux étalements ($\eta = 1$ en bleu, $\eta = 6$ en rouge) et pour une taille de VER fixée à $a/(d_{max}) = 10$

Estimation de la taille de VER par l'approche "pessimiste"

Pour une taille de VER fixée (ici $a/(d_{max}) = 10$), la figure 3.29 montre par exemple que l'approche "pessimiste" permet d'assurer avec une confiance de 95% qu'une erreur relative de 4% (à plus ou moins 2.5% près) est obtenue pour plus de $N = 120$ réalisations.

Lorsque les paramètres microstructuraux ρ^p et η sont fixés (ici $\rho^p = 0.5$, $\eta = 1$), on peut reconduire cette estimation pessimiste du nombre de réalisations pour différentes tailles de VER, ce qui est fait sur la figure 3.30. Cette analyse permet d'identifier les paramètres de la relation (3.12) réécrite sous la forme (dans le cas des VER carrés de côté l correspondants aux fenêtres de mesure)

$$N = K_\tau \left(\frac{A_\tau}{l} \right) \quad (3.13)$$

où K_τ est une constante, A_τ est la portée intégrale associée à la tortuosité et où il a été supposé à la suite de [70] que $\alpha = 1$ (la tortuosité est une quantité géométrique).

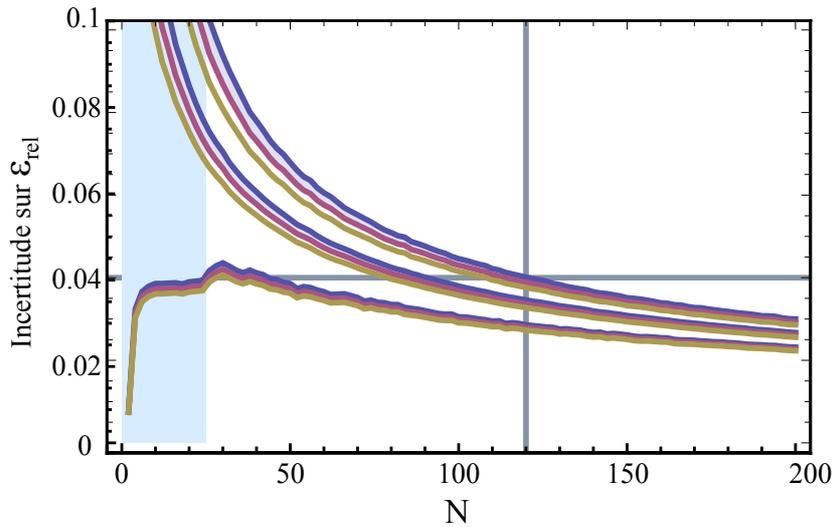


FIGURE 3.29: Courbes d'incertitudes pour l'erreur relative ε_{rel} de la tortuosité (approche bootstrap) en fonction du nombre de réalisations N , pour $\rho^p = 0.5$, $\eta = 1$ et une taille de VER fixée à $a/(d_{max}) = 10$. Une triplet de courbe correspond à une incertitude sur la moyenne M et chaque triplet de courbes correspond à l'incertitude sur la variance (approche "pessimiste" en haut, "moyenne" au milieu, "optimiste" en bas). Nombre de réalisation de l'approche bootstrap : 5000. Erreur tolérée sur la variance : 2.5%. La zone grisée indique le nombre de réalisations en dessous duquel l'approche "optimiste" ne peut donner des résultats pertinents.

L'identification de cette portée intégrale de la tortuosité peut être reconduite pour différentes fractions volumiques ρ^p et différents étalements η , ce qui est fait sur la figure 3.31 (le facteur K_τ reste voisin de $K_\tau \simeq 22$ pour tous les paramètres microstructuraux considérés). Cette figure indique que la portée intégrale de la tortuosité : 1) croît avec la fraction volumique jusqu'à environ $\rho^p = 0.5$ puis au-delà, 2) décroît avec l'étalement. Ce dernier résultat est attendu : lorsque la portée intégrale est atteinte pour la classe d'inclusions de la plus grande taille, elle l'est aussi de fait pour les classes de taille inférieure. En se plaçant donc dans le cas le plus pénalisant (inclusions monodisperses de fraction volumique 50%) de l'approche pessimiste, on obtient :

$$N \simeq 950 \left(\frac{1}{l/d_{max}} \right) \quad (3.14)$$

3.5.5.3 Evolution de la tortuosité avec les paramètres microstructuraux

Identification d'un modèle reliant la tortuosité à la fraction volumique d'inclusions et à leur étalement granulométrique

Le choix (3.14) est retenu pour la suite garantissant avec une certitude de 95% que tous

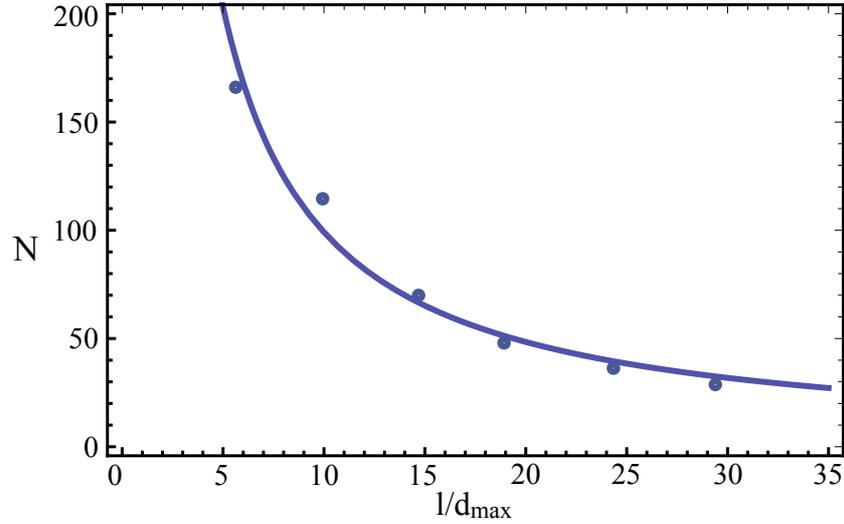


FIGURE 3.30: Nombre de réalisations N en fonction de la taille du VER $l/(d_{max})$ pour l'approche pessimiste avec une erreur relative de 4% et un intervalle de confiance de 95% ($\rho^p = 0.5$, $\eta = 1$). Points : résultats issus de l'analyse statistique des données numériques. Trait : identification de la formule (3.13) avec : $K_\tau \simeq 22$ et $\mathcal{A}_\tau/(d_{max}) \simeq 43$.

les résultats numériques présentés donnent une erreur relative de moins de 4%.

Le résultat théorique principal de Stroeven [119] en 2D est le suivant :

$$\tau = 1 + \left(\frac{\pi^2}{8} - 1 \right) \rho^p \quad (3.15)$$

Ce résultat, établi dans le cas des fissures macroscopiquement planes ("droites" en 2D), indique que :

1. la polydispersité ne joue aucun rôle sur la tortuosité,
2. la tortuosité augmente de manière affine avec la fraction volumique d'inclusions.

Ces deux résultats -rigoureusement justes dans du point de vue géométrique- doivent être remis en question pour les cas concrets de fissuration. Deux raisons principales à cela : 1) dans le cas des fissures quasi-statiques, les inclusions n'ont pas pour seul rôle de modifier la rugosité de la fissure mais aussi de l'orienter : le cas des fissures non planes est plus réaliste dans ce cas comme le montre les simulations de figure 3.32 ; 2) lorsque la fraction volumique augmente au-delà de 50%, la compacité de l'empilement inclusionnaire conduit à rompre partiellement les inclusions, ce qui correspond à un coût énergétique plus faible pour la fissure que de toute les contourner. A la limite, lorsque $\rho^p \rightarrow 1$, seule la phase d'inclusions étant présente, la fissure devrait se propager rectilignement en mode I, ce qui donnerait une tortuosité $\tau = 1$.

Nos résultats indiquent qu'une approximation affine de type (3.15) symétrisée autour d'une valeur médiane ρ_m^p de la fraction volumique est convenable (figure 3.33). L'estimation suivante semble convenir pour représenter nos résultats :

$$\tau \simeq 1 + (1.7e^{-\sqrt{\eta-1}/4})\rho^p \quad \text{symétrisé à } \rho_m^p \simeq 0.42 \quad (3.16)$$

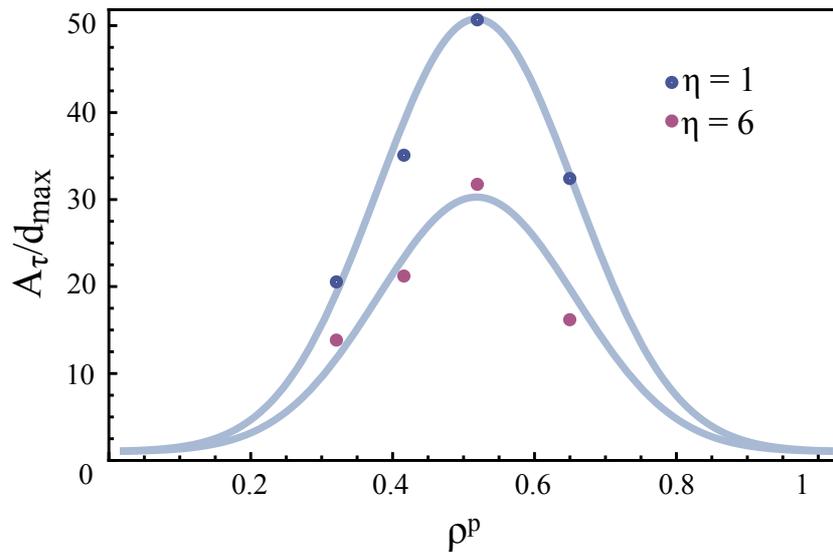


FIGURE 3.31: Portée intégrale $A_\tau/(d_{max})$ en fonction de la fraction volumique ρ^p pour deux états : $\eta = 1$ (en haut) et $\eta = 6$ (en bas). Points : résultats numériques. Traits : fit par des lois normales.

Validation du modèle

Les prédictions de tortuosité du modèle exprimé dans l'équation ((3.16)) sont comparées sur la figure 3.34 à : (i) l'ensemble des données numériques obtenues, (ii) des données numériques obtenues dans la même configuration géométrique par d'autres auteurs avec une méthode de type éléments finis et critère de mécanique de la rupture [73], (iii) des données expérimentales obtenues sur des microstructures similaires issues de domaines variés (composites à matrice organique du domaine des prothèses dentaires [111], stratifiés à matrice époxy et à fibres de verre longues [32, 29], composites à matrice élastomérique et à nanotubes de carbone [8]).

La bonne concordance des résultats (erreur moins de 3%) incite à penser que la portée du modèle exprimé dans l'équation ((3.16)) est assez générale concernant la tortuosité des milieux plans à inclusions polydisperses possédant une interface matrice/inclusions faible et une bonne résistance des inclusions.

3.6 Conclusion

L'étanchéité des matériaux granulaires cimentés dépend fortement de la morphologie du réseau de fissures qu'ils contiennent. Dans le chapitre précédent, les différents mécanismes qui régissent la naissance et la propagation des fissures ont été identifiés et corrélés à la microstructure de ces matériaux.

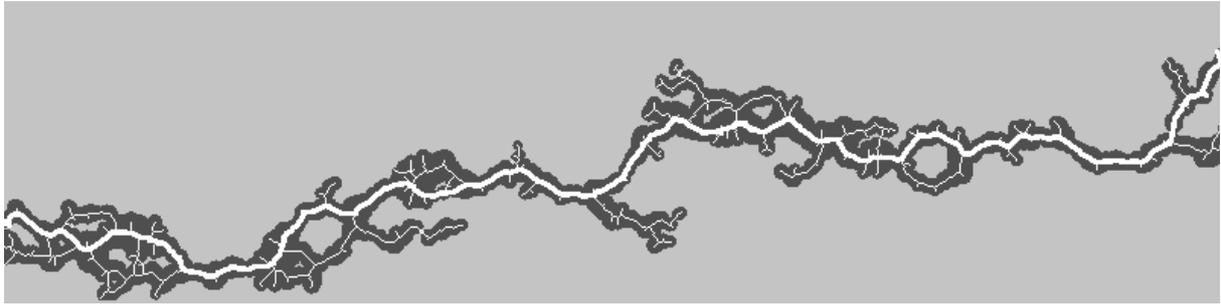


FIGURE 3.32: Fissure percolante et plus court trajet. En gris foncé : visualisation des éléments LEM rompus. En traits blancs fins : squelettisation. En traits blancs épais : plus court des plus longs chemins, assimilé à la fissure percolante d'intérêt pour les problèmes de transport.

numéro	référence	ρ^p	η	τ
1	[8]	10%	$\simeq 4$	1.05
2	[111]	50%	$\simeq 8$	1.19
3	[29]	63%	$\simeq 1.1$	1.20
4	[73]	46%	$\simeq 3$	1.23
5	[32]	61%	1	1.24
6	[29]	48%	$\simeq 1.1$	1.30

TABLE 3.1: Données relatives aux références utilisées dans la figure 3.34. Les numéros correspondent aux inserts de la figure 3.34.

Le béton, support d'étude dans cette thèse, se caractérise par une fraction volumique élevée de la phase cimentaire et une adhésion aux interfaces faible. Ces spécificités donnent lieu à une fissuration qui privilégie le passage des fissures à travers ces zones de faiblesse par contournement des granulats. On comprend alors l'influence majeure de la phase granulaire sur la morphologie des réseaux de fissure.

Dans la continuité des études précédentes, le but de ce chapitre a alors été d'établir une corrélation entre la texture granulaire du béton et la morphologie des fissures qui peuvent y apparaître. Une approche par simulation numérique a été adoptée.

Dans une première section, un ensemble d'outils numériques permettant d'identifier les phases du matériau et leur organisation spatiale a été détaillé et des données quantitatives sur les hétérogénéités microstructurale du béton ont été établies. Par la suite, une méthodologie de mise en place et de génération d'échantillons numériques a été présentée. Elle a permis de reproduire des microstructures fidèles au béton réel tout en imposant les variations nécessaires aux analyses statistiques de notre étude. La représentativité des échantillons numériques générés a été validée dans une troisième section à l'aide de descripteurs morphologiques et géométriques de leur texture.

Des bétons numériques bidimensionnels ont été soumis à un chargement jusqu'à fissuration en utilisant l'approche LEM (Lattice element model). Un protocole de calcul de la tortuosité des

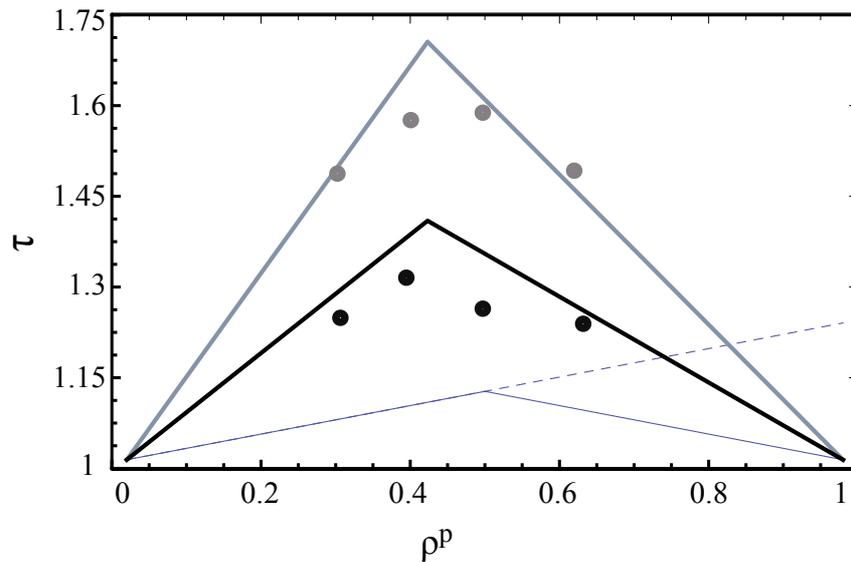


FIGURE 3.33: Evolution de la tortuosité τ avec la fraction volumique ρ^p . Points : résultats numériques. Traits pointillés : résultat théorique 2D pour les fissures planes de [119] (équation (3.15)). Traits continus et fins : équation (3.15) symétrisée autour de $\rho_m^p = 0.5$. Traits continus épais : facteur multiplicatif pour l'approche symétrisée dans le cas des fissures non planes. En gris : comparaison modèle/simulations pour $\eta = 1$. En noir : comparaison modèle/simulations pour $\eta = 6$.

fissures a été présenté. L'influence de la fraction volumique des particules et de la dispersion de leurs diamètres sur la tortuosité des fissures a été analysée dans des volumes élémentaires représentatifs et un modèle a été établi.

Les résultats principaux de ce chapitre sont donc :

- les outils et les méthodologies d'analyse et de modélisation mis en place sont suffisamment génériques pour permettre la prise en compte de la complexité microstructurale des matériaux granulaires cimentés. Ainsi, ils permettent de caractériser quantitativement les phases d'une microstructure à partir d'images d'un matériau réel, de reproduire des échantillons numériques fidèles aux matériaux d'origines, de vérifier leurs représentativité et de caractériser la morphologie des réseaux de fissures qui y apparaissent,
- l'établissement d'une corrélation directe entre la microstructure d'un béton et la morphologie de ses fissures : leur tortuosité est modélisée, avec une erreur inférieure à 3%, comme une fonction de la fraction volumique des granulats et de la dispersion de leurs diamètres.

Dans la suite du mémoire, la perméabilité apparente des bétons numériques fissurés sera estimée dans le but d'établir une corrélation microstructure-tortuosité-perméabilité.

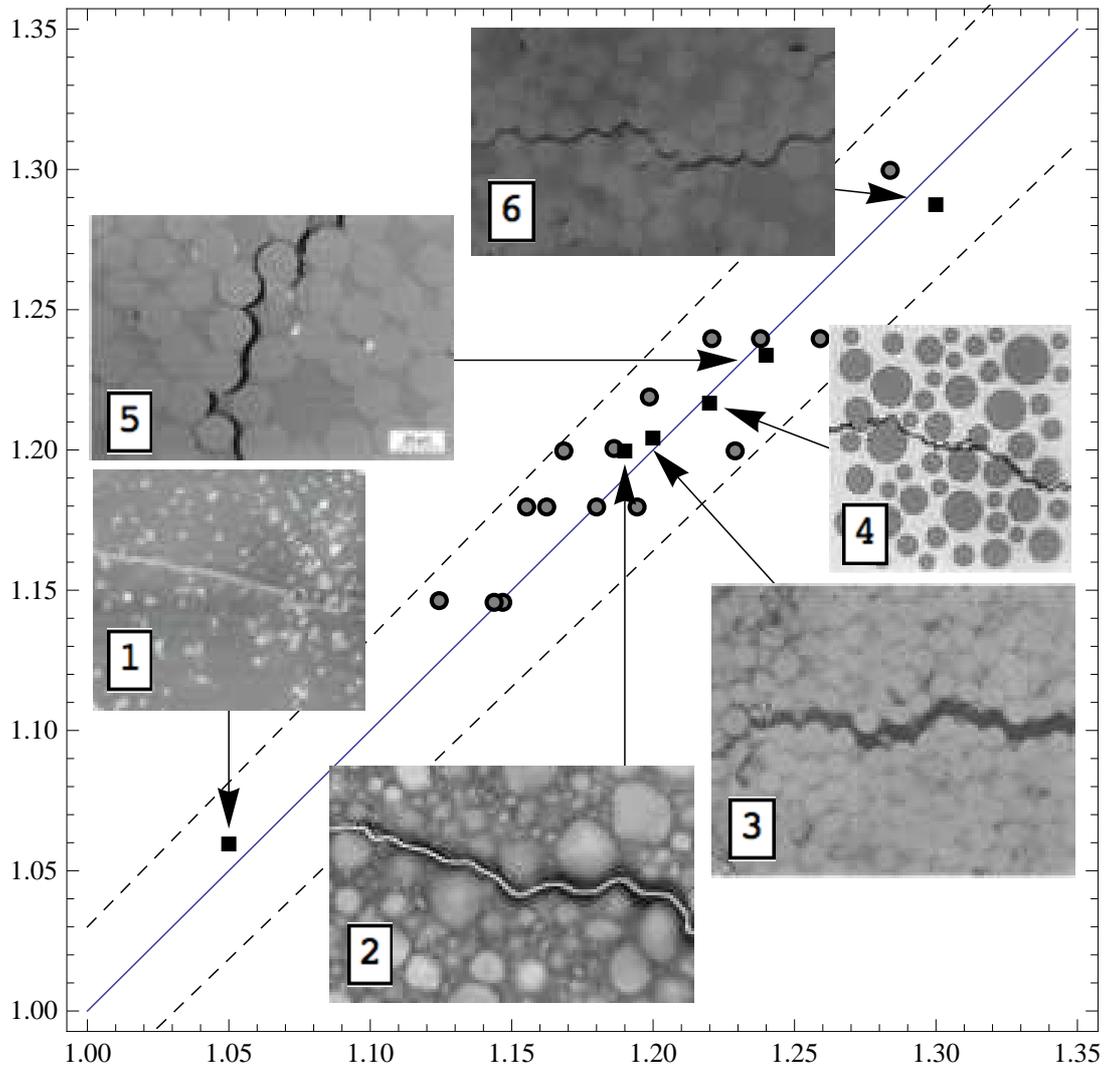


FIGURE 3.34: Tortuosité prédite par le modèle (3.16) vs tortuosité effective. Trait : ligne d'égalité ; pointillés : domaine d'erreur à $\pm 3\%$. Points gris : simulations numérique de la présente étude. Carrés noirs : données issues de la littérature (1 - d'après [8] ; 2 - d'après [111] ; 3 et 6 - d'après [29] ; 4 - d'après [73] ; 5 - d'après [32], (tableau 3.1)

Estimation de la relation perméabilité-microstructure

Sommaire

4.1	Introduction	114
4.2	La méthode Lattice Boltzmann	114
4.2.1	Cadre et principes de la méthode LBM	115
4.2.2	Conditions aux limites	117
4.3	Perméabilité : loi de Darcy	117
4.4	Influence de la microstructure sur la perméabilité	118
4.4.1	Construction des échantillons numériques	118
4.4.2	Paramètres et méthodologie	119
4.4.3	Calcul de la perméabilité	121
4.4.4	Relation entre la perméabilité et la tortuosité des fissures	121
4.4.5	Relation entre la texture granulaire et la perméabilité	124
4.5	Conclusion	125

4.1 Introduction

La perméabilité est communément utilisée pour évaluer la durabilité des structures en béton, particulièrement quand elles sont exposées à des ambiances nocives. S'il commence aujourd'hui à exister certaines techniques micromécaniques permettant de relier la perméabilité apparente d'un milieu à la densité de fissures qu'il contient et à leur tortuosité (voir par exemple [23]), peu de méthodes quantifient précisément cette perméabilité à la microstructure sous-jacente du milieu.

Dans le chapitre précédant, une relation entre la composition microstructurale d'un matériau granulaire cimenté, assimilé à un béton, et la tortuosité du réseau de fissures qui peut y apparaître, a été établie. Cette étude est poursuivie dans ce chapitre en estimant la perméabilité de ces mêmes échantillons. L'objectif est d'établir une relation entre la perméabilité et la tortuosité d'un réseau de fissures, puis de mettre en place une corrélation entre sa perméabilité et des paramètres microstructuraux tels que la fraction volumique des particules ρ^p ou encore leur étalement granulométrique η .

Des écoulements de fluide dans les échantillons fissurés sont simulés numériquement par la méthode Lattice Boltzmann Model (LBM) pour le calcul de la perméabilité. Cette méthode ainsi que son couplage avec la méthode LEM sont aussi présentés dans ce chapitre.

4.2 La méthode Lattice Boltzmann

La méthode Lattice Boltzmann est une approche simple et efficace pour les simulations numériques des écoulements de fluide [112, 113, 120, 38]. Elle a été proposée pour la première fois dans les années 1980 et est basée sur les modèles de gaz sur réseau (Lattice Gas Model) [101]. L'idée de cette approche consiste à discrétiser l'équation de Boltzmann sur un réseau régulier en approximant le terme de collision par une fonction comportant un temps de relaxation :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = -\frac{1}{\Gamma}(f - f_e) \quad (4.1)$$

où $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ est la fonction de répartition à une particule définie de telle sorte que $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{x}d\mathbf{v}$ est le nombre moyen de particules qui, à l'instant t , se trouvent dans un volume $d\mathbf{x}$ autour du point \mathbf{x} et possèdent la vitesse \mathbf{v} à $d\mathbf{v}$ près. t est le temps, \mathbf{F} est une force extérieure telle que la force de gravité $mg\hat{z}$, m est la masse des particules et Γ est le temps de relaxation. f_e est la fonction de distribution d'équilibre donnée par :

$$f_e(\mathbf{v}) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{(-\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - mg\hat{z})/k_B T} \quad (4.2)$$

où n est la densité numérique des particules, k_B est la constante de Boltzmann et T est la température absolue. Le terme de collision (deuxième membre de l'équation (4.1)) constitue

l'approximation *Bhatnagar – Gross – Krook* (BGK) dans laquelle le taux de collision est proportionnel à l'écart de la fonction de répartition par rapport à la fonction d'équilibre f_e [120]. Ce terme s'annule uniquement lorsque l'équilibre est atteint localement.

On peut montrer que l'équation de Boltzmann avec l'approximation BGK se réduit aux équations de *Navier – Stokes* pour un fluide incompressible [14] :

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla P + \mu_f \nabla^2 \mathbf{v} + \rho g \hat{z} \quad (4.3)$$

où P est la pression et μ_f est la viscosité dynamique du fluide qui s'exprime en fonction du temps de relaxation Γ . Dans ce qui va suivre, nous allons brièvement décrire la discrétisation de l'équation de Boltzmann sur un réseau 2D.

4.2.1 Cadre et principes de la méthode LBM

Pour un fluide de densité ρ et de viscosité cinématique $\nu_c = \mu_f / \rho$, l'application de la méthode LBM nécessite la définition d'un réseau régulier. La figure 4.1 (a) présente un exemple bidimensionnel de la discrétisation du domaine du fluide. Les particules de fluide peuvent se déplacer d'un nœud à l'autre dans des directions prescrites.

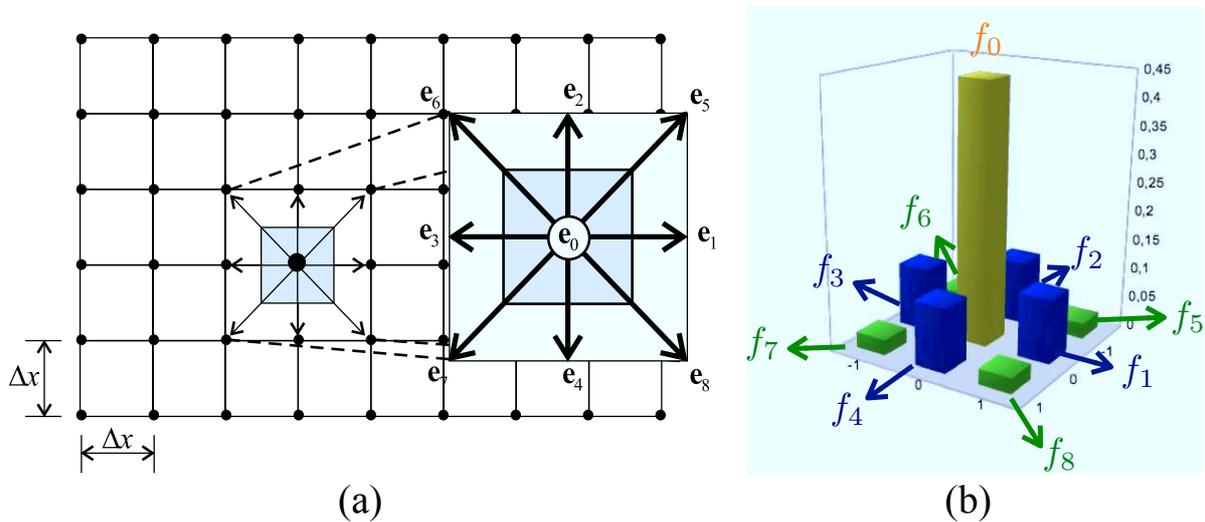


FIGURE 4.1: (a) Discretisation du domaine fluide suivant le modèle D2Q9. (b) Pondération de la fonction de distribution suivant la direction des particules.

Une discrétisation Lattice Boltzmann possible en deux dimensions est la D2Q9 (deux dimensions, neuf orientations de vitesses) représentée sur la figure 4.1 (a). Sous cette forme, les particules de fluide peuvent se déplacer vers huit sites voisins avec une vitesse e_i , avec $i = 1, \dots, 8$ ou avoir une vitesse nulle ($e_0 = 0$) et rester sur place. Etant donné le caractère discret des directions de déplacement, on définit une fonction de répartition $f_i(\mathbf{x}, t)$ pour chaque direction i . Par

définition, la densité du fluide à chaque nœud est donnée par la somme des densités partielles provenant des directions voisines :

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i \quad (4.4)$$

et la vitesse discrète du fluide \mathbf{v}_d est donnée par la moyenne des vitesses \mathbf{e}_i pondérée par la densité par direction f_i :

$$\mathbf{v}_d = \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^8 f_i \mathbf{e}_i \quad (4.5)$$

Durant chaque *pas de temps* Δt , les particules situées sur l'ensemble des nœuds se déplacent vers les nœuds voisins ou des collisions peuvent se produire et laisser place à une nouvelle distribution de particules, ce qui se traduit pour une modification des fonctions de répartition induite par les termes de collision.

Il est d'usage de considérer deux étapes principales dans les calculs LBM : l'écoulement des particules, ou le "streaming", et les collisions entre les particules. Soit $f_i^{\text{entrant}}(\mathbf{x}, t)$ la répartition des particules arrivant dans un nœud à la position \mathbf{x} au temps t^- et $f_i^{\text{sortant}}(\mathbf{x}, t)$ la répartition des particules sortant du nœud après collision au temps t^+ . Nous avons :

$$\begin{aligned} f_i^{\text{sortant}}(\mathbf{x}, t) &= f_i^{\text{entrant}}(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\Gamma} (f_i^{\text{entrant}}(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}) \\ f_i^{\text{entrant}}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) &= f_i^{\text{sortant}}(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (4.6)$$

où f_i^{eq} ($i = 0, \dots, 8$) est la fonction de répartition à l'équilibre qui doit être exprimée en fonction des variables moyenne ρ (la densité) et \mathbf{v}_d (la vitesse) pour différentes directions i . On peut montrer que la fonction de répartition à l'équilibre dans la discrétisation D2Q9 pour un fluide incompressible et en négligeant les effets de la gravité peut se mettre sous la forme :

$$f_i^{\text{eq}} = w_i \rho \left[1 + \frac{3}{c^2} \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{v}_d + \frac{9}{2c^4} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{v}_d)^2 - \frac{3}{2c^2} \mathbf{v}_d \cdot \mathbf{v}_d \right] \quad (4.7)$$

où c est la vitesse du réseau donnée par $c = \Delta x / \Delta t$, w_i est le facteur de pondération qui dépend de la direction. Ainsi $w_0 = 4/9$, $w_i (i = 1, \dots, 4) = 1/9$ et $w_i (i = 5, \dots, 8) = 1/36$ [120]. La fonction de répartition f_i , à travers le facteur w_i , peut alors être vue comme un histogramme représentant la fréquence d'occurrence du déplacement des particules dans la direction i (figure 4.1 (b)). De cette façon, quand la vitesse \mathbf{v}_d est nulle, la fonction de répartition à l'équilibre f_i^{eq} est égale à la densité macroscopique pondérée par le poids par direction w_i . Les champs de vitesses et de pressions de l'écoulement sont obtenus à partir de l'expression de la vitesse et de la densité après calcul des fonctions de répartition f_i à tous les nœuds et à tous les *pas de temps*.

Dans la méthode LBM, la viscosité est prise en compte implicitement à travers le temps de relaxation Γ . La viscosité cinématique ν_c s'exprime dans la discrétisation D2Q9 comme :

$$\nu_c = \frac{1}{3}c\Delta x\left(\Gamma - \frac{1}{2}\right) \quad (4.8)$$

4.2.2 Conditions aux limites

De nombreuses études ont porté sur les conditions aux limites dans la méthode Lattice Boltzmann et leur influence sur le comportement du fluide [146, 117, 133]. Nous nous intéressons ici uniquement aux conditions aux limites mises en œuvre durant cette thèse, à savoir les pressions constantes aux bords et l'interaction entre le domaine fluide et le domaine solide qui définit l'échantillon.

La prise en compte de la frontière fluide/échantillon est simple à mettre en œuvre et permet de considérer les géométries complexes. Différentes variantes de ce type de conditions aux limites existent (Succi [120], Chen et al [103]).

Dans le modèle *plan médian*, le domaine solide, l'échantillon fracturé, tout comme le domaine fluide, sont discrétisés en nœuds distribués sur un réseau régulier. Le domaine est séparé en deux types de nœuds solides : ceux à l'interface avec le fluide et ceux qui sont isolés du fluide. Les densités sortantes d'un nœud fluide à la frontière du domaine solide sont stockées sur un *pas de temps* dans le solide avant d'être redistribuées suivant la même direction, avec la même magnitude mais dans le sens opposé à chaque composante. La figure 4.2 résume les étapes de ce modèle.

La pression et la vitesse n'étant pas des variables explicites dans la méthode LBM, les conditions aux limites ne peuvent pas être imposées directement dans le calcul. Des conditions équivalentes en terme de fonctions f_i sont alors utilisées. La pression P du fluide est donnée par l'équation d'état dans le cas d'un fluide incompressible et sans cohésion interne comme étant $P = c_s^2\rho$, où c_s est la vitesse de propagation des ondes sur le réseau donnée en terme de vitesse du réseau c comme étant $c_s = \frac{c}{\sqrt{3}}$ [146]. L'écoulement peut être contrôlé avec les gradients de pression désirés en imposant aux bords des densités en accord avec cette relation.

4.3 Perméabilité : loi de Darcy

La loi de Darcy est un modèle linéaire du transport convectif d'un fluide newtonien incompressible au travers d'un milieu perméable sous un gradient de pression ∇P , elle s'écrit :

$$\mathbf{v} = -\frac{K}{\mu_f}\nabla P \quad (4.9)$$

où \mathbf{v} est le vecteur vitesse de filtration du fluide, μ_f sa viscosité dynamique et K la perméabilité du milieu (en m^2). Dans le cas d'un écoulement uniforme en régime permanent au travers d'un

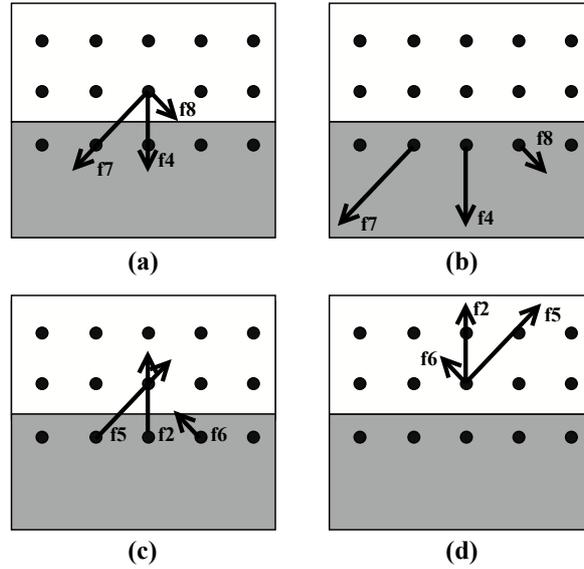


FIGURE 4.2: Illustration de l'interaction entre le domaine fluide et le domaine solide par le modèle plan médian. Le domaine fluide est en blanc et l'interface fluide/solide est en gris. (a) A t , l'étape de pré-écoulement où les composantes de la densité arrivent du domaine fluide vers le domaine solide avec un sens et une magnitude. (b) A t , l'étape de post-écoulement où les composantes de la densité sont stockées dans le solide en gardant les mêmes sens et magnitudes. (c) A t , l'étape d'inversion des composantes de la densité, elles gardent les mêmes directions et les mêmes magnitudes mais changent de sens. (d) A $t + \Delta t$, l'étape d'écoulement du fluide après interaction avec le domaine solide suivant les nouveaux sens.

milieu homogène isotrope de section moyenne $\langle S \rangle$ et de longueur L on peut écrire :

$$Q = v \langle S \rangle = \frac{K \langle S \rangle \Delta P}{\mu_f L} \quad (4.10)$$

où Q est le débit volumique du fluide, ΔP la différence de pression entre les extrémités du milieu. Il est généralement admis que la loi de Darcy est valable pour des écoulements laminaires de fluide. Dans notre étude, sera traité uniquement le cas d'un écoulement monophasique dans un milieu fissuré saturé.

4.4 Influence de la microstructure sur la perméabilité

4.4.1 Construction des échantillons numériques

Dans le chapitre précédent, des échantillons de béton numérique ont été générés pour étudier l'influence de leurs microstructures sur la morphologie des fissures qui peuvent y apparaître. Ils ont été soumis à un test de traction en déplacement imposé jusqu'à la fissuration par la méthode

Lattice Element Model (LEM). Dans ce chapitre, la perméabilité de ces échantillons est analysée. Des traitements préliminaires sont néanmoins nécessaires avant de pouvoir modéliser un écoulement à travers leur réseau de fissures et ainsi estimer leur perméabilité par la méthode LBM.

Indépendamment de la composition microstructurale, les échantillons dans les simulations LEM sont matérialisés par des éléments unidimensionnels, et les fissures, par la rupture de ces éléments. Une discrétisation spatiale en un réseau régulier à mailles carrées espacées de $a/10$ (a étant la longueur moyenne des éléments LEM) est superposée à chaque échantillon numérique. Un algorithme de localisation est par la suite appliqué afin d'identifier la nature de chaque nœud. Trois types de nœuds forment les échantillons destinés aux simulations par la méthode LBM : les nœuds identifiés comme appartenant au réseau de fissures et qui forment le domaine fluide ; les nœuds appartenant au domaine solide et qui correspondent à la partie non endommagée de l'échantillon ; et les nœuds qui appartiennent au domaine solide et qui sont sur l'interface avec le domaine fluide.

Les échantillons ainsi formés sont insérés entre deux réservoirs ayant la même discrétisation spatiale et contenant des nœuds du domaine fluide. Ils sont destinés à contenir un fluide maintenu sous pression constante afin d'assurer le gradient de pression nécessaire à son écoulement dans le réseau de fissures (figure 4.3). L'ensemble des nœuds du domaine fluide dans l'échantillon formera le milieu fissuré saturé dont la perméabilité sera estimée.

4.4.2 Paramètres et méthodologie

Les échantillons issus des simulations LEM ont tous les mêmes dimensions et ont été soumis à des tests de traction jusqu'à atteindre un déplacement cumulé identique. On vise à analyser l'influence de la fraction volumique des particules ρ^p et l'étalement η de leur taille (diamètre) sur la perméabilité de leur réseau de fissure. Tout comme dans le chapitre précédent, l'espace paramétrique de cette étude contient quatre valeurs de ρ^p ($\rho^p = 0.3, 0.4, 0.5$ et 0.65) et quatre étalements ($\eta = 1$ (le cas monodisperse), 3, 5, et 6). Pour chacune de ces configurations microstructurelles, la perméabilité de cinq échantillons fissurés a été mesurée portant le nombre de simulations LBM à quatre-vingt. Le fluide considéré est de l'eau à la température de 20°C , de viscosité dynamique $\mu_f = 10^{-3}$ Pa.s, et l'écoulement dans le réseau poreux est obtenu en maintenant un gradient de pression entre les deux réservoirs de $\Delta P = 35$ Pa.

La méthode LBM permet d'estimer la vitesse et la pression en chaque point du domaine fluide. Le débit est alors obtenu en calculant la vitesse d'écoulement à travers la surface normale à l'orientation de la fissure en chaque point du réseau poreux :

$$Q = v_n S \quad (4.11)$$

où v_n est la vitesse du fluide s'écoulant à travers la surface S orientée suivant la normale à la direction de l'écoulement. La figure 4.4 montre, pour un échantillon particulier, l'évolution du débit le long de la fissure. Ce dernier est adimensionné par le débit Q_p d'un écoulement

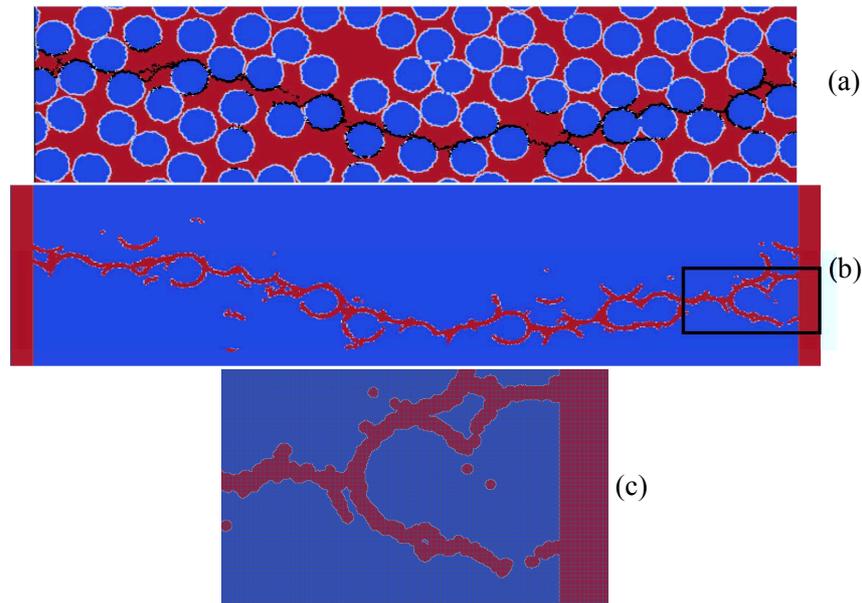


FIGURE 4.3: Illustration des étapes de construction des échantillons numériques pour les simulations LBM à partir d'échantillons fissurés issus des simulations LEM. (a) Échantillon fissuré issu d'une simulation LEM. En bleu les particules, en rouge la matrice, en blanc les interfaces et en noir le réseau de fissures. (b) Superposition d'un maillage régulier à mailles carré et construction de l'échantillon triphasique pour les simulations LBM. Il est constitué d'un domaine fluide en rouge, d'un domaine solide en bleu, et d'une interface solide/fluide en blanc. L'échantillon est encapsulé entre deux réservoirs appartenant au domaine fluide. (c) Zoom sur l'encadré de la figure (b) montrant le maillage LBM et les trois domaines.

de Poiseuille du même fluide à travers un tube rectiligne de même section moyenne $\langle S \rangle$ et de même longueur L . Le débit mesuré est constant et les fluctuations que présente la courbe correspondent aux zones où la direction normale à la fissure n'est pas bien définie en raison de son dédoublement ou de la présence de fissures parallèles dont certaines ne sont pas percolantes. L'établissement d'un débit constant marque le début du régime stationnaire de l'écoulement nécessaire à la mesure de la perméabilité.

La figure 4.5 montre les champs de vitesses et de pressions dans un échantillon après l'établissement du régime stationnaire. La pression varie de façon continue entre les deux réservoirs (pression élevée à gauche $P = 35$ Pa, pression nulle à droite). Le champ de vitesses montre que le fluide ne passe pas par tous les branchements de la fissure, il permet d'isoler les branches non percolantes du réseau, où la vitesse du fluide est nulle, de la fissure principale. Il montre aussi certaines variations localisées de la vitesse dues au rétrécissement ou au dédoublement de la fissure. La figure 4.6 montre les vecteurs vitesse dans une zone de la fissure. La vitesse est plus élevée dans la zone centrale de l'écoulement et tend à s'annuler sur les bords de la fissure. Ce phénomène est amplifié dans le rétrécissement en haut de la figure.

La perméabilité est calculée en utilisant l'équation (4.10) après établissement du régime stationnaire.

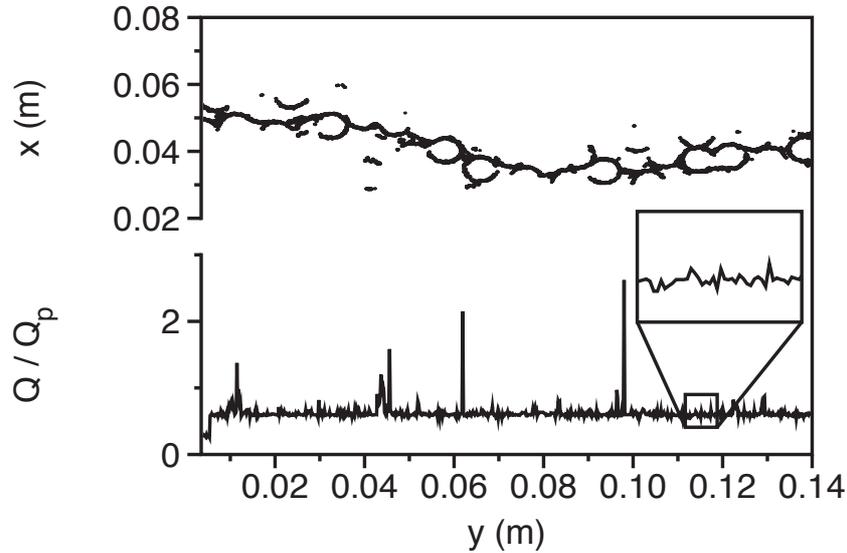


FIGURE 4.4: Evolution du débit Q adimensionné par le débit d'un écoulement de Poiseuille de mêmes dimensions Q_p dans une fissure par la méthode LBM.

4.4.3 Calcul de la perméabilité

Nous avons d'abord étudié la mise à l'échelle des simulations d'écoulement du fluide pour une fissure donnée à l'aide de la loi de Darcy en faisant varier à la fois le gradient de pression et la viscosité du fluide. La figure 4.7 (a) montre le débit Q en fonction du gradient de pression ΔP pour différentes valeurs de viscosité. Les données sont ajustées par une régression linéaire pour chaque valeur de la viscosité. Par ailleurs, tous les points se mettent bien à l'échelle avec la loi de Darcy comme on peut le voir sur la figure 4.7 (b) et permettent d'obtenir la perméabilité K du fluide à travers la pente du tracé. Ce résultat peut être également considéré comme une validation de la LBM. Toutes les valeurs de ΔP et de μ_f considérées dans cette étude donnent un nombre de Reynolds moyen inférieur à 1. Les effets inertiels sont donc négligeables.

4.4.4 Relation entre la perméabilité et la tortuosité des fissures

4.4.4.1 Identification d'une relation simple

La tortuosité τ , définie comme le rapport entre la longueur réelle de la fissure et sa longueur projetée, est estimée dans l'ensemble des échantillons numériques fissurés de l'espace paramétrique. La figure 4.8 montre l'évolution de l'inverse de la perméabilité K adimensionnée par la perméabilité K_p dans un écoulement de Poiseuille de mêmes dimensions en fonction de la tortuosité τ pour l'ensemble des échantillons et des configurations microstructurelles. Ces mesures ont été moyennées par intervalles réguliers et présentent des barres d'erreur correspondants à leurs écarts types. Il est remarquable que malgré les grandes plages de variabilité,

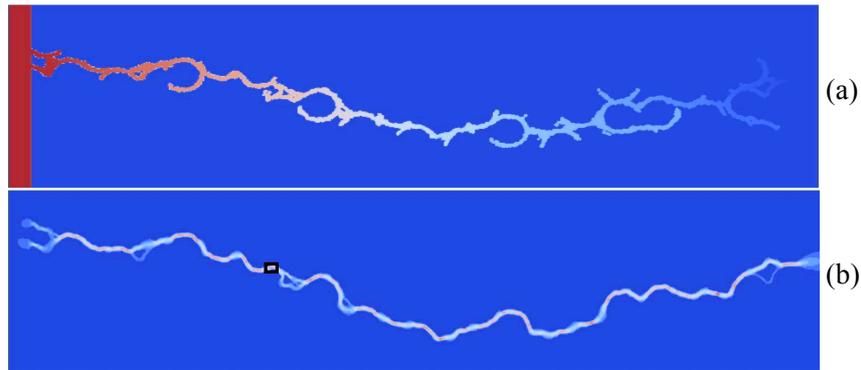


FIGURE 4.5: Visualisation du fluide dans le réseau de fissures. (a) Champ de pressions. (b) Champ de vitesses.

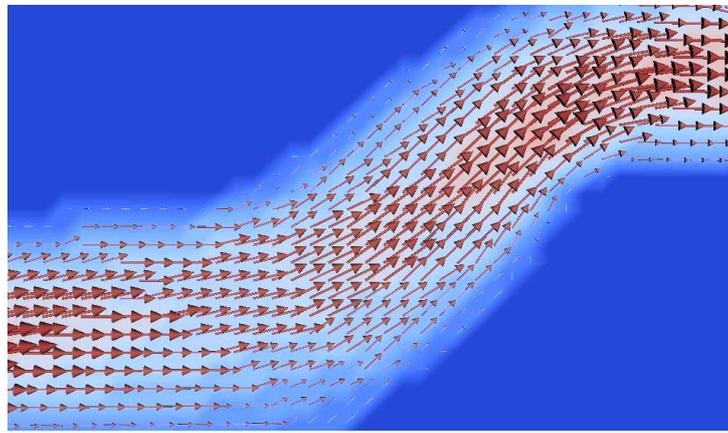


FIGURE 4.6: Agrandissement de la zone encadrée de la figure 4.5 (b) montrant les vecteurs vitesse des noeuds fluide.

l'ensemble des données suit une relation linéaire avec une bonne approximation. L'inverse de la perméabilité varie donc proportionnellement à la tortuosité comme :

$$\frac{K_p}{K} \simeq -2.7 + 3.1\tau \quad (4.12)$$

Les fissures dans ce type matériau s'initient de manière diffuse dans le volume à partir des zones de faiblesses et se rejoignent progressivement (phénomène de coalescence) jusqu'à la ruine du matériau. Il faut donc une densité minimum de fissures avant l'établissement d'un chemin percolant qui aura alors une tortuosité supérieure à 1 et une perméabilité supérieure à un conduit rectiligne ayant la même longueur et la même surface moyenne que ce chemin (un Poiseuille). Avant la percolation la perméabilité est donc nulle et c'est ce qui explique que la régression linéaire tracée ici ne trouve pas son origine à $\tau = K_p/K = 1$.

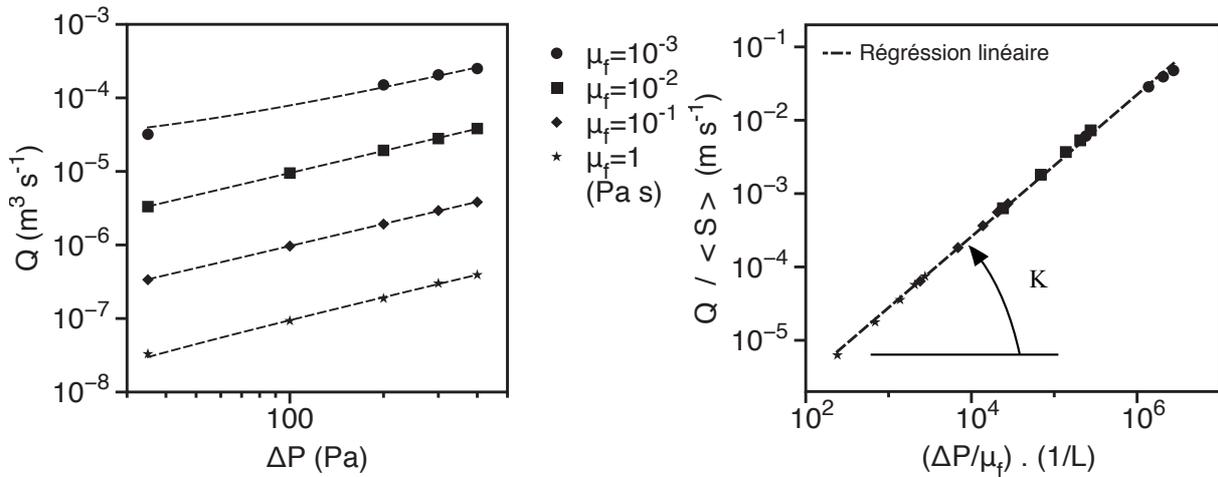


FIGURE 4.7: Débit en fonction du gradient de pression pour différentes viscosités dynamiques dans un échantillon fissuré par la méthode LBM. (a) Les lignes en pointillées représentent les régressions linéaires de ces évolutions. (b) Mise à l'échelle des données par la loi de Darcy. La pente du tracé donne la valeur de la perméabilité K .

4.4.4.2 Discussion sur la variabilité des résultats

Bien que l'évolution de l'inverse de la perméabilité en fonction de la tortuosité soit bien approchée par une régression linéaire, les mesures présentent des écarts types importants. Différentes raisons peuvent expliquer l'origine de cette variabilité. D'abord numériques, en effet, bien que la discrétisation spatiale LBM soit beaucoup plus fine que celle de la LEM, certaines singularités de la fissure peuvent disparaître lors du passage d'une discrétisation à l'autre et modifier ainsi le trajet de l'écoulement et potentiellement la perméabilité de la fissure. De plus, la tortuosité de chaque réseau de fissures est calculée comme étant le plus court chemin de la plus longue fissure du réseau. Cette approche ne prend pas en compte l'épaisseur de la fissure, qui elle, influence le chemin emprunté par le fluide. Il s'avère donc que l'écoulement passe par certains branchements, plus longs mais plus épais que le branchement le plus court, qui ne sont donc pas pris en compte dans le calcul de la tortuosité et pouvant être une source d'erreur dans l'établissement d'une telle corrélation. Par ailleurs, certains paramètres physiques ne sont pas pris en compte dans ces calculs et pourraient expliquer la variabilité sur les mesures. L'influence des rayons de courbures locaux ou encore l'épaisseur de la fissure sont encore à caractériser à ce stade de nos travaux. Il est évident, par exemple, que la pertinence de la tortuosité d'une fissure disparaît devant une certaine épaisseur critique ouvrant à l'écoulement des voies moins tortueuses. Une transition tortuosité/rugosité de paroi devrait intervenir lorsque l'épaisseur du canal fissuré augmente.

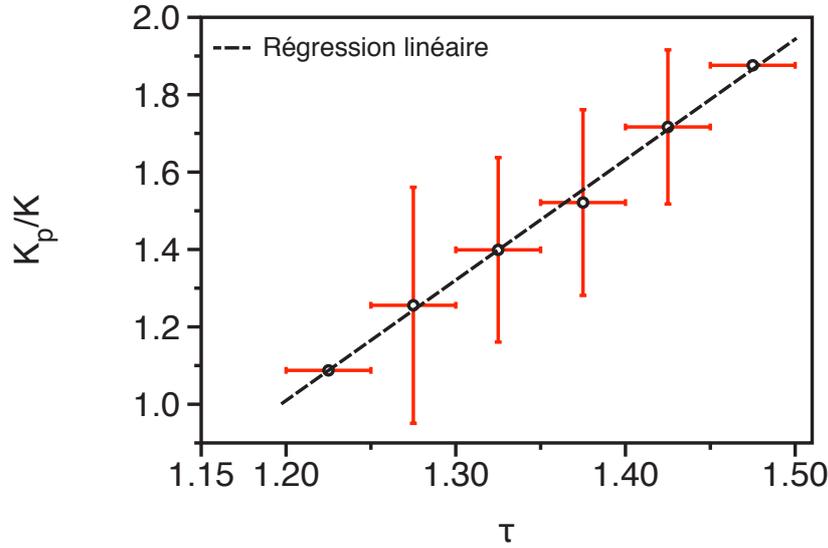


FIGURE 4.8: Evolution de l'inverse de la perméabilité adimensionnée en fonction de la tortuosité pour l'ensemble de l'espace paramétrique moyenné par intervalles réguliers. Les barres d'erreur représentent les écarts types sur les mesures.

4.4.5 Relation entre la texture granulaire et la perméabilité

La figure 4.9 montre la perméabilité en fonction de l'étalement granulométrique η pour trois fractions volumiques de particules ρ^p obtenues par simulation numérique. Les valeurs de la perméabilité ont été normalisées par la perméabilité K_p d'un tube rectiligne de même longueur et de même section efficace (écoulement de Poiseuille). Les barres d'erreur correspondent aux écarts types sur la perméabilité mesurée dans des échantillons ayant les mêmes descripteurs microstructuraux. On observe que K augmente avec η . Pour les échantillons monodisperses ($\eta = 1$) la perméabilité est de l'ordre de la moitié de celle d'un écoulement de Poiseuille en raison de la forme tortueuse du réseau fissuré et elle dépend très peu de la fraction volumique des particules. Pour les échantillons les plus polydisperses et les plus denses elle prend des valeurs aussi élevées que $0.8K_p$.

Par ailleurs, dans le chapitre précédent, une relation entre la tortuosité d'un réseau de fissures et la texture granulaire initiale du matériau fissuré a été mise en évidence (équation (3.16)). L'évolution de la perméabilité en fonction de ρ^p et η peut alors être obtenue en combinant ce résultat avec la régression linéaire obtenue dans l'équation (4.12) à travers la grandeur tortuosité. La perméabilité adimensionnée s'exprime alors comme :

$$\frac{K}{K_p} \simeq \frac{1}{0.4 + 5.27e^{-\sqrt{\eta-1}/4}\rho^p} \quad \text{symétrisé à } \rho^p \simeq 0.42 \quad (4.13)$$

Les tracés en lignes pointillées sur la figure 4.9 représentent l'évolution de la perméabilité conformément à ce modèle prédictif. On retrouve les mêmes tendances observées numériquement et, dans la limite de la précision statistique, le modèle et les mesures concordent bien.

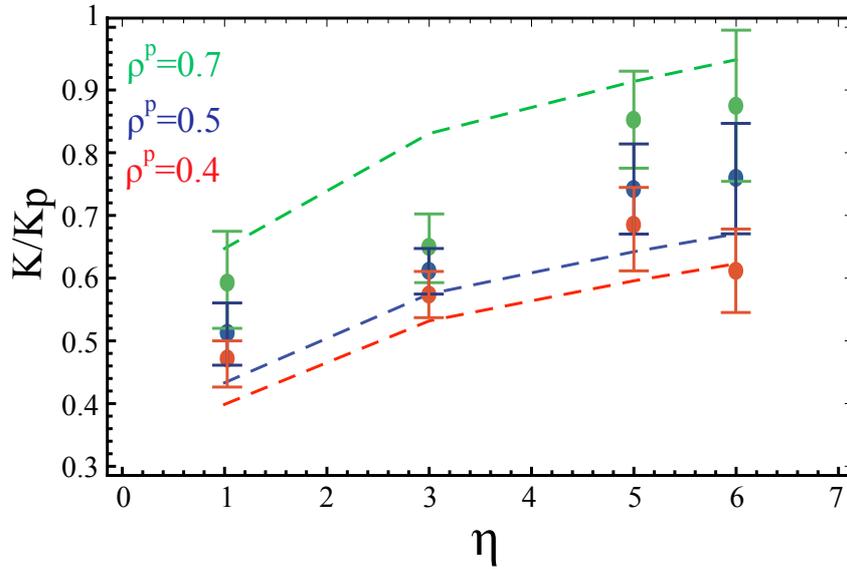


FIGURE 4.9: Evolution de la perméabilité K adimensionnée par la perméabilité d'un écoulement de Poiseuille de mêmes dimensions K_p en fonction de l'étalement η pour trois fractions volumiques de particules différentes ρ^p . Les barres d'erreurs représentent l'écart type des valeurs de perméabilité pour 5 échantillons ayant les mêmes descripteurs microstructuraux. Les tracés en pointillés représentent l'estimation du modèle (équation (4.13)).

Les prédictions de perméabilités de ce modèle sont comparées sur la figure 4.10 aux perméabilités obtenues numériquement par la méthode LBM sur l'ensemble des échantillons. On observe une concordance des résultats avec une erreur de 20%. L'application de ce modèle sur un béton réel observé sur la figure 3.3 et ayant une fraction volumique de particules $\rho^p = 0.46$ et un étalement $\eta = 10$ donne une estimation de sa perméabilité adimensionnée de $K/K_p = 0.72 \pm 0.14$. Dans la continuité de cette étude, une validation expérimentale de ce modèle représente une perspective à court terme intéressante.

4.5 Conclusion

Dans ce chapitre, Nous avons étudié la perméabilité des fissures obtenues précédemment par l'approche LEM en utilisant la méthode Lattice Boltzmann pour la simulation de l'écoulement d'un fluide visqueux à travers des échantillons bi-dimensionnels de matériaux granulaires cimentés assimilés à des bétons. Nous avons montré que pour différents gradient de pression et différentes viscosités les données issues des simulations sont en accord avec la loi de Darcy permettant ainsi le calcul des perméabilités pour l'ensemble des réseaux fissurés. Une relation linéaire entre l'inverse de la perméabilité et la tortuosité a été établie et un modèle permettant de prédire la perméabilité d'un matériau fissuré assimilé à un béton en fonction de la fraction volumique de particules et de leur étalement granulométrique a été présenté. Ce modèle s'avère

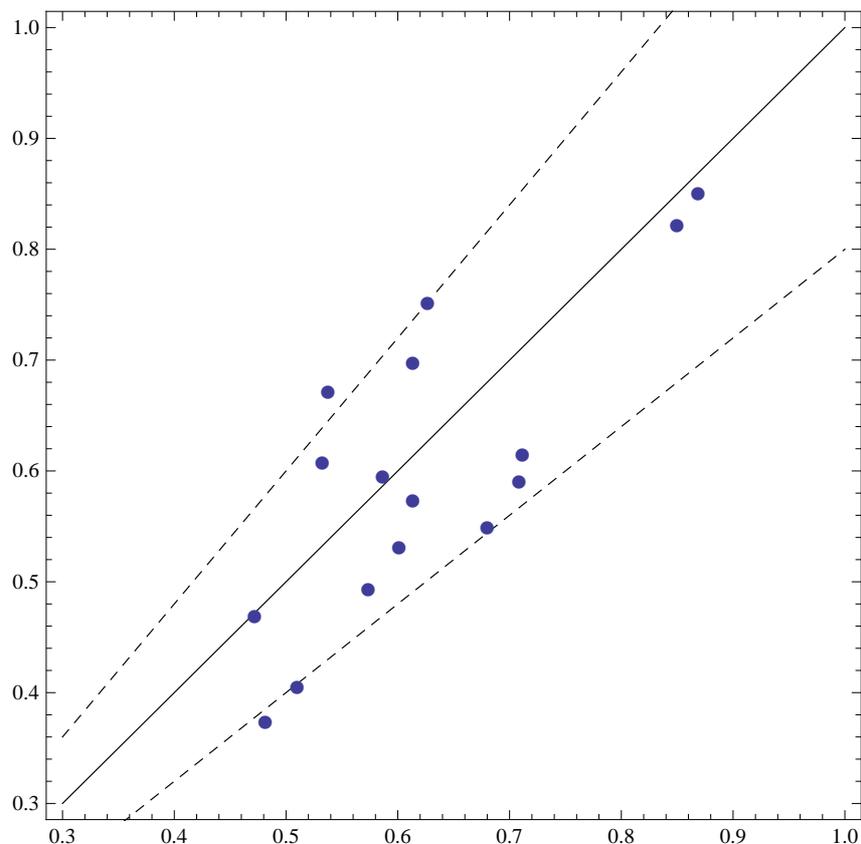


FIGURE 4.10: Evolution de la perméabilité K/K_p prédite par le modèle (équation (4.13)), en fonction de K/K_p estimée numériquement par la méthode LBM dans l'ensemble des échantillons de l'espace paramétrique. Les lignes en pointillés représentent le domaine d'erreur à $\pm 20\%$.

être en accord avec les perméabilités estimées par simulation numérique avec une erreur de 20%.

Conclusion générale

Sommaire

4.6 Bilan	128
4.7 Perspectives	129

4.6 Bilan

Ce travail de thèse a été consacré à l'étude des corrélations entre la microstructure des matériaux granulaires cimentés, la morphologie des réseaux de fissures qui peuvent y apparaître et leur perméabilité apparente. Une approche numérique a été adoptée et appliquée au cas d'un assemblage qui peut être assimilé au béton, support d'étude de ces travaux.

Une analyse bibliographique a montré que la présence d'une phase cimentaire dans les milieux granulaires leur confère des propriétés très particulières, d'une part par l'action volumique de la matrice cimentaire liant les particules entre elles et, d'autre part, par la structure granulaire compacte du milieu, très éloignée de celle des composites constitués d'une phase particulaire diluée. La géométrie et les propriétés mécaniques de la microstructure, c'est-à-dire la répartition des différentes phases (matrice, particules et vides) ainsi que l'adhésion aux interfaces entre ces phases, conditionnent la réponse macroscopique et la rupture des matériaux granulaires cimentés. Compte tenu du caractère polyphasique et hétérogène de la microstructure de ce type de matériaux et des difficultés que pose la modélisation de leur comportement et rupture, un modèle de type "Lattice Element Method" en trois dimensions (LEM 3D), fondé sur une discrétisation sur réseau, a été développé. Ce modèle permet de prendre en compte la matrice et sa répartition entre les particules, les propriétés des interfaces ainsi que la texture du squelette particulaire (compacité et distribution granulométrique). La fissuration dans chacune de ces phases est directement prise en compte au niveau des éléments du réseau qui ont la possibilité de rompre.

Une étude paramétrique appliquée par simulations LEM 3D à un matériau modèle constitué d'un assemblage dense de particules reliées par une matrice cimentaire poreuse a permis de caractériser l'influence combinée de la fraction volumique de matrice et de l'adhésion à l'interface entre la matrice et les particules sur le comportement macroscopique et la rupture des matériaux granulaires cimentés. Cette étude a montré que le comportement élastique était fortement influencé par la fraction volumique de la matrice qui, d'une part, agit directement sur la porosité et donc sur l'homogénéité de la répartition des contraintes dans le matériau et, d'autre part, modifie la surface spécifique de l'interface entre les particules et la matrice et donc l'adhérence globale de la matrice aux particules. L'évolution linéaire de la rigidité effective de ce matériau en fonction de la fraction volumique de matrice obtenue numériquement a été comparée avec un modèle théorique basé sur des lois d'homogénéisation.

L'étude de la densité de probabilité des contraintes dans le système a montré qu'elles ne sont pas transmises de façon homogène dans tout le volume mais suivent des chemins privilégiés passant par des ponts de matrice et des contacts entre particules fortement sollicités. Cet effet de voûte est amplifié avec la baisse de la fraction volumique de matrice (augmentation de l'espace poral). Par ailleurs, l'étude de l'endommagement des particules révèle l'existence de régimes de rupture distincts qui dépendent de la combinaison de la fraction volumique de matrice et de l'adhésion à l'interface entre la matrice et les particules. La limite d'endommagement des particules est contrôlée par la transition d'un régime où les fissures sont défléchies dans les interfaces, vers un régime où elles pénètrent dans les particules. Cette transition est gouvernée

par une grandeur homogène à la ténacité des interfaces entre les particules et la matrice, qui combine explicitement la fraction volumique de matrice et l'adhésion entre les particules et la matrice.

Une méthodologie générique permettant une caractérisation de la microstructure d'un matériau granulaire cimenté à partir de critères morphologiques fins et la génération d'échantillons numériques à texture granulaire contrôlée a été mise en place. Cette méthodologie a été appliquée au cas du béton et la représentativité des bétons numériques générés a été validée grâce à des descripteurs géométriques et morphologiques. L'étude statistique de l'influence de la microstructure d'un béton sur la morphologie des fissures qui peuvent y apparaître sous chargement a permis d'établir une corrélation directe entre la texture granulaire initiale et la tortuosité du réseau de fissures : la tortuosité est modélisée, avec une erreur inférieure à 3%, comme une fonction de la fraction volumique des particules et de la dispersion de leurs diamètres. Cette étude a nécessité une analyse sur la taille du volume élémentaire représentatif qui permet la prise en compte des mécanismes locaux qui contrôlent la fissuration. En outre, le calcul de la tortuosité sur des réseaux de fissures complexes a nécessité le développement d'un protocole dédié.

Enfin, l'application de la méthode Lattice Boltzmann (LBM) pour la simulation des écoulements de fluide a permis de soumettre les bétons numériques fissurés à des écoulements à gradient de pression imposé. Les résultats de ces simulations pour différentes viscosités sont en accord avec la loi de Darcy, ce qui a permis le calcul des perméabilités pour l'ensemble des réseaux fissurés. Nous avons ainsi mis en évidence une dépendance linéaire entre la perméabilité, d'une part, et la compacité et l'étalement granulométrique des échantillons, d'autre part. Finalement, à des fluctuations statistiques près, une relation entre la perméabilité et la tortuosité du réseau de fissure a été établie, la perméabilité étant en moyenne inversement proportionnelle à la tortuosité.

4.7 Perspectives

Le travail présenté dans ce mémoire peut être prolongé selon plusieurs directions.

Tout d'abord, nous avons employé un protocole unique pour la préparation des échantillons numériques. Nous avons fait varier la fraction volumique des phases, l'étalement sur la taille des particules, et l'adhésion aux interfaces sans changer de protocole. Ce dernier assure un remplissage presque homogène des espaces interstitiels entre les particules et les contacts directs sont supposés être sans cohésion. Des études supplémentaires en s'appuyant sur des procédures de remplissage différentes sont donc nécessaires pour confirmer la robustesse de nos résultats. Une distribution de la phase matricielle par couches successives, comme c'est le cas lors de la formation d'agrégats naturels, peut être une première approche à étudier. Dans le même esprit, l'influence du contraste élastique entre les différentes phases sur les mécanismes de rupture, abordée dans le deuxième chapitre, mérite d'être étudiée de manière systématique en vue d'une comparaison avec les effets liés aux deux paramètres essentiels qui sont la fraction volumique

de matrice et l'adhésion à l'interface.

Numériquement, l'approche LEM présente un potentiel élevé et peut être améliorée pour décrire l'influence des paramètres d'environnement, ou simplement pour modéliser d'autres types de matériaux. En effet, la méthode LEM, par sa discrétisation en éléments portant les propriétés mécaniques, se prête à des couplages multiphysiques. Ainsi, il serait possible d'implanter des lois différentes au niveau des éléments du réseau (viscoélasticité, etc) ou de prendre en compte, par exemple, l'influence de la température et des interactions chimiques.

Dans ces travaux, une corrélation entre la tortuosité et la perméabilité d'un réseau de fissures a été établie dans un béton numérique. Il serait intéressant de reconduire cette étude sur des fissures de formes simples et de tortuosités contrôlées, afin de caractériser l'influence de chaque singularité morphologique sur la perméabilité. Etudier l'influence de l'amplitude et de la longueur d'onde d'une fissure sinusoidale, ou encore l'influence de l'angle d'un coude unique dans une fissure sur la perméabilité apparente, en sont des exemples. Il serait intéressant, de la même façon, de quantifier l'influence de l'épaisseur d'une fissure. Il est certain que pour une même fissure, et donc pour une même tortuosité, le chemin parcouru par un fluide dépend des contraintes imposées par l'épaisseur. Le passage d'une fissure tortueuse à une fissure dont les parois sont rugueuses, en en modifiant uniquement l'épaisseur, en est un cas limite.

D'autres perspectives à ces travaux ont été abordées durant cette thèse.

Dans ce mémoire, une corrélation directe entre la microstructure d'un béton bi-dimensionnel et la morphologie de ses fissures a été établie. Leur tortuosité a été modélisée comme une fonction de la fraction volumique des granulats et de la dispersion de leurs diamètres. Il serait intéressant d'étendre cette analyse à des bétons numériques tri-dimensionnels. Dans cette optique, quelques recherches préliminaires ont été entamées.

Un béton numérique tridimensionnel a été engendré en se basant sur les mêmes hypothèses utilisées en deux dimensions. Les échantillons sont formés de particules sphériques et d'une matrice cimentaire remplissant l'espace interstitiel et assurant la cohésion du matériau. La granulométrie est obtenue à partir du modèle de Voivret détaillée dans la section 3.3.1.1 et les particules sont distribuées aléatoirement dans l'espace en se fondant sur la méthode d'addition séquentielle. La rigidité et l'énergie de rupture des phases sont celles du béton réel. Les interfaces ont la même rigidité que la matrice mais sont deux fois plus fragiles. Les mêmes relations qu'en deux dimensions sont utilisées pour convertir ces données matériaux en paramètres pour les éléments unidimensionnelles du maillage (raideur et seuil de rupture en force) pour toutes les phases (particule et matrice) et les interfaces (entre deux particules en contact ou entre une particule et la matrice).

D'une part, pour une bonne représentativité géométrique de la forme des particules, dix éléments unidimensionnels par diamètre sont nécessaires dans la méthode LEM. D'autre part, le nombre maximum d'éléments par échantillon pour garder des temps de calcul raisonnables pour des analyses statistiques est de l'ordre de $1.5 \cdot 10^6$. Le nombre d'éléments augmentant très vite en fonction de l'étalement en trois dimensions, les paramètres microstructuraux de l'étude se sont limités, dans un premier temps, à une fraction volumique de particule de $\rho^p = 0.5$ (celle

d'un béton ordinaire) et la dispersion entre les diamètres des particules à $\eta = 1$ et $\eta = 3$. Le nombre maximum de particules dans les échantillons est de 1000. Cinq échantillons cubiques de chaque configuration microstructurale ont été générés puis soumis à des tests de traction simple en utilisant la méthode LEM. Comme en deux dimensions, les simulations sont arrêtées quand la contrainte suivant l'axe de sollicitation s'annule. La figure 4.12 gauche montre un exemple d'échantillon numérique avec une fraction volumique $\rho^p = 0.5$ et un étalement de $\eta = 5$.

La tortuosité en trois dimensions est définie comme le rapport entre l'aire de la surface de fissuration et l'aire de sa projetée (figure 3.1).

Durant la sollicitation, des microfissures apparaissent de façon diffuse dans l'échantillon avant de percoler et de former la surface principale de fissuration qui mène à la rupture de l'échantillon. Comme en deux dimensions, une première étape est alors d'appliquer l'algorithme de percolation afin d'isoler la surface de rupture percolante.

Une grille à mailles cubiques est superposée à la fissure principale isolée et l'algorithme d'identification développé pour les fissures bidimensionnelles est appliqué. La surface de fissure est alors convertie en voxels. Le volume voxelisé est par la suite soumis à une suite de coupes bidimensionnelles avec une distance inter coupe égale aux cotés des voxels ($a/10$ où a est la taille moyenne des éléments du maillage). Ces coupes sont appliquées suivant des plans perpendiculaires à la fissure principale et représentent autant d'images bidimensionnelles pixelisées. La figure 4.11 montre une partie du volume de la fissure principale obtenue par superposition de coupes bidimensionnelles ayant l'épaisseur d'un voxel.

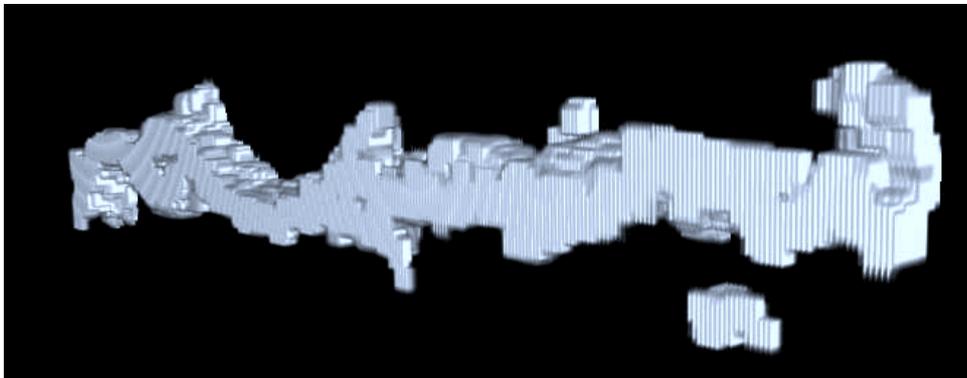


FIGURE 4.11: Partie d'une fissure en voxels obtenue par superposition de vingt coupes bidimensionnelles.

Chaque image est soumise aux traitements numériques résumés dans la figure 3.22 afin d'en isoler la fissure percolante (la plus grande longueur des plus courts chemins percolants) et en calculer sa longueur. L'aire de la fissure principale percolante représente alors la somme de ces longueurs (épaisseur d'un voxel). La tortuosité est ensuite obtenue en divisant cette aire par celle de sa projetée.

Les fissures obtenues en trois dimensions sont très difficiles à caractériser. Elles sont souvent formées d'un surface sur plusieurs plans parallèles joints faussant la mesure de la tortuosité (des

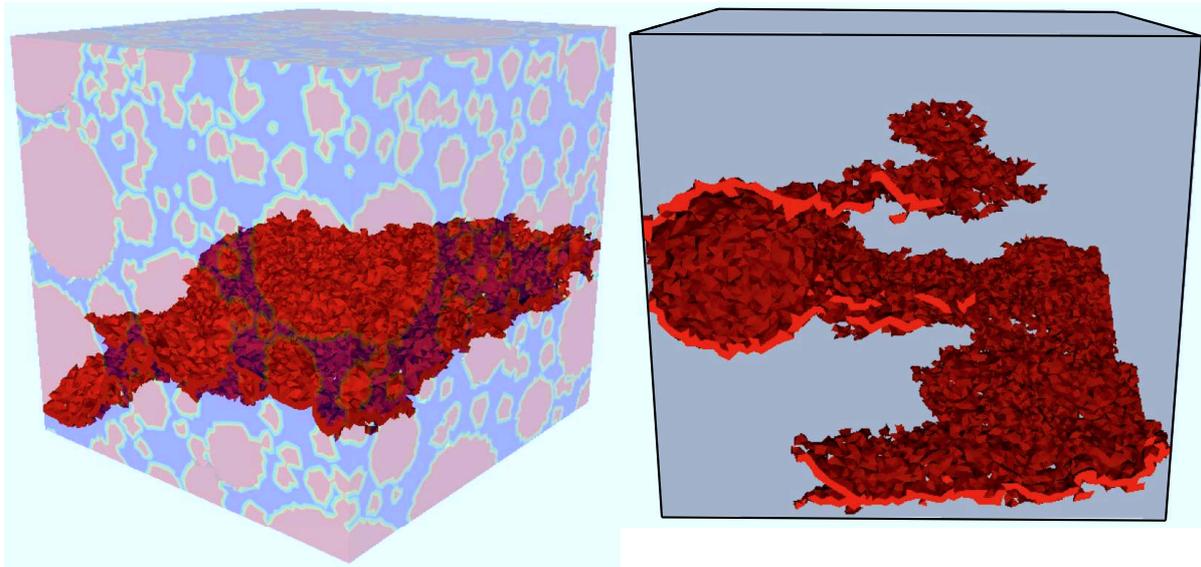


FIGURE 4.12: Exemples de fissures en Trois dimensions obtenues dans un échantillon avec une fraction volumique $\rho^p = 0.5$ et un étalement de $\eta = 5$. La fissure de droite se déploie sur plusieurs plans parallèles.

valeurs supérieures à 2 par exemple, voir figure 4.12). De plus, la surface de la fissure utilisée pour le calcul de la tortuosité est différente suivant que les coupes soient faites dans l'une ou l'autre des directions perpendiculaires à la fissure principale. Les branches de la fissure jugées secondaires dépendent de la direction des coupes. D'autres définitions de la tortuosité sont à trouver dans ces cas là et des outils plus adaptés à leurs traitements devront alors être développés. Par ailleurs, la limitation sur la discrétisation spatiale restreint le nombre de particules dans les échantillons et affecte leur représentativité. De plus, une étude statistique sur le rôle de la microstructure nécessiterait d'étendre l'espace paramétrique à d'autres fractions volumiques de particules et à d'autres dispersions sur les diamètres. La puissance de calcul forme donc une autre limite à l'extension du modèle à la troisième dimension.

Enfin, l'utilisation de la méthode LBM a permis de mesurer la perméabilité apparente d'échantillons de bétons fissurés obtenus par simulations LEM. Il serait intéressant d'étendre cette étude au transport de particules par un fluide s'écoulant dans le réseau de fissures [67, 68]. Le but serait alors d'estimer l'influence de paramètres tels que la forme des particules transportées ou encore l'effet du frottement, entre elles et avec les parois du réseau, sur la perméabilité des bétons à leur passage. De la même manière, quelques investigations de démonstrabilité ont été menées. La figure 4.13 montre le champ de vitesses d'un écoulement dans un conduit bi-dimensionnel contenant trois obstacles entre deux réservoirs à pression différente. Le réservoir à la plus grande pression contient des particules circulaires de diamètres vingt fois inférieurs à la section du conduit. Dans cette simulation la méthode de Dynamique des Contacts a été utilisée pour la gestion des interactions entre les particules et un couplage avec la méthode LBM a été nécessaire pour la prise en compte des interactions fluide/particules. Cette simulation montre des effets de "bouchage" lors de la rencontre d'obstacles dans le conduit : la pression et ma

vitesse chutent en aval du bouchage.

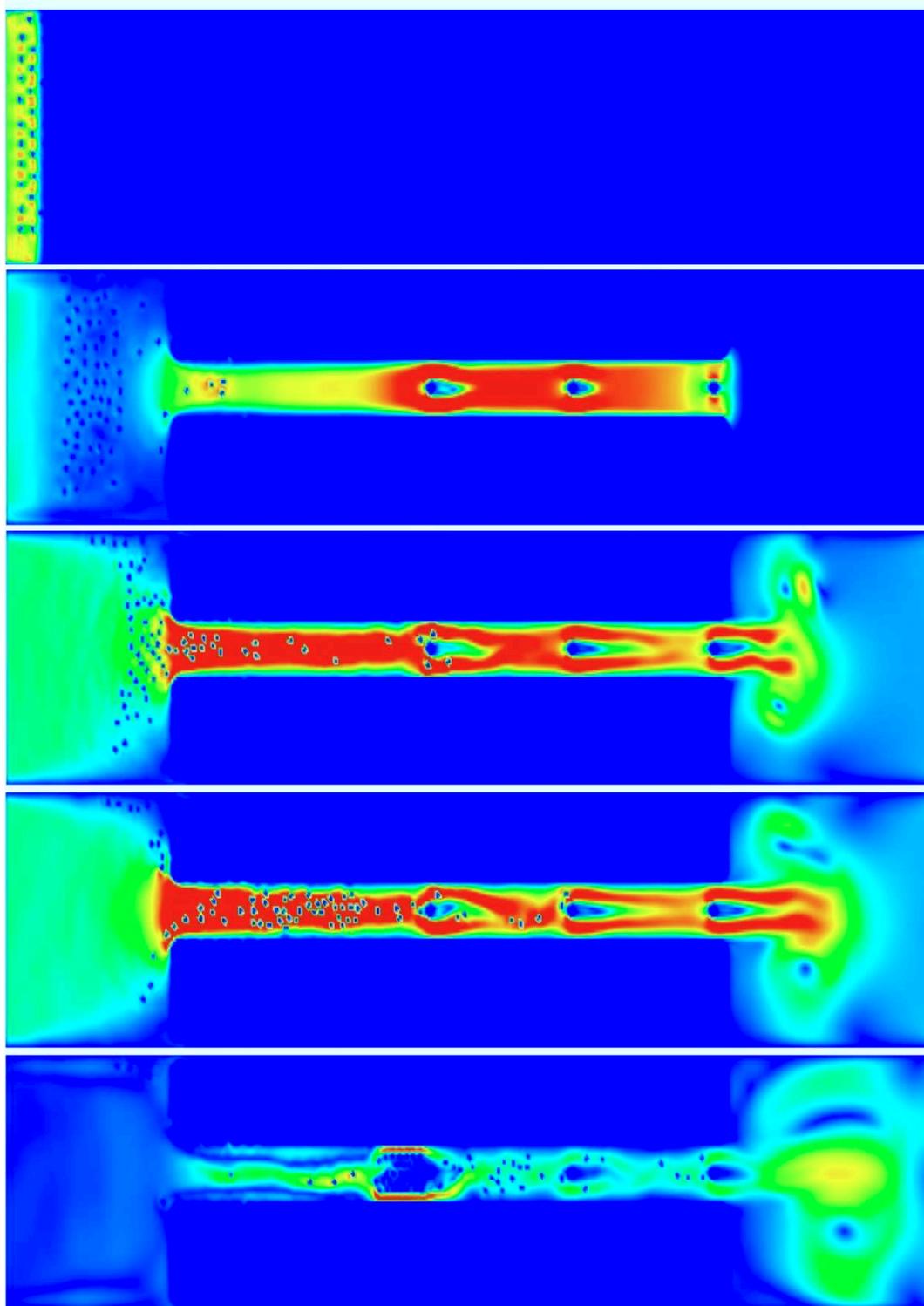


FIGURE 4.13: *Champ de vitesses d'un écoulement avec transport de particules dans un conduit entre deux réservoirs à pressions différentes. Les simulations ont été réalisées à l'aide d'un modèle couplé de Lattice Boltzmann pour le fluide et la Dynamique Moléculaire pour les particules.*

Bibliographie

- [1] P. P. Camanho A. R. Melro and S. T. Pinho. Generation of random distribution of fibres in long-fibre reinforced composites. *Composites Science And Technology*, 68 :2092–2102, 2008.
- [2] M.D. Abramoff, P.J. Magalhaes, and S.J. Ram. Image processing with imagej. *Biophotonics International*, 11(7) :36–42, 2004.
- [3] W.A. Atwell. *Wheat Flour*. AACC, St Paul USA, 2001.
- [4] G. H. Tattersall P.F.G. Banfill. *The Rheology of Fresh Concrete*. Pitman Books Limited, 1983.
- [5] V. Baroghel-Bouny. *Caractérisation microstructurale et hydrique des pâtes de ciment et des bétons ordinaires et à hautes performances*. PhD thesis, Ecole Nationale Des Ponts et Chaussées, 1994.
- [6] J. Baron and J-P. Ollivier. *Les bétons. Bases et données pour leur formulation. Construction Béton*. Atilh, 2002.
- [7] C. Daux N. Moes J. Dolbow N. Sukumar T. Belytschko. Arbitrary branched and intersecting cracks with the extended finite element methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 48 :1741–1760, 2000.
- [8] S. Bianco, P. Ferrario, M. Quaglio, R. Castagna, and C. Pirri. Nanocomposites based on elastomeric matrix filled with carbon nanotubes for biological applications. In S. Bianco, editor, *Carbon Nanotubes - From Research to Applications*. InTech, 2011.
- [9] O. Buyukozturk and B. Hearing. Crack propagation in concrete composites influenced by interface fracture parameters. *International Journal of Solids and Structures*, 35(31-32) :4055–4066, November 1998.
- [10] J.O. Carneiro, S. Jalali, V. Teixeira, and M. Tomas. The effect of concrete strength and reinforcement on toughness of reinforced concrete beams. *Construction and Building Materials*, 19(7) :493–499, September 2005.
- [11] C. S. Chang, T. K. Wang, L. J. Sluys, and J. G. M. van Mier. Fracture modeling using

- a micro-structural mechanics approach–i. theory and formulation. *Engineering Fracture Mechanics*, 69(17) :1941–1958, November 2002.
- [12] C.S. Chang, T.K. Wang, L.J. Sluys, and J.G.M. Van Mier. Fracture modeling using a micro-structural mechanics approach- ii. finite element analysis. *Engineering Fracture Mechanics*, 69 :1959–1976, 2002.
- [13] G. Chanvillard. *Le matériau béton : connaissances générales*. Aléas, 1999.
- [14] S. Chen and G.D. Doolen. Lattice boltzmann method for fluid flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30 :329–364, 1998.
- [15] B. Chiaia, A. Vervuurt, and J. G. M. Van Mier. Lattice model evaluation of progressive failure in disordered particle composites. *Engineering Fracture Mechanics*, 57(2-3) :301–309, 1997.
- [16] R.A. Cook and K.C. Hover. Mercury porosimetry of hardened cement pastes. *Cement and Concrete Research*, 29(6) :933–943, June 1999.
- [17] T.H. Cormen, C.E. Leiserson, R.L. Rivest, and C. Stein. *Introduction to Algorithms. Section 26.2, "The Floyd-Warshall algorithm"*. MIT Press et McGraw-Hill, 2001.
- [18] P. Cundall. A computer model for simulating progressive large scale movements of blocky rock systems. In *Proceedings of the Symposium of the International Society of Rock Mechanics*, Vol. 1, 132-150, 1971.
- [19] F. De Larrard. *Concrete mixture proportioning. A scientific approach*. E & FN SPON. London, 1991.
- [20] A. Delaplace, G. Pijaudier-Cabot, and S. Roux. Progressive damage in discrete models and consequences on continuum modelling. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44(1) :99–136, January 1996.
- [21] J.Y. Delenne, M. S. El Youssoufi, F. Cherblanc, and J. C. Bénet. Mechanical behaviour and failure of cohesive granular materials. *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.*, 28 :1577–1594, 2004.
- [22] S. Diamond and J. Huang. The itz in concrete-a different view based on image analysis and sem observations. *Cement and Concrete Composites*, 23 :179–188, 2001.
- [23] L. Dormieux, D. Kondo, and F.-J. Ulm, editors. *Microporomechanics*. Wiley, England, 2006.
- [24] L. Dormieux, E. Lemarchand, D. Kondo, and E. Fairbairn. Elements of poro-micromechanics applied to concrete. *Materials and Structures*, 37(1) :31–42, January 2004.
- [25] W. Drugan and J. Willis. A micromechanics-based non local constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 44 :497–524, 1996.
- [26] D. Elata and J. Dvorkin. Pressure sensitivity of cemented granular materials. *Mechanics of Materials*, 23(2) :147–154, June 1996.
- [27] F. Erdogan and G.C. Sih. On the crack extension in plates under plane loading and transverse shear. *Journal of Basic Engineering*, 85 :519–527, 1963.
- [28] S. Feng, M. F. Thorpe, and E. Garboczi. Effective-medium theory of percolation on central-force elastic networks. *Phys. Rev. B*, 31(1) :276–, January 1985.
- [29] S.P. Fernberg and L.A. Berglund. Effects of glass fiber size composition (film-former

- type) on transverse cracking in cross-ply laminates. *Composites : Part A*, 31 :1083–1090, 2000.
- [30] B. Fouré. *Granulats et bétons légers. Bilan de 10 ans de recherches*. Presses de l'ENPC, 1986.
- [31] T.P. Fries and H.G. Matthies. Classification and overview of meshfree methods. *Journal of Scientific Computing*, 2004.
- [32] E.K. Gamstedt and B.A. Sjögren. Micromechanisms in tension-compression fatigue of composite laminates containing transverse plies. *Composites Science and Technology*, 59 :167–178, 1999.
- [33] H. Gao and P. Klein. Numerical simulation of crack growth in an isotropic solid with randomized internal cohesive bonds. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46(2) :187–218, February 1998.
- [34] E.J. Garboczi and A.R. Day. An algorithm for computing the effective linear elastic properties of heterogeneous materials : three dimensional results for composites with equal phase poisson ratios. *J. Mech. Phys. Solids*, 43 :1349–1362, 1995.
- [35] J.M. Gatt, Y. Monerie, D. Laux, and D. Baron. Elastic behavior of porous ceramics : application to nuclear fuel materials. *Journal of Nuclear Materials*, 336(2-3) :11, 2005. Anglais.
- [36] F. A. Gilibert, J-N. Roux, and A. Castellanos. Computer simulation of model cohesive powders : influence of assembling procedure and contact laws on low consolidation states. *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 75(1 Pt 1) :011303, Jan 2007.
- [37] I. Gitman, H. Askes, and L. Sluys. Representative volume : existence and size determination. *Eng. Fracture Mech*, 74 :2518–2534, 2007.
- [38] A.W. Gladrow. *Lattice Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models*. 2000.
- [39] L. Granger. *Comportement différé du béton dans les encientes de centrales nucléaires. Analyse et modélisation*. Laboratoire Centrale des Ponts et Chaussées, 1996.
- [40] A. Griffith. The phenomenon of rupture and flow in solids. *Royal Society*, A221 :163–198, 1920.
- [41] K. Han, Y.T. Feng, and D.R.J. Owen. Sphere packing with a geometric based compression algorithm. *Powder Technology*, 155(1) :33–41, July 2005.
- [42] Z. Hashin. Analysis of composite materials - a survey. *Journal of Applied Mechanics, Transactions ASME*, 50(3) :481–505, September 1983.
- [43] Z. Hashin and P. J. M. Monteiro. An inverse method to determine the elastic properties of the interphase between the aggregate and the cement paste. *Cement and Concrete Research*, 32(8) :1291–1300, August 2002.
- [44] Z. Hashin and S. Shtrikman. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multi- phase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11 :127–140, 1963.
- [45] M.Y. He and J.W. Hutchinson. Crack deflection at an interface between dissimilar elastic materials. *International Journal of Solids and Structures*, 25(9) :1053–1067, 1989.
- [46] H. J. Herrmann and S. Roux. *Statistical Models for Fracture in Disordered Media*. North Holland, Amsterdam, 1990.
- [47] M. H. Hestens and E. Stiefel. Methodes of conjugate gradients for solving linear. *Journal*

- of Research of National Buresu of Standards*, 49 :2379–, 1952.
- [48] R. Hill. Elastic properties of reinforced solids : some theoretical principles. *J.Mech. Phys. Solids*, 11 :357–372, 1963.
- [49] T. Hsu, F. Slate, G. Sturman, and G. Winter. Microcracking of plain concrete and the shape of the stress-strain curve. *ACI Journal*, 60 :209–224, 1963.
- [50] M. Idiart, H. Moulinec, P. Ponte Castaneda, and P. Suquet. Macroscopic behavior and field fluctuations in viscoplastic composites : second-order estimates versus full-field simulations. *J. Mech. Phys. Solids*, 54 :1029–1063, 2006.
- [51] P. Bouchard F. Bay Y. Chastel I.Tovena. Crack propagation modelling using an advanced remeshing technique. *Computer Methods in Applied Mechanincs and Engineering*, 189 :723–742, 2000.
- [52] M. Jean. The non smooth contact dynamics method. *Computer Methods in Applied Mechanic and Engineering*, 177 :235–257, 1999.
- [53] M. Jean and J. J. Moreau. Unilaterality and dry friction in the dynamics of rigid body collections. In *Proceedings of Contact Mechanics International Symposium*, pages 31–48, Lausanne, Switzerland, 1992. Presses Polytechniques et Universitaires Romandes.
- [54] D. Jeulin. *Caractérisation morphologique et modèles de structures aléatoires*. Hermès Science Publications, 2001.
- [55] O. Joachim and F. Mucklich. *Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science*. John Wiley, 2000.
- [56] R. Jullien and P. Meakin. Simple three-dimensional models for ballistic deposition with restructuring. *Europhys. Lett.*, 4(12) :1385, 1987.
- [57] R. Jullien and P. Meakin. Three-dimensional model for particle-size segregation by shaking. *Phys. Rev. Lett.*, 69(4) :640, 1992.
- [58] R. Jullien and P. Meakin. Computer simulations of steepest descent ballistic deposition. *Colloids and Surfaces A : Physicochemical and Engineering Aspects*, 165(1-3) :405–422, May 2000.
- [59] R. Jullien, P. Meakin, and A. Pavlovitch. Random packings of spheres built with sequential models. *J. of Phys. A*, 25 :4103, 1992.
- [60] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, and D. Jeulin. Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *J. Solids Struct.*, 40 :3647–3679, 2003.
- [61] F. De Larrard. *Concrete Mixture Proportioning*. E & FN Spon, 1999.
- [62] F. De Larrard and A. Belloc. The influence of aggregate on the compressive strength of normal and high-strength concrete. *ACI materials journal*, 94 :417–426, 1997.
- [63] J. Lemaitre and J-L. Chaboche. *Mécanique des milieux solides*. Dunod, 1985.
- [64] G. Lilliu and J. G. M. Van Mier. 3d lattice type fracture model for concrete. *Engineering Fracture Mechanics*, 70(7-8) :927–941, May 2003.
- [65] C.H. Liu, S.R. Nagel, D.A. Schecter, S.N. Coppersmith, S. Majumdar, O. Narayan, and T.A. Witten. Force fluctuations in bead packs. *Science*, 269 :513, 1995.
- [66] P. Gilormini M. Bornert, T. Bretheau. *Homogeneisation en mecanique des materiaux*. Hermes Science, 2001.
- [67] M. Mansouri, J-Y. Delenne, M.S. ElYoussofi, and A. Seridi. A 3d dem-lbm approach for

- the assessment of the quick condition for sands. *Comptes Rendus Mécanique*, 337 :675–681, 2009.
- [68] M. Mansouri, J-Y. Delenne, A. Seridi, and M.S. ElYoussefi. Numerical model for the computation of permeability of a cemented granular material. *Powder Technology*, 208 :532–536, 2011.
- [69] G. Matheron. *Les variables régionalisées et leur estimation*. Masson, 1965.
- [70] G. Matheron. The theory of regionalized variables and its applications. Technical report, Paris School of Mines publications, 1971.
- [71] P. Kumar Mehta and Paulo J. M. Monteiro. *Concrete : Structure, Properties, and Materials*. McGraw-Hill Professional, New York, 2005.
- [72] I. J. Merchant, D. E. Macphee, H. W. Chandler, and R. J. Henderson. Toughening cement-based materials through the control of interfacial bonding. *Cement and Concrete Research*, 31(12) :1873–1880, December 2001.
- [73] A.R. Mohamed and W. Hansen. Micromechanical modeling of crack-aggregate interaction in concrete materials. *Cement And Concrete Composites*, 21 :349–359, 1999.
- [74] Y. Monerie. *Fissuration des matériaux composites : rôle de l'interface fibre-matrice*. PhD thesis, Aix-Marseille II, 2000.
- [75] J. J. Moreau. Unilateral contact and dry friction in finite freedom dynamics. In *CISM*, pages 1–82, 1988.
- [76] J. J. Moreau. New computation methods in granular dynamics. In *Powders & Grains 93*, page 227, Rotterdam, 1993. A. A. Balkema.
- [77] J. J. Moreau. Numerical investigation of shear zones in granular materials. In D. E. Wolf and P. Grassberger, editors, *Friction, Arching, Contact Dynamics*, pages 233–247, Singapore, 1997. World Scientific.
- [78] F. Radjai N. Estrada, A. Taboada. Shear strength and force transmission in granular media with rolling resistance. *Phys Rev E*, 78, 2008.
- [79] A. Neville. *Propriété des bétons*. Eyrolles, 2000.
- [80] I. Odler and M. Rossler. Investigations on the relationship between porosity, structure and strength of hydrated portland cement pastes. ii. effect of pore structure and of degree of hydration. *Cement and Concrete Research*, 15(3) :401–410, May 1985.
- [81] M. Ortiz and A. Pandolfi. Finite deformation irreversible cohesive elements for three dimensional crack propagation analysis. *international Journal for Numerical Methods in Engineering*, 44 :1267–1282, 1999.
- [82] M. Ostoja-Starzewski. Random field models of heterogeneous materials. *J. Solids Struct*, 35 :2429–2455, 1998.
- [83] J-F. Parisot, editor. *Les combustibles nucléaires*. Commissariat à l'énergie atomique, 2008.
- [84] C. Pelissou, J. Baccou, Y. Monerie, and F. Perales. Determination of the size of the representative volume element for random quasi-brittle composites. *International Journal of Solids and Structures*, 46(14-15) :2842–2855, 2009.
- [85] F. Perales, S. Bourgeois, A. Chrysochoos, and Y. Monerie. Two field multibody method for periodic homogenization in fracture mechanics of nonlinear heterogeneous materials. *Engineering Fracture Mechanics*, 75(11) :3378–3398, July 2008.

- [86] Y. Pomeranz, editor. *Wheat : Chemistry and technology*, St Paul USA, 1988.
- [87] E. P. Prado and J. G. M. van Mier. Effect of particle structure on mode I fracture process in concrete. *Engineering Fracture Mechanics*, 70(14) :1793–1807, September 2003.
- [88] E. Pramono and K. William. Fracture energy-based plasticity formulation of plain concrete. *Journal of Engineering Mechanics*, 115 :1183–1204, 1989.
- [89] R. Pyrz. Correlation of microstructure variability and local stress field in two-phase materials. *Materials Science and Engineering*, A177 :253–259, 1994.
- [90] R. Pyrz. Quantitative description of the microstructure of composite materials. part 1 : Morphology of unidirectional composite systems. *Composites Science and Technology*, 50 :197–208, 1994.
- [91] F. Radjai and F. Dubois, editors. *Discrete-element Modeling of Granular Materials*. Iste-Wiley, London, 2011.
- [92] F. Radjai, M. Jean, J.J. Moreau, and S. Roux. Force distributions in dense two dimensional granular systems. *Phys. Rev. Letter*, 77 :274–277, 1996.
- [93] F. Radjai, I. Preechawuttipong, and R. Peyroux. Cohesive granular texture. In *Continuous and discontinuous modelling of cohesive frictional materials*, pages 148–159, Berlin, 2001. Springer Verlag.
- [94] F. Radjai and D. E. Wolf. The origin of static pressure in dense granular media. *Granular Matter*, 1 :3–8, 1998.
- [95] F. Radjai, D. E. Wolf, M. Jean, and J.J. Moreau. Bimodal character of stress transmission in granular packings. *Phys. Rev. Letter*, 80 :61–64, 1998.
- [96] N. Recho. *Rupture par fissuration des structures*. Hermes, Paris, 1995.
- [97] A. Renyi. On a one-dimensional problem concerning random space-filling. *Publications of Mathematical Institute of Hungarian Academy of Sciences*, 3, 1958.
- [98] J. R. Rice and G.C. Sih. Plane problems of cracks in dissimilar materials. *Journal of Applied Mechanics*, 32 :418–423, 1965.
- [99] A.P. Roberts and E.J. Garboczi. Elastic properties of model random three-dimensional open-cell solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(1) :33–55, January 2002.
- [100] C. Rossello, M. Elices, and G.V. Guinea. Fracture of model concrete : fracture energy and characteristic length. *Cement and Concrete Research*, 36 :1345–1353, 2006.
- [101] D.H. Rothman and S. Zaleski. *Lattice gas cellular automata*. 1997.
- [102] S. Roux and H. J. Herrmann. *Statistical Models for Fracture in Disordered Media*, chapter Continuum and discrete description of elasticity and other rheological behavior, pages 87–114. North Holland, Amsterdam, 1990.
- [103] R. Mei S. Chen, D. Martinez. On boundary conditions in lattice boltzmann methods. *Phys Fluids*, 8 :2527–2536, 1996.
- [104] K. Sab and B. Nedjar. Periodization of random media and representative volume element size for linear composites. *C.R. Mécanique*, 333 :187–195, 2005.
- [105] M. Saito. Characteristics of microcracking in concrete under static and repeated tensile loading. *Cement and Concrete Research*, 17 :211–218, 1987.
- [106] E. Schlangen and E. J. Garboczi. Fracture simulations of concrete using lattice models : Computational aspects. *Engineering Fracture Mechanics*, 57(2-3) :319–332, 1997.

- [107] E. Schlangen and J. G. M. Van Mier. Experimental and numerical analysis of micromechanisms of fracture of cement-based composites. *Cement and Concrete Composites*, 14(2) :105–118, 1992.
- [108] K.L. Scrivener, A.K. Crumbie, and P. Laugesen. The interfacial transition zone (itz) between cement paste and aggregate in concrete. *Interface Science*, 12 :411–421, 2004.
- [109] J. Segurado and J. Llorca. A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 50 :2107–2121, 2002.
- [110] J. Serra. Image analysis and mathematical morphology. *Academic Press*, 1982.
- [111] M.B. Shah, J.L. Ferracane, and J.J. Kruzic. Mechanistic aspects of fatigue crack growth behavior in resin based dental restorative composites. *Dental Materials*, 25 :909–916, 2009.
- [112] X. Shan and H. Chen. Lattice boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys. Rev. E*, 47 :1815–1819, 1993.
- [113] X. Shan and H. Chen. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice boltzmann equation. *Phys. Rev. E*, 49 :2941–2948, 1994.
- [114] D. Sidney. Considerations in image analysis as applied to investigations of the itz in concrete. *Cement and Concrete Composites*, 23 :171–178, 2001.
- [115] F. Sienkiewicz, A. Shukla, M. Sadd, Z. Zhang, and J. Dvorkin. A combined experimental and numerical scheme for the determination of contact loads between cemented particles. *Mechanics of Materials*, 22(1) :43–50, January 1996.
- [116] L. E. Silbert, G. S. Grest, and J. W. Landry. Statistics of the contact network in frictional and frictionless granular packings. *Phys. Rev. E*, 66 :1–9, 2002.
- [117] P.A. Skordos. Initial and boundary conditions for the lattice boltzmann equation model. *Physical Rev A*, 48 :4823–4842, 1993.
- [118] F. Soulié, F. Cherblanc, M.S. El Youssoufi, and C. Saix. Influence of liquid bridges on the mechanical behaviour of polydisperse granular materials. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 30(3) :213–228, 2006.
- [119] P. Stroeven. Stereological approach to roughness of fracture surfaces and tortuosity of transport paths in concrete. *Cement and Concrete Composites*, 22(5) :331–341, 2000.
- [120] S. Succi. *The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond*. Clarendon Press Oxford, 2001.
- [121] H. Tan, Y. Huang, C. Liu, and P.H. Geubelle. The mori-tanaka method for composite materials with nonlinear interface debonding. *International Journal of Plasticity*, 21(10) :1890–1918, October 2005.
- [122] V. Topin. *Matériaux granulaires cimentés : modélisation et application à l’albumen de blé*. PhD thesis, Université Montpellier 2, 2008.
- [123] V. Topin. *Matériaux granulaires cimentés : modélisation et application à l’albumen de blé. Chapitre 6*. PhD thesis, Université Montpellier 2, 2008.
- [124] V. Topin, J-Y. Delenne, F. Radjai, L. Brendel, and F. Mabilie. Strength and failure of cemented granular matter. *Eur. Phys. J. E*, 23(4) :413–429, Aug 2007.
- [125] V. Topin, F. Radjai, and J.Y. Delenne. Stress fields in granular solids : Effect of composition,. *Powder Technology*, 208 :568–573, 2011.
- [126] V. Topin, F. Radjai, J.Y. Delenne, and F. Mabilie. Mechanical modeling of wheat hardness

- and fragmentation. *Powder Technology*, 190(1–2) :215–220, March 2009.
- [127] V. Topin, F. Radjai, J.Y. Delenne, A. Sadoudi, and F. Mabilie. Wheat endosperm as a cohesive granular material. *Journal of Cereal Science*, 47(2) :347–356, March 2007.
- [128] S. Torquato. *Random Heterogeneous Materials : Microstructure and Macroscopic Properties*. Springer-Verlag, 2002.
- [129] J. Torrenti. *Propriétés des bétons*. Hermès, 2002.
- [130] J. G. M. VanMier and M. R. A. van Vliet. Experimentation, numerical simulation and the role of engineering judgement in the fracture mechanics of concrete and concrete structures. *Construction and Building Materials*, 13(1-2) :3–14, March 1999.
- [131] J.G.M. VanMier, M.B. Chiaia, and A. Vervuurt. Numerical simulation of chaotic and self-organizing damage in brittle disordered materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 142(1-2) :189–201, March 1997.
- [132] J.G.M. VanMier, M.R.A. van Vliet, and T.K. Wang. Fracture mechanisms in particle composites : statistical aspects in lattice type analysis. *Mechanics of Materials*, 34(11) :705–724, November 2002.
- [133] R. Verberg and A.J.C. Ladd. Lattice boltzmann model with sub-grid-scale boundary conditions. *Phys Rev Letters*, 84 :2148–2151, 2000.
- [134] V. Villeneuve. détermination de l’endommagement du béton par méthode pétrographique quantitative. Master’s thesis, département de géologie et génie géologique. Université Laval Québec, 2011.
- [135] R. Vincent, M.S. El-Youssoufi, and F. Radjai. Shear strength properties of wet granular materials. *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)*, 73(5) :051304, 2006.
- [136] W. M. Visscher and M. Bolsterli. Random packing of equal and unequal spheres in two and three dimensions. *Nature*, 239 :504–507, 1972.
- [137] H.J. Vogel, H. Hoffmann, A. Leopold, and K. Roth. Studies of crack dynamics in clay soil : 2. a physically based model for crack formation. *Geoderma*, 125(3-4) :213–223, April 2005.
- [138] H.J. Vogel, H. Hoffmann, and K. Roth. Studies of crack dynamics in clay soil : 1. experimental methods, results, and morphological quantification. *Geoderma*, 125(3-4) :203–211, April 2005.
- [139] C. Voivret. *Influence de la polydispersité sur la texture et le comportement mécanique des milieux granulaire*. PhD thesis, Université Montpellier II, 2008.
- [140] M.J. Vold. A numerical approach to the problem of sediment volume. *Journal of Colloid Science*, 14(2) :168–174, April 1959.
- [141] P.B. Xiang Yang Wu and W. Teng-fong. Micromechanics of compressive failure and spatial evolution of anisotropic damage in darley dale sandstone. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 37 :143–160, 2000.
- [142] G. R. Krishnan X. L. Zhao M. Zaman and J. C. Roegiers. Fracture toughness of a soft sandstone. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 35 :695–710, 1998.
- [143] A. Zaoui, M. Bornert, T. Bretheau, and P. Gilormini. *Changement d’échelle : motivation et méthodologie. Homogénéisation en mécanique des matériaux*. Hermes Science, 2001.

-
- [144] Z. P. Zhang, A. B. Yu, and J. A. Dodds. Analysis of the pore characteristics of mixtures of disks. *Journal of Colloid and Interface Science*, 195(1) :8–18, November 1997.
- [145] C.W. Zhou, W. Yang, and D.N. Fang. Mesofracture of metal matrix composites reinforced by particles of large volume fraction. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 41(6 Pt 1) :311–326, Jun 2004.
- [146] D.P. Ziegler. Boundary condition for lattice boltzmann simulations. *Journal Stat Phys*, 71 :1171–1177, 1993.

Relations microstructure-fissuration-perméabilité dans les milieux granulaires cimentés

Résumé : Ce travail de thèse est consacré à l'étude de la corrélation entre la microstructure des matériaux granulaires cimentés, la morphologie des fissures qui peuvent y apparaître et leur perméabilité apparente. Une approche numérique par discrétisation sur réseau a permis de prendre en compte la structure polyphasique hétérogène de ces matériaux et d'étudier les mécanismes qui contrôlent leur comportement et leur rupture. Trois régimes de rupture ont été identifiés en fonction de la fraction volumique de la phase cimentaire et de l'adhésion aux interfaces inclusions/matrice cimentaire. Dans le cadre de la sûreté nucléaire, et dans une optique d'analyse d'étanchéité sur des bétons fissurés, une méthodologie de génération de microstructures représentatives du béton, combinant les fractions volumiques des phases et les distributions des tailles des grains, a été proposée. Cette méthodologie permet d'analyser le réseau de fissures qui peut y apparaître sous chargement en fonction de la microstructure. En particulier, la tortuosité des fissures est analysée en fonction de la fraction volumique des inclusions et de la distribution de leurs diamètres. Enfin, la perméabilité apparente des fissures a été étudiée par la simulation de l'écoulement d'un liquide par la méthode Lattice Boltzmann. Une corrélation microstructure-tortuosité-perméabilité a été ainsi obtenue. Les outils de modélisation et d'analyse proposés sont suffisamment génériques pour permettre de prendre en compte la complexité microstructurelle d'autres types de matériaux polyphasiques et leurs évolutions.

Mots-clés : Matériaux granulaires cimentés, simulations numériques, Lattice, microstructure, tortuosité, perméabilité.

Microstructure-fracture-permeability relations in cemented granular materials

Abstract : In this work, we investigate the relationships between the microstructure of cemented granular materials, morphology of cracks that may appear under tensile loading and their apparent permeability. In order to simulate the complexity of the multiphase heterogeneous structure of these materials, a numerical approach based on a lattice discretization was developed and used to study the mechanisms that control their behavior and rupture. Three distinct regimes of crack propagation were evidenced in terms of the combined influence of the matrix volume fraction and particle/matrix adherence. In the context of nuclear safety and in view of analyzing cracked concrete tightness, a methodology is proposed for generating representative microstructures with controlled phase volume fractions and particle size distributions. The cracks obtained under tensile loading are analyzed and a relationship is obtained between the microstructure of concrete and the tortuosity of the cracks. The permeability of cracked numerical microstructures was obtained by the simulation of liquid flow through the cracks by means of the Lattice Boltzmann method. Finally, a microstructure-tortuosity-permeability relation is proposed. The modeling and analysis tools developed in this work are generic enough to be applied to other complex multiphase heterogeneous materials.

Key words : Cemented granular materials, numerical simulations, Lattice, microstructure, tortuosity, permeability.

