

Prédiction des propriétés effectives des biocomposites par homogénéisation numérique : prise en compte de l'interface

Mouhcine Haddad¹, Brahim Ismail¹, Naima Belayachi^{1*}

¹ Université d'Orléans, Université de Tours, INSA CVL, Laboratoire de Mécanique Gabriel Lamé, LaMé-EA7494, 8 rue Léonard de Vinci, 45072 Orléans, France. *naima.belayachi@univ-orleans.fr

RESUME

Les matériaux biosourcés à base de granulats végétaux, développés souvent pour l'isolation thermique et la réduction de la consommation d'énergie des bâtiments grâce à leurs propriétés thermiques et hydriques intéressantes, permettent de répondre aux critères réglementaires. Toutefois, leur comportement reste mal maîtrisé en raison de leur microstructure hétérogène et complexe et la variabilité des granulats végétaux.

La prédiction par homogénéisation numérique des propriétés effectives des biocomposites offre une alternative aux essais coûteux et permet, une fois validée, d'optimiser leur formulation tout en réduisant les campagnes expérimentales. L'objectif de ce travail est de proposer une approche d'homogénéisation numérique en intégrant une microstructure aléatoire représentant la structure réelle, composée de granulats de bois, de ciment, de porosité intergranulaire et de l'interface granulat-liant. Le volume élémentaire représentatif a été généré en considérant différentes morphologies de granulats dont la fraction volumique a été déterminée par une analyse d'image des coupes transversales. Les résultats obtenus montrent que la prise en compte de l'interface granulat-liant dans la modélisation permet de réduire l'écart entre les modules d'élasticité effectifs et expérimentaux, et qu'elle accentue l'influence de la forme des hétérogénéités sur les propriétés mécaniques.

Mots-clefs Biosourcés, interface, homogénéisation numérique, propriétés effectives, granulats de bois

I. INTRODUCTION

Le secteur du bâtiment fait face à plusieurs défis majeurs liés à quatre enjeux principaux : les émissions de gaz à effet de serre, la consommation croissante d'énergie, l'épuisement des ressources naturelles et la production de déchets (S. Amziane et al., 2016). Parmi les solutions proposées, la construction de bâtiments économes en énergie et résilients, équipés de systèmes de production d'énergie renouvelable, s'avère intéressante, bien que souvent très coûteuse. Une attention particulière doit ainsi être portée au choix des matériaux, en privilégiant ceux dont la production respecte les exigences des analyses de cycle de vie et les nouvelles exigences thermiques (Nozahic, 2012). Les matériaux biosourcés contribuent à la réduction des émissions de gaz à effet de serre, notamment grâce à l'absorption de CO₂ lors de la croissance des plantes à l'origine de leur production. Ils sont le plus souvent issus de ressources agricoles locales, ce qui permet également de limiter l'impact environnemental lié au transport (Belayachi et al., 2013). En

remplaçant des granulats traditionnels par des co-produits agricoles, leur production participe à la préservation des ressources naturelles granulaires. Ces matériaux présentent en outre des propriétés thermiques et hydriques intéressantes pour le confort hygrothermique des utilisateurs, ce qui explique leur développement croissant et l'intérêt qu'ils suscitent dans la littérature (Ismail et al., 2020 ; Williams et al., 2017). Cependant, leur comportement thermique et mécanique reste difficile à maîtriser en raison de leur microstructure hétérogène complexe, rendant la prédiction de leurs propriétés effectives thermiques et mécaniques difficile et nécessitant souvent de nombreux essais expérimentaux, coûteux en matière première et en temps de fabrication.

L'homogénéisation numérique repose sur la modélisation d'une microstructure contenant des inclusions distribuées aléatoirement. Les formes et tailles de ces inclusions sont choisies pour représenter fidèlement la microstructure réelle. Cette méthode est particulièrement adaptée à la prédiction des propriétés de matériaux fortement hétérogènes (Ismail et al., 2021). Plusieurs études soulignent l'importance de considérer l'interface liant-granat dans l'analyse de ces matériaux, car elle joue un rôle crucial dans le transfert des contraintes et influence directement les propriétés globales du matériau (Ismail et al., 2021 ; Akkaoui et al., 2017). Des défauts ou des variations à cette interface peuvent entraîner des concentrations de contraintes, affecter la fissuration et réduire les performances du matériau.

L'objectif de ce travail est de prédire les propriétés thermiques et mécaniques de biocomposites à base de granulats de bois et de ciment en utilisant la méthode d'homogénéisation numérique. Une attention particulière est portée à l'intégration de l'interface liant-granat dans le modèle numérique, en particulier pour la modélisation du comportement mécanique à l'échelle du volume élémentaire représentatif. Le ciment, utilisé comme liant, est mélangé à des granulats de bois de tailles différentes pour l'obtention des biocomposites. Pour confronter les résultats numériques aux données expérimentales, une microstructure aléatoire a été générée. Elle intègre des inclusions de formes variées, avec une interface modélisée comme un matériau cohésif d'épaisseur nulle. Deux essais expérimentaux, d'arrachement et de traction, ont été réalisés afin de caractériser le comportement mécanique de l'interface. Une analyse inverse a ensuite permis d'identifier les paramètres de l'interphase, intégrés par la suite dans le modèle micromécanique.

II. Matériaux et méthodes expérimentales et numériques

Le travail s'appuie sur deux approches complémentaires : une phase expérimentale, dédiée à l'identification des paramètres des modèles et à la validation des résultats numériques, et une phase numérique, basée sur l'analyse par éléments finis pour la modélisation micromécanique et la prédiction des propriétés effectives.

A. Matériaux et caractérisation expérimentale

Le biocomposite étudié dans ce travail est basé sur des granulats de bois de chêne recyclé et de ciment, désigné selon son appellation commerciale : CEM II 32.5 R. La distribution granulométrique (Fig.1) des deux types de granulats (fin et grossiers) a été déterminée par la technique de traitement d'image proposée par les recommandations RILEM (Amziane et al., 2017). La valeur moyenne de l'élançement a été déterminée comme la moyenne des élançements

individuels de chaque particule. Elle est égale à 2,63 pour les granulats grossiers et à 4,35 pour les granulats fins. La masse volumique des granulats de bois, mesurée conformément aux recommandations de la RILEM (Amziane et al., 2017), est de 414,04 kg/m³ pour les granulats fins et de 208,75 kg/m³ pour les granulats grossiers.

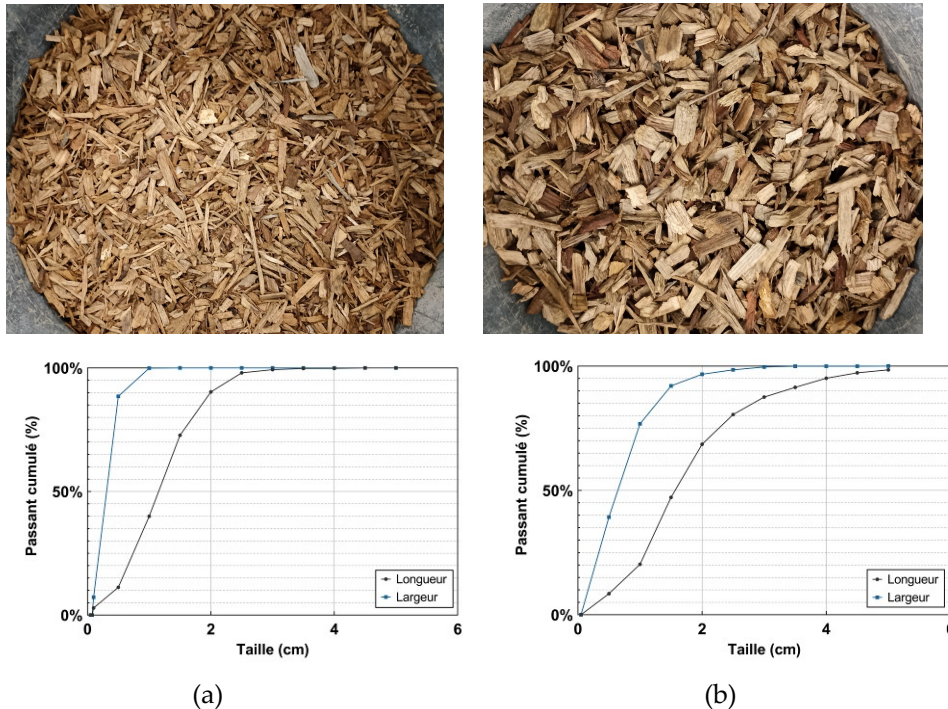


FIGURE 1. Granulats de bois fin et grossiers et leur distribution granulaire à partir de la méthode de la RILEM, (a) granulats fins et (b) granulats grossiers.

Deux biocomposites ont été préparés à partir de granulats de bois, fins et grossiers, et de ciment, selon la formulation proposée par Akkaoui et al., 2017. Le rapport eau/ciment a été 0.5, et le rapport granulat de bois/ciment à 0.36. Le tableau 1 présente la désignation des biocomposites ainsi que des mélanges préparés pour les échantillons de la caractérisation thermique et mécanique.

TABLEAU 1. Mélanges granulats de bois-liant et formulation

Biocomposites de bois	Granulats de bois	Eau/Ciment	Granulat/Ciment	Masse volumique à l'état frais (kg/m ³)
CF	fins	0.5	0.36	1018.33
CG	grossiers			1031.67

Des échantillons cubiques de 10 x 10 x 10 cm³ ont été préparés en vue des essais de compression uni-axiale et de conductivité thermique, après une cure de 28 jours dans une salle à température et humidité constante de (20 °C et 60 %). L'essai de compression uni-axiale a été réalisé avec une vitesse de déplacement constante de 0.5 mm/min en utilisant une presse INSTRON équipée d'un capteur de 250 KN (Fig. 2). Pour la mesure de conductivité thermique, la méthode du fil chaud a été utilisée (Fig. 2). Les essais ont été réalisés après un séchage à 60 °C jusqu'à stabilisation de la masse. Bien que cette température ne permette pas un séchage complet, elle assure un état hydrique uniforme des échantillons lors des essais.

Pour identifier les paramètres de l'interface ciment-bois, des essais de traction et d'arrachement ont été réalisés sur des échantillons spécifiques comme le montre la Fig. 3.



FIGURE 2. Test de compression uni-axiale (à gauche), test de conductivité thermique (à droite)

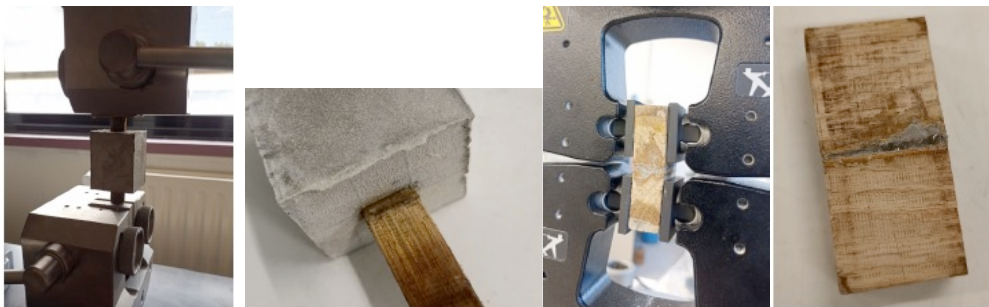


FIGURE 3. Test d'arrachement (à gauche), test de traction (à droite)

B. Homogénéisation numérique

Afin de prédire les propriétés effectives des biocomposites par homogénéisation, différentes microstructures ont été générées en utilisant le logiciel DIGIMAT. L'orientation des inclusions est choisie aléatoire en 2D. Pour la génération du VER périodique, les inclusions de bois sont générées en premier, suivies de la porosité intergranulaire. La taille du VER a été déterminée par une méthode statistique développée par (Gitman et al., 2007) pour le module d'Young et la conductivité thermique.

La Fig. 4 présente des exemples de microstructures générées en 2D et utilisées pour les simulations éléments finis pour le biocomposite à base de granulats fin (CF) ou de granulats grossiers (CG).

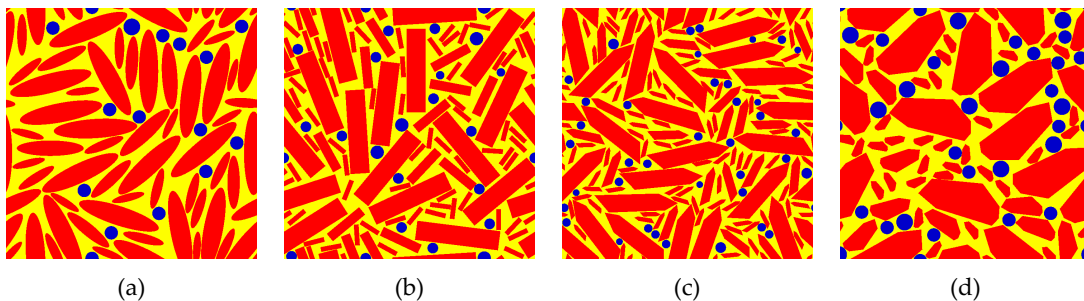


FIGURE 4. Exemples de microstructures générées pour le composite CF avec des inclusions (a) elliptiques, (b) rectangulaires, (c) de forme réelle représentative, et (d) pour le composite CG avec des inclusions de forme réelle représentative. La porosité est représentée en bleu, les inclusions de bois en rouge et la matrice (ciment) en jaune, le VER ayant une taille de 30x30 mm².

La taille du VER utilisé pour le calcul du module d'Young effectif et de la conductivité thermique effective est de $30 \times 30 \text{ mm}^2$. La Fig. 5 montre que, à partir de cette dimension, les propriétés effectives se stabilisent et l'écart type diminue significativement. Pour chaque taille de VER, cinq microstructures distinctes, comportant des inclusions orientées aléatoirement, ont été générées. Les calculs ont été effectués à partir de ces microstructures, en utilisant des inclusions elliptiques avec un élanement de 4.35 pour les granulats fins et de 2.63 pour les granulats grossiers.

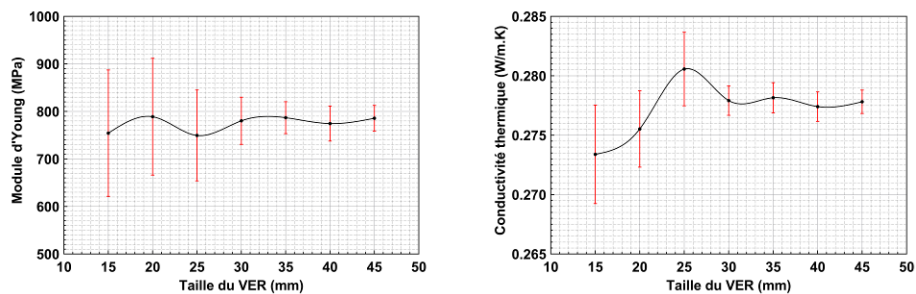


FIGURE 5. Variations des propriétés effectives en fonction de la taille du VER pour le biocomposite CG.

Pour déterminer la fraction volumique utilisée dans la génération des VER de calcul, une méthode par analyse d'image de la coupe transversale des biocomposites a été utilisée. Pour chaque matériau, un échantillon a été coupé en 5 parties d'une taille de $(10\text{cm} \times 10\text{cm} \times 2\text{cm})$ d'épaisseur). Les images correspondant aux photos prises pour chaque face ont été traitées par le logiciel imageJ pour le seuillage et la détermination de la fraction volumique des granulats de bois (Fig. 6) utilisée ensuite dans le logiciel DIGMAT pour la génération de la microstructure (tableau 2).



FIGURE 6. Exemple d'image de la face transversale des biocomposites avant et après seuillage.

La porosité intergranulaire représentée avec des inclusions circulaires a été déterminée, après identification expérimentale de la porosité intragranulaire de la matrice cimentaire et la porosité totale des biocomposites en utilisant la méthode de mesure de porosité accessible à l'eau par pesée hydrostatique et des densités au pycnomètre. La porosité des granulats de bois, fixée à 37.6%, a été extraite dans la littérature (Guo et al., 2020). Les porosités totales et intergranulaires sont présentées également dans le tableau 2. Pour le comportement mécanique élastique, l'interface liant-granulat a été considérée de deux manières différentes parfaite et en interphase.

La détermination des paramètres de l'interface ciment-bois, à savoir la rigidité normale et la rigidité tangentielle, a été réalisée à partir d'essais de traction et d'arrachement, suivis d'une analyse inverse menée sous le logiciel ABAQUS.

TABLEAU 2. Fractions volumiques des granulats de bois des biocomposites étudiés

Biocomposites de bois	Fraction volumique des granulats de bois	Nombre d'image traitées (déviations)	Porosité totale	Porosité intergranulaire
CF	60.84 %	6 (2.84 %)	41.07 %	3.41 %
CG	59.55 %	4.29 %	43.89 %	8.13 %

La démarche adoptée pour le calcul thermique est similaire à celle utilisée en élasticité pour la génération de la microstructure, la taille du VER et la forme des inclusions, mais sans prise en compte de l'interface. Le maillage utilisé est constitué d'éléments triangulaires de taille 0.2 mm. Cette taille a été retenue après une étude comparative prenant en compte la précision des résultats et un temps de calcul optimal (Fig. 7).

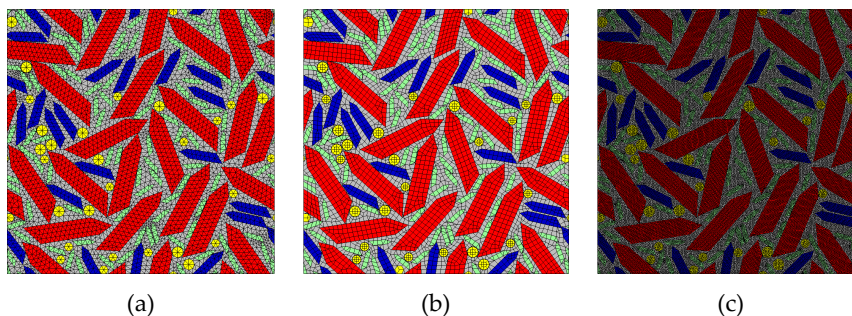


FIGURE 7. (a) Maillage triangulaire avec une taille de 0.5 mm, (b) maillage quadrilatère de taille 0.5 mm, (c) maillage triangulaire de taille 0.15 mm

Les propriétés des différentes phases utilisées pour l'analyse éléments finis ont été déterminées expérimentalement ou prises à partir de la littérature sont présentées dans le tableau 3. Les propriétés ont été mesurées après un séchage à 60 °C jusqu'à stabilisation de la masse pour éviter un choc thermique induisant des microfissures.

TABLEAU 3. Propriétés des différentes phases utilisées pour l'analyse par éléments finis

Constituants	Conductivité thermique W/m.k	Module d'Young MPa	Coefficient de poisson	Rigidité normale MPa/mm	Rigidité tangentielle MPa/mm
Matrice cimentaire	0.436 (Expérimental)	900 (Expérimental)	0.2 (Akkaoui, 2014)	-	-
Granulat bois	0.262 (Peron et al., 2020)	5166.7 (Bartolucci et al., 2020)	0.3 (Bartolucci et al., 2020)	-	-
Air	0.026 (Ismail, 2021)	10 ⁻⁶ (Ismail, 2021)	0.001 (Ismail, 2021)	-	-
Interface/interphase	-	-	-	1.695 (Expérimental)	69.53 (Expérimental)

III. Résultats et discussion

La Fig. 8 présente l'influence de la forme des inclusions sur les propriétés mécaniques effectives (le module d'Young) pour les deux biocomposites CF (granulats fins) et CG (granulats grossiers), en considérant ou non la présence d'une interphase.

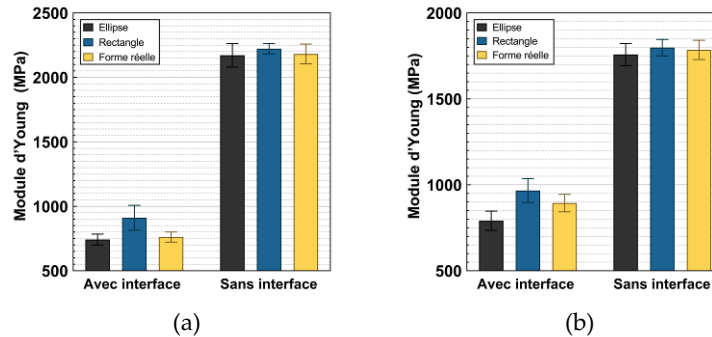


FIGURE 8. Comparaison du module d'Young effectif pour différentes formes d'inclusion : (a) CF, (b) CG.

Pour le cas d'interface parfaite, l'influence de la forme des inclusions sur le module d'Young effectif est très faible pour les deux biocomposites. Ces mêmes résultats ont été montrés par d'autres auteurs (Mom, 2013) pour des composites à base de chanvre ou il n'était pas nécessaire de prendre en compte la forme des particules dans le cas d'une orientation aléatoire. En revanche, lorsque l'interphase est prise en compte, l'influence de la forme des inclusions sur le module effectif devient significative. La comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux est présentée dans le Tableau 4 pour les deux types de biocomposites.

TABLEAU 4. Comparaison entre le module d'Young effectif et expérimental pour le composite à base de ciment et granulats fin (CF) et grossiers (CG)

Composite	Interface	Forme des inclusions	Module d'Young Effectif MPa	Module d'Young expérimental MPa	Erreur relative (%)
CF	Parfaite	Ellipse	2171.42	258.07	741.40
		Rectangle	2222.20		761.08
		Forme réelle	2181.88		745.45
	Avec interface	Ellipse	741.93		187.49
		Rectangle	911.21		253.08
		Forme réelle	761.36		195.02
CG	Parfaite	Ellipse	1757.84	352.96	398.03
		Rectangle	1797.77		409.35
		Forme réelle	1784.87		405.69
	Avec interface	Ellipse	791.24		124.18
		Rectangle	966.39		173.80
		Forme réelle	893.89		153.26

Dans le cas d'une interface parfaite, le module d'élasticité effectif est largement surestimé par rapport aux valeurs expérimentales, quelle que soit la forme des inclusions. Cet écart est particulièrement marqué pour le composite contenant des granulats fins, dont la surface spécifique est plus élevée que celle des granulats grossiers. L'introduction de l'interphase dans la modélisation permet de réduire cet écart.

Pour le composite à granulats fins (CF) avec des inclusions de forme réelle, l'erreur relative passe de 745.45% à 195.02%, soit une diminution de 73.84%. Pour le composite à granulats grossiers (CG) avec la même forme d'inclusion, l'erreur passe de 405.69% à 153.26%, soit une diminution de 62.22%. Cette réduction moins significative dans le cas du composite CG, en raison de la surface spécifique plus faible des granulats grossiers. En effet, une surface spécifique plus faible se traduit par une surface totale d'interface plus réduite, limitant ainsi son influence sur le comportement du biocomposite. Cependant, même en tenant compte de l'interface, les modules effectifs restent surestimés pour les deux biocomposites. Cette surestimation peut être expliquée par la fissuration de l'interface granulats-liant induite par le retrait des granulats de bois pendant le séchage, comme illustré en Fig. 9. Ce phénomène est lié à l'absorption d'eau très forte des granulats végétaux. Ces observations concordent avec ceux de (Frybort et al., 2012), qui ont montré, dans le cas des composites bois-ciment à base de brins d'épicéa, que seule une partie de l'interface bois-ciment participait réellement au transfert de charge, en raison du retrait du bois. Transposé à notre cas, cela suggère que l'interface granulats-liant n'est que partiellement efficace, ce qui remet en cause l'hypothèse du comportement élastique linéaire de l'interface utilisée lors de la modélisation.

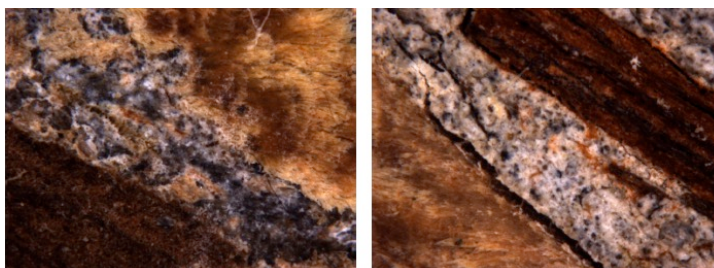


FIGURE 9. Observation microscopique du composite ciment-bois avant séchage (à gauche) et après séchage avec fissuration (à droite)

Un autre phénomène pouvant contribuer à cet écart réside dans les interactions chimiques entre les particules végétales et le liant. En effet, certaines particules végétales peuvent inhiber l'hydratation et la prise du ciment (Jorge et al., 2004 ; Akkaoui et al., 2017), ce qui modifie le comportement de la matrice cimentaire en présence de particules végétales. La Fig. 10 présente les résultats de la conductivité thermique effective pour les deux biocomposites étudiés avec différentes formes d'inclusions.

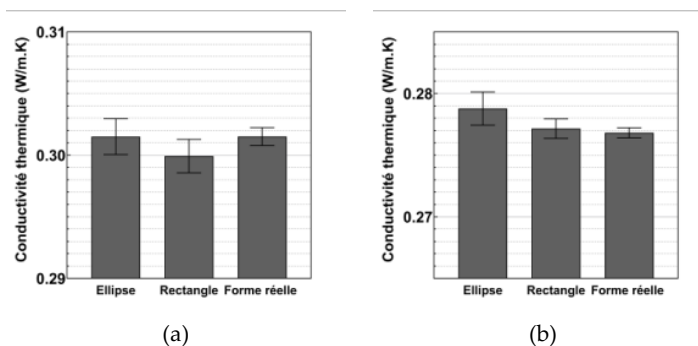


FIGURE 10. Influence de la forme des inclusions sur la conductivité thermique effective des biocomposites : (a) CF, (b) CG

La conductivité thermique effective, calculée à partir des microstructures générées, ne présente pas de variation significative en fonction de la forme des hétérogénéités de bois (Fig. 10). La

comparaison entre les résultats expérimentaux et numériques, présentée dans le tableau 5 pour les deux biocomposites, met en évidence une surestimation de la conductivité thermique, avec un écart plus marqué pour le composite à granulats fins - comme cela a également été observé pour les propriétés mécaniques. Cette surestimation peut s'expliquer par la microstructure adoptée dans la modélisation thermique, basée sur l'hypothèse d'une interface parfaite. Or, comme le montre la Fig. 9, un vide est observable entre les granulats de bois et la matrice cimentaire, ce qui n'a pas été pris en compte dans le modèle thermique. Ainsi, l'absence de représentation de la fissuration ou des discontinuités à l'interface granulat-matrice pourrait être à l'origine de l'écart observé entre simulation et expérience.

TABLEAU 5. Comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux pour la conductivité thermique effective pour le composite à base de ciment et granulats fin (CF) et grossiers (CG)

Composite	Forme des inclusions	Conductivité thermique effective W/m.k	Conductivité thermique expérimentale W/m.k	Erreur relative (%)
CF	Ellipse	0.3014	0.1814	66.22
	Rectangle	0.2999		65.35
	Forme réelle	0.3015		66.22
CG	Ellipse	0.2788	0.1963	42.04
	Rectangle	0.2771		41.21
	Forme réelle	0.2768		41.04

VI. Conclusion

L'étude menée porte sur l'influence de la microstructure et de l'interface liant-granulat sur la prédiction des propriétés effectives des matériaux biosourcés. Les biocomposites considérés dans ce travail sont basés sur liant de ciment et des granulats de bois fins et grossiers. L'interface a été prise en compte avec des rigidités normales et tangentielles déterminées expérimentalement dans les simulations mécaniques. Les études de sensibilité, menées par homogénéisation numérique à partir d'analyses par éléments finis sur différentes microstructures, montrent que la forme des inclusions n'a pas d'influence significative lorsque l'interface est considérée comme parfaite. En revanche, l'impact de la forme devient notable dès lors que l'interphase est prise en compte.

Par ailleurs, les résultats ont mis en évidence les limites du modèle adopté, en effet, la fissuration de l'interface granulat de bois-liant, induite par le retrait au séchage des granulats, n'a pas été prise en compte dans les simulations, ce qui a conduit à une surestimation des propriétés effectives. La continuité de ce travail sera donc de considérer une microstructure prenant en compte cette micro-fissuration, dans le but de modéliser le comportement mécanique non linéaire et thermique des biocomposites en incluant les effets d'endommagement à l'interface.

REMERCIEMENTS

Les auteurs remercient « La Région Centre Val de Loire » pour le soutien financier du projet de recherche PROPICE.

REFERENCES

A., Akkaoui, S. Caré, M. Vandamme, 2017. Experimental and micromechanical analysis of the elastic properties of wood-aggregate concrete, *Const. and Build. Mat.*, 134, 346-357.

B. Ismail, N. Belayachi, D. Hoxha, 2020. Optimizing performance of insulation materials based on wheat straw, lime and gypsum plaster composites using natural additives. *Constr. Build. Mater.* 254, 118959.

B. Ismail, N. Belayachi, D. Hoxha, 2021. Modelling of thermal conductivity and nonlinear mechanical behaviour of straw insulation composite by a numerical homogenization approach ». *Journal of building engineering* 43: 103144. <https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2021.103144>.

B. Bartolucci, A. De Rosa, C. Bertolin, F. Berto, F. Penta, et A. M. Siani, « Mechanical properties of the most common European woods: a literature review », *Frat. Ed Integrità Strutt.*, vol. 14, no 54, p. 249-274, 2020.

F. Peron, P. Bison, M. De Bei, et P. Romagnoni, « Thermal properties of wood: measurements by transient plane source method in dry and wet conditions », in *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, vol. 1599, no 1, p. 012050.

Frybort, S., Mauritz, R., Teischinger, A., and Müller, U. (2012). "Investigation of the mechanical interactions at the interface of wood-cement composites by means of electronic speckle pattern interferometry," *BioRes.* 7(2), 2483-2495.

F. C. Jorge, C. Pereira, et J. M. F. Ferreira, « Wood-cement composites: a review », *Holz Als Roh- Werkst.*, vol. 62, no 5, p. 370-377, 2004.

L. Guo, H. Cheng, J. Chen, W. Chen, et J. Zhao, « Pore structure characterization of oak via X-ray computed tomography », *BioResources*, vol. 15, no 2, p. 3053-3063, 2020.

I. M. Gitman, H. Askes, et L. J. Sluys, 2007. Representative volume: Existence and size determination, *Eng. Fract. Mech.*, vol. 74, no 16, p. 2518-2534.

J. Williams, M. Lawrence, P. Walker, 2017. The influence of the casting process on the internal structure and physical properties of hemp-lime. *Mater. Struct.* 50, 1-10.

N. Belayachi, M. Bouasker, D. Hoxha, M. Al-Mukhtar, 2013. Thermo-mechanical behaviour of an innovant straw lime composite for thermal insulation applications. *Appl. Mech. Mater.* 390, 542–546.

S. Amziane et M. Sonebi, 2016. « Overview on biobased building material made with plant aggregate », *RILEM*.

S. Amziane, F. Collet, M. Lawrence, C. Magniont, V. Picandet, et M. Sonebi, 2017. Recommendation of the RILEM TC 236-BBM: characterisation testing of hemp shiv to determine the initial water content, water absorption, dry density, particle size distribution and thermal conductivity, *Mater. Struct.*, vol. 50, no 3, 1-11.

S. Mom, 2013. Modèle d'homogénéisation itérative numérique pour des milieux non linéaires morphologiquement riches : application aux comportements de bétons de chanvre », Université Paris 6.

V. Nozahic, 2012. Vers une nouvelle démarche de conception des bétons de végétaux lignocellulosiques basée sur la compréhension et l'amélioration de l'interface liant/végétal: application à des granulats de chenevotte et de tige de tournesol associés à un liant ponce/chaux , Université Blaise Pascal-Clermont-Ferrand.