

Analyses par homogénéisation numérique de la conductivité thermique de composites chaux-chanvre

A. COUTURE^{a,b}, T. H. PHAM^c, Ph. PILVIN^a
V. FRANCOIS^b, V. PICANDET^a, J.-C. CUILLIERE^b

a. Université Bretagne Sud, iRDL, UMR CNRS 6027, Lorient, France
b. Université du Québec à Trois-Rivières, ERICCA, Trois-Rivières, Canada
c. Université d'Architecture de Hanoï, Vietnam

Résumé :

Le béton de chanvre est un matériau de construction qui présente l'avantage d'être performant pour ses propriétés d'isolation thermique et sur le plan environnemental dans la globalité de son cycle de vie. Néanmoins, ses propriétés mécaniques (élasticité, résistance en compression) sont plus faibles que celles des matériaux traditionnels de construction. Cette étude a pour objectif de modéliser l'effet des inclusions végétales sur la conductivité thermique de composites chaux-chanvre afin à terme d'analyser puis d'améliorer leurs propriétés mécaniques. Pour homogénéiser ces matériaux hétérogènes, des approches théoriques et numériques sont confrontées aux résultats expérimentaux obtenus pour des pâtes de chaux avec des fractions volumiques de chènevotte variant de 5% à 30% [1]. Sur le plan numérique, les simulations sont effectuées par des calculs éléments finis 3D qui s'intéressent à la réponse thermique en conduction stationnaire de volumes élémentaires statistiques (VES). Les calculs sont mis en œuvre sur plusieurs VES constitués d'une matrice cimentaire de chaux hydratée comportant des inclusions cylindriques de chènevotte disposées selon des configurations conformes aux données expérimentales.

Abstract:

Hemp concrete is an effective building material because of its low thermal conductivity and environmental impact throughout its life cycle. Nevertheless, its mechanical properties (elasticity, compressive strength) are lower than those of traditional building materials. This study aims to model the effect of hemp shive inclusions on the thermal conductivity of lime and hemp composites in order to improve their mechanical properties. To homogenize these heterogeneous materials, theoretical and numerical approaches are confronted with the experimental results of lime paste with hemp shive volume fractions between 5 and 30% [1]. Stationary thermal calculations using the finite element method are used to determine the thermal conduction of statistical volume elements (SVE). The calculations are performed on several SVE consisting of a hydrated lime cement matrix filled with cylindrical hemp shive inclusions arranged in configurations according to the experimental data.

Mots clefs : composites chaux-chanvre, homogénéisation, CAO, maillage, éléments finis

1 Introduction

Le béton de chanvre est un matériau de construction qui est compétitif pour ses propriétés thermiques et attractif sur le plan environnemental. Ses propriétés mécaniques (élasticité, résistance en compression) sont des points faibles vis-à-vis de celles des matériaux de construction traditionnels. Cette étude a pour objectif de modéliser l'effet des inclusions végétales sur les propriétés effectives de composites chaux-chanvre afin d'optimiser leurs usages. Pour homogénéiser le comportement thermomécanique de ces matériaux hétérogènes, des modèles théoriques et une approche numérique sont confrontés aux résultats expérimentaux obtenus pour des composites avec des fractions volumiques de chènevotte allant de 5% à 35% [1]. Sur le plan numérique, les simulations sont effectuées par des calculs éléments finis 3D pour estimer les champs thermiques en condition stationnaire pour un nombre suffisant de VES. Comme il est difficile de définir une notion de volume élémentaire représentatif (VER) pour cette classe de composites, les calculs sont mis en œuvre sur plusieurs VES constitués d'une matrice cimentaire de chaux comportant des inclusions cylindriques de chènevotte disposées selon des configurations en accord avec les données expérimentales.

Une des clés de cette étude est de disposer d'un outil de maillage robuste pour automatiser les nombreux calculs EF 3D nécessaires. Les maillages de chaque VES sont réalisés via une plateforme numérique basée sur le modèle de topologie unifié (MTU) qui englobe les outils de la conception assistée par ordinateur (CAO), de maillage automatique et les techniques de la méthode des EF [2]. La géométrie de chaque microstructure est générée par addition séquentielle de particules dans la matrice en vérifiant sa conformité statistique avec les données expérimentales disponibles (concentrations volumiques, tenseur d'orientations des particules élançées).

2 Matériaux et élaboration des composites étudiés

La matrice cimentaire des composites est élaborée avec un liant constitué majoritairement de chaux aérienne à 70% et d'ajouts pouzzolaniques hydrauliques (Tradical PF70). Pour tous les échantillons testés, le rapport massique en eau (E) sur chaux (C) est gardé constant $E/C = 0.5$. Seules les fractions volumiques de chènevotte varient entre 5% et 30%. Les particules de chènevotte sont issues de la même production (chanvrières de l'Aube) après défibrage des pailles de chanvre. Les chènevottes utilisées sont exemptes de toute fibre corticale. Pour la préparation des échantillons, la chaux et l'eau sont d'abord mélangées à l'aide d'un malaxeur à axe vertical. Au préalable, les particules de chènevotte sont immergées dans l'eau pendant 2 minutes afin de limiter l'absorption de l'eau de gâchage nécessaire à l'hydratation de la chaux par la chènevotte et d'obtenir une bonne homogénéité du mélange. Un mélange homogène assure un contact intime entre les différents constituants, une distribution aléatoire des orientations et un enrobage satisfaisant des particules de chènevotte. Pour chaque concentration de chènevotte, trois éprouvettes prismatiques de dimensions $130 \times 130 \times 50 \text{ mm}^3$ sont élaborées. Avant les mesures de conductivité thermique, 28 jours de maturation puis environ deux semaines de séchage à 60 degrés Celsius en étuve ventilée sont nécessaires pour atteindre une masse stabilisée des éprouvettes [1].

Pour chaque teneur en particules isolantes, des coupes polies selon 3 directions orthogonales sont réalisées pour analyser la microstructure des composites. Comme illustré sur la figure 1, les images optiques permettent via une analyse morphologique d'estimer l'élançement moyen des particules ($l/D \approx 3.5$) et la distribution des orientations du grand axe des ellipsoïdes. Globalement, on constate que tous les

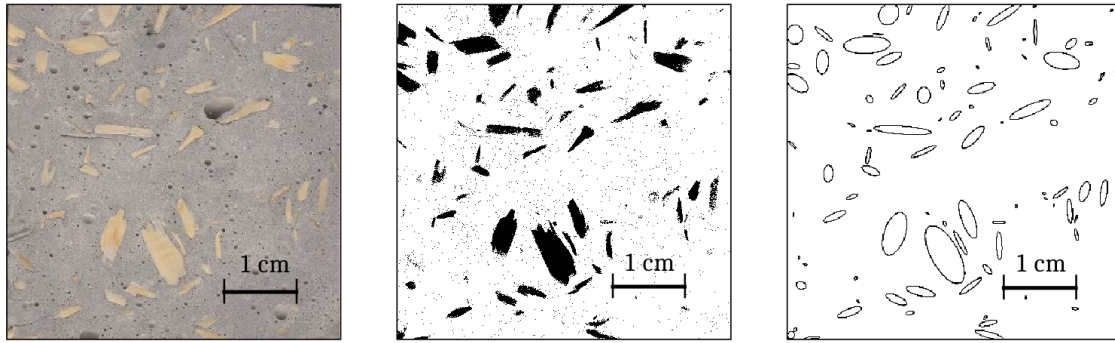


Figure 1: Coupes d'un échantillon avec une fraction volumique de 9%

composites présentent une distribution aléatoire des orientations des particules. Cet aspect est pris en compte dans le processus de génération des maillages pour les calculs éléments finis.

La conductivité thermique est mesurée en régime stationnaire à une température voisine de 20 degrés Celsius selon la technique de la plaque chaude gardée (PCG) [3]. On peut noter (Figures 4 et 5) une répétabilité convenable des mesures avec une précision sur la conductivité macroscopique de l'ordre de 5 pourcents. La conductivité thermique des composites varie quasi-linéairement avec la fraction volumique de chènevotte dans la plage d'étude.

3 Outils CAO et modélisation des microstructures

La représentation par éléments finis d'un volume élémentaire statistique débute par la génération de la morphologie de la microstructure. La distribution spatiale des particules, leurs orientations et leurs dimensions, issues de mesures expérimentales, sont prises en compte afin de représenter les matériaux le plus fidèlement possible. Pour des particules modélisées par des sphères, des premiers résultats ont été obtenus en disposant aléatoirement ces inclusions à l'aide de l'algorithme de Donev [5]. Afin de rendre plus réaliste le modèle éléments finis d'un VES pour ces composites, il est nécessaire de prendre en compte l'élanement des particules de chènevotte et l'anisotropie de leurs propriétés. Pour cela, une méthode de positionnement des particules basée sur la simulation de systèmes multi-corps a été utilisée [6]. La méthode consiste à remplir le VES de particules en suivant une distribution de positions, d'orientations et de tailles puis graduellement déplacer les particules qui se chevauchent. Une vérification est ensuite effectuée afin d'assurer que les distributions des positions et des orientations respectent les informations disponibles sur le composite.

Une fois les particules positionnées, la microstructure est modélisée à l'aide d'outils de CAO. L'Équipe de Recherche en Intégration CAO-CALcul (ERICCA) de l'Université du Québec à Trois-Rivières a développé une plateforme numérique basée sur un modèle de topologie unifié [4] qui permet de réaliser des maillages complexes à partir d'un modèle CAO. Les particules et la matrice sont représentées selon un modèle BREP (Boundary REPresentation) c'est-à-dire comme des solides comportant une topologie sous forme de faces, arêtes et sommets. La structure BREP d'un solide peut être représentée comme un arbre hiérarchique d'éléments topologiques ayant à la base l'enveloppe du solide (Figure 2). Afin de distinguer l'intérieur de l'extérieur du solide, les faces sont dotées d'une orientation qui pointe vers l'extérieur de l'objet. Cette modélisation est mise en œuvre avec la librairie open-source OpenCascade [7] qui est encapsulée dans la plateforme de développement. Tous les éléments topologiques communs à deux solides sont fusionnés entre eux à l'aide d'éléments de co-topologie qui permettent de préserver le

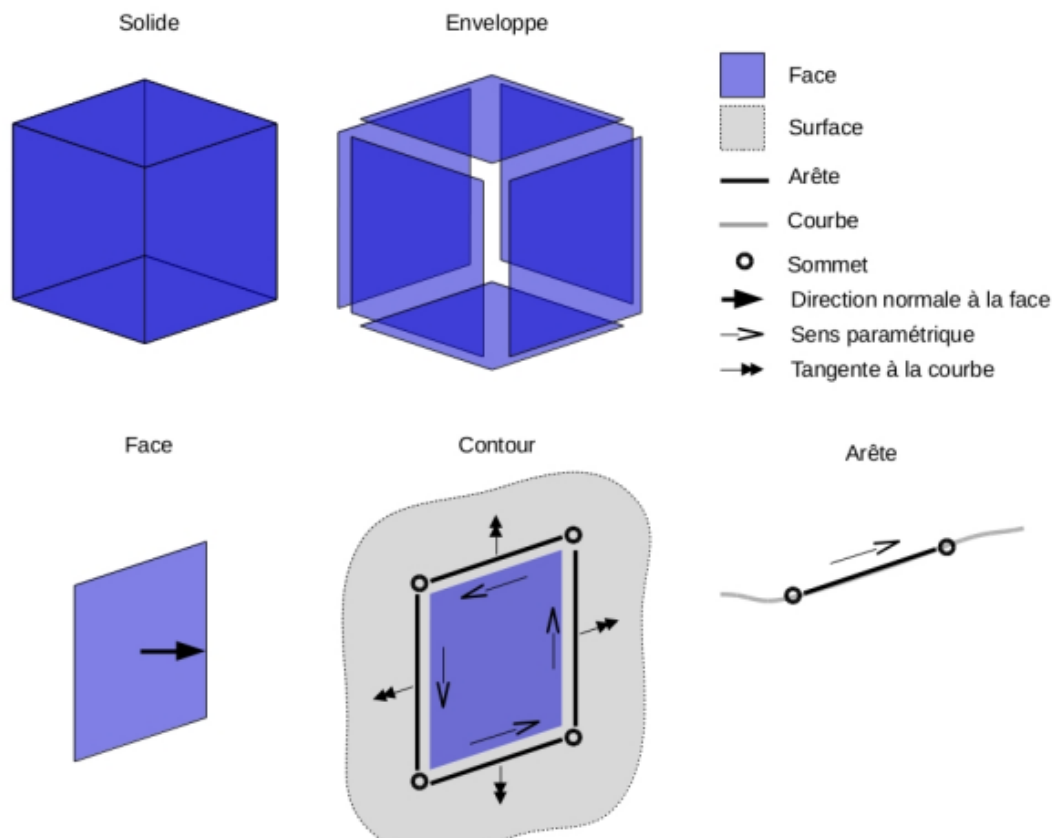


Figure 2: Structure du Boundary REPresentation (BREP)

sens et la connectivité du modèle. Cette notion de co-topologie permet ainsi l'unicité de la représentation topologique tout en préservant la connectivité et l'orientation des différents solides. Le concept de co-topologie est intégré à la plateforme numérique et permet de représenter le modèle particules/matrice comme un modèle multi-corps tout en préservant les liens d'interface particules/matrice.

4 Résultats et discussion

La plateforme numérique développée par l'équipe ERICCA génère automatiquement les données nécessaires pour utiliser les solveurs des codes EF Abaqus et Code_Aster. Pour cette étude, les éléments finis retenus pour le maillage des VES sont des tétraèdres quadratiques avec 4 ou 5 points de Gauss. Ce choix permet une meilleure approximation de la géométrie et des champs thermiques. Une fois les maillages réalisés, l'estimation de la conductivité effective des VES nécessite le choix des conditions aux limites (CL) et la définition des propriétés des phases du milieu hétérogène. En conformité avec la technique expérimentale de la PCG, des CL mixtes ont été imposées suivant les 3 axes du VES cubique (gradient thermique imposé sur 2 faces opposées, flux normal nul sur les 4 autres faces). On en déduit, pour chaque VES, 3 valeurs de conductivité en divisant le flux surfacique résultant par la norme du gradient thermique imposé. Les valeurs obtenues sont très proches pour chaque VES (écart maximum inférieur à 0.5%), ce qui confirme une quasi-isotropie des maillages. Pour chaque VES, on contrôle également l'isotropie de la distribution des orientations des particules (d'axe unitaire \vec{c}) en calculant la moyenne des tenseurs $\vec{c} \otimes \vec{c}$ dont la trace est unitaire. Cette moyenne est comparée au tiers du tenseur identité d'ordre 2 qui correspond à une distribution aléatoire (voir Figure 3, à titre d'exemple pour un VES).

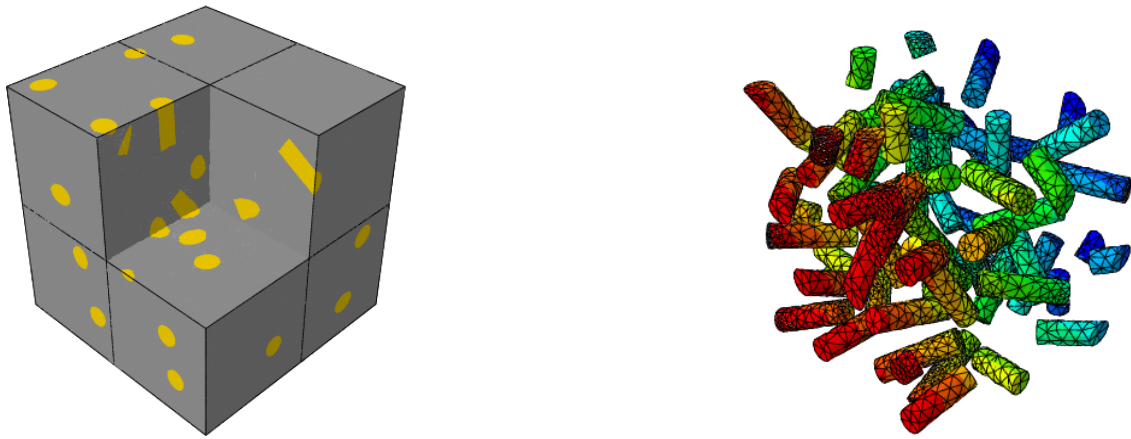


Figure 3: Exemple de VES pour un composite avec 9% de fibres cylindriques (66 particules).
 A gauche : modèle topologique avec $\langle \vec{c} \otimes \vec{c} \rangle_{11} = 0.332$; $\langle \vec{c} \otimes \vec{c} \rangle_{22} = 0.325$.
 A droite : champ de température projeté sur les particules pour un gradient imposé uniaxial.

La dernière étape, avant la confrontation avec les expériences obtenues dans [1], consiste à renseigner les valeurs des conductivités de la matrice et des particules de chènevotte en s'imposant la contrainte de n'ajuster qu'un ou deux paramètres. On retient, pour les particules une conductivité isotrope transverse avec un ratio L/T compris entre $3/2$ et 2 pour la conductivité dans le sens des fibres ($L\lambda_p$) et celle transverse ($T\lambda_p$) conformément aux mesures de [3] et [8] sur des matériaux de type balsa. Pour la matrice, on dispose de mesures sur des pâtes de chaux avec $E/C=0.5$ sans particule : $\lambda_m = 0.385 \pm 0.005 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$.

Les résultats illustrés par les figures 4 et 5 ont été obtenus sur une vingtaine de VES. Bien qu'il soit possible de fournir une distribution statistique de taille et de forme pour les particules, les maillages utilisés ont tous des particules identiques. Une dizaine pour des composites avec une fraction volumique de particules proche de 9% (Figure 3) avec en moyenne 70 particules et une dizaine pour des fractions comprises entre 16% et 18% avec en moyenne 135 particules. Dans une première hypothèse, on a figé la conductivité de la matrice ($\lambda_m=0.380 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$) ainsi que le ratio $L/T=2$. Les meilleurs résultats, obtenus pour $\lambda_p=0.02 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$, sont tracés à la figure 4. Sur ce graphe, les bornes de Voigt, de Reuss et de Hashin-Shtrikman (HS) sont tracées en ligne continue. On note, que classiquement pour ce type de microstructures, les estimations EF sont très proches de la borne supérieure de HS. Mais la valeur de la conductivité transverse des particules est trop faible pour être physiquement acceptable (inférieure à celle de l'air immobile à 300 K).

Dans une seconde hypothèse, on peut admettre que la présence de particules humides lors de l'élaboration des composites a modifié la prise du liant en augmentant faiblement sa porosité. Si l'on suppose que la conductivité de la matrice dépend de façon affine de la fraction volumique de particules, on obtient des résultats en meilleure conformité avec les mesures expérimentales. Ce résultat est illustré sur la figure 5 avec des valeurs de conductivité effective calculées par EF avec $L/T=3/2$, $\lambda_p=0.02 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ et, pour la matrice, $\lambda_m = 0.385 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ pour une pâte de chaux sans particule et $\lambda_m = 0.360 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ pour 20% de chènevotte en proportion volumique. Pour les particules de chènevotte, les valeurs imposées pour le tenseur de conductivité thermique correspondent à celles du balsa pour une masse volumique de 100 kg.m^{-3} [3]. Pour justifier davantage cette seconde hypothèse, il faudrait pouvoir mesurer localement la conductivité de la matrice des composites en utilisant un dispositif décrit

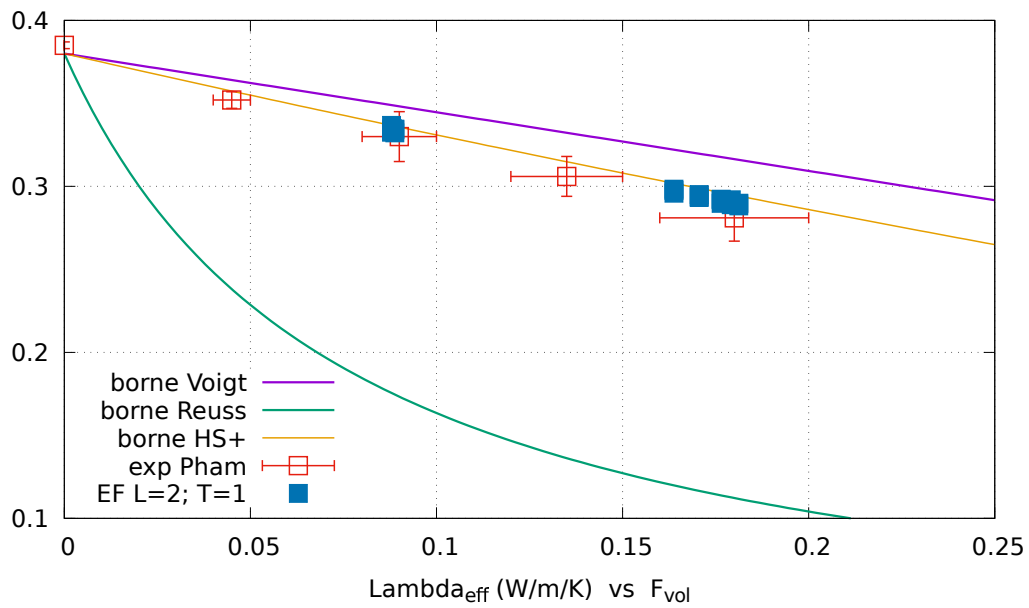


Figure 4: Conductivité thermique effective avec fibres anisotropes trop isolantes

dans [9] et/ou élaborer des composites avec des orientations non aléatoires pour observer, à l'échelle macroscopique, une anisotropie de la conductivité effective.

Une autre possibilité d'analyse serait d'introduire des propriétés spécifiques aux interfaces entre les particules et la matrice. L'étude présentée ici a supposé un "contact" idéal entre les phases (champ de température et composante normale du flux thermique continu aux interfaces). A moyen terme, les modèles EF construits seront utilisés pour analyser le comportement mécanique en élasticité de ces composites. Avec un contraste plus important sur les modules d'élasticité des phases de ces matériaux que sur les conductivités thermiques, on peut espérer obtenir avec cette démarche numérique, basée sur un nombre suffisant de VES, des résultats statistiques plus prédictifs que les bornes isotropes de Hashin-Shtrikman.

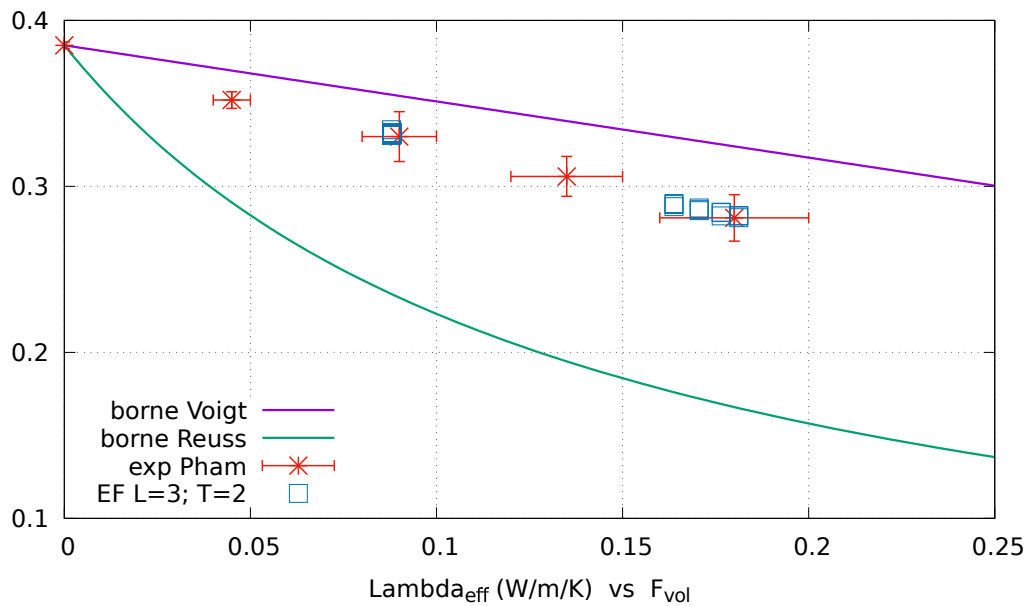


Figure 5: Conductivité thermique effective avec fibres anisotropes et matrice avec porosité variable. Les bornes de Voigt et Reuss ont été tracées avec $\lambda_m = 0.385 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$.

References

- [1] T. H. Pham, Modélisation multi-échelles des propriétés thermiques et élastiques de composites chaux-chanvre, Thèse de Doctorat, Université de Bretagne-Sud, 2014.
- [2] A. Couture, V. François, J.-C. Cuillère, Ph. Pilvin, Modélisation de la microstructure de composites particulières : Application à l'homogénéisation en conduction thermique, 13ème Colloque National en Calcul de Structures, Giens, 15-19 mai 2017.
- [3] P. Carré, R. Le Gall, Définition et détermination des conductivités thermiques dans les structures multicouches C.V.R. - balsa, Revue Générale de Thermique, vol. 340, pp. 211-215, 1990.
- [4] J.-C. Cuillère, V. François, Integration of CAD, FEA and Topology Optimization through a Unified Topological Model, Computer-Aided Design and Applications, pp. 493-508, 2014
- [5] A. Donev, S. Torquato, F.H. Stillinger, Neighbor list collision-driven molecular dynamics simulation for nonspherical hard particles, Journal of Computational Physics, pp. 737-764, 2005
- [6] <https://projectchrono.org>
- [7] <https://www.opencascade.com>
- [8] T.T. Nguyen, V. Picandet, P. Carré, T. Lecompte, S. Amziane, C. Baley, Effect of compaction on mechanical and thermal properties of hemp concrete, European Journal of Environmental and Civil Engineering, pp. 545-560, 2010
- [9] T. Pierre, M. Carin, International Journal of Thermal Sciences, Characterization of the thermal properties of millimeter-sized insulating materials, pp. 247-255, 2019