



**HAL**  
open science

# MODELISATION NUMERIQUE DU COMPORTEMENT MECANIQUE DE SYSTEMES ENCHEVETRES

Carine Barbier

► **To cite this version:**

Carine Barbier. MODELISATION NUMERIQUE DU COMPORTEMENT MECANIQUE DE SYSTEMES ENCHEVETRES. Matériaux. Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG, 2008. Français. NNT: . tel-00396414

**HAL Id: tel-00396414**

**<https://theses.hal.science/tel-00396414>**

Submitted on 18 Jun 2009

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

**INSTITUT POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE**

**N° attribué par la bibliothèque**

□□□□□□□□□□

**THESE**

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'Institut polytechnique de Grenoble**

***Spécialité : « Matériaux, Mécanique, Génie civil, Electrochimie »***

préparée au laboratoire SIMAP - Sciences et Ingénierie des Matériaux et des Procédés

dans le cadre de **l'Ecole Doctorale** « *Ingénierie - Matériaux, Mécanique, Environnement, Energétique, Procédés, Production* »

présentée et soutenue publiquement

par

Carine BARBIER

le 19 novembre 2008

**MODELISATION NUMERIQUE DU COMPORTEMENT MECANIQUE DE SYSTEMES ENCHEVETRES**

**DIRECTEUR DE THESE : David RODNEY**  
**CO-DIRECTEUR DE THESE : Rémy DENDIEVEL**

**JURY**

M. C. Geindreau	, Président
Mme. D. Poquillon	, Rapporteur
M. B. Haussy	, Rapporteur
M. D. Rodney	, Directeur de thèse
M. R. Dendievel	, Co-encadrant
M. D. Durville	, Examineur



# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 Bibliographie</b>	<b>3</b>
1.1 Exemples . . . . .	3
1.2 Empilements de fibres et percolation mécanique . . . . .	5
1.2.1 Approche géométrique : théorie du volume exclu . . . . .	5
1.2.2 Approche mécanique . . . . .	9
1.3 Modèles analytiques du comportement mécanique d'ensembles de fibres longues .	10
1.3.1 Forces aux contacts . . . . .	11
1.3.2 Déformation imposée . . . . .	13
1.3.3 D'autres approches . . . . .	13
1.4 Modèles numériques du comportement mécanique d'ensembles de fibres longues .	15
1.5 Analyse d'images . . . . .	21
1.5.1 Orientation des fibres sur des images 2D . . . . .	21
1.5.2 Orientation des fibres sur des images 3D . . . . .	24
<b>2 Le modèle numérique</b>	<b>27</b>
2.1 Modèle de fibres . . . . .	27
2.1.1 Energie potentielle . . . . .	28
2.1.2 Forces et tenseur des contraintes . . . . .	28
2.2 Comportement d'une fibre isolée . . . . .	30
2.2.1 La traction . . . . .	31
2.2.2 La flexion . . . . .	31
2.2.3 Le flambement . . . . .	33
2.2.4 Relations entre les grandeurs du modèle . . . . .	34
2.2.5 Normalisation . . . . .	34
2.3 Génération d'un ensemble de fibres . . . . .	34
2.4 Evolution d'un ensemble de fibres . . . . .	35
2.4.1 Procédure pour atteindre l'état d'équilibre . . . . .	36

2.4.2	Sollicitations imposées . . . . .	37
2.5	Frottement . . . . .	38
<b>3</b>	<b>Résultats</b>	<b>43</b>
3.1	Courbes typiques et influence des paramètres numériques . . . . .	43
3.1.1	Evolutions typiques . . . . .	43
3.1.2	Reproductibilité . . . . .	45
3.1.3	Effets de la discrétisation et de la constante de flexion . . . . .	45
3.2	Comportement en compression et percolation mécanique . . . . .	47
3.2.1	Description de la transition . . . . .	47
3.2.2	Description des ensembles de fibres . . . . .	48
3.2.3	Fraction volumique de percolation mécanique en fonction du rapport de forme . . . . .	49
3.2.4	Nombre de contacts par fibre . . . . .	50
3.2.5	Pression . . . . .	51
3.3	Effets du frottement sur les courbes de compression . . . . .	52
3.3.1	Sur la fraction volumique à la transition et le nombre de contacts . . . . .	53
3.3.2	Sur l'hystérésis . . . . .	56
3.4	Effets du frottement sur les modules élastiques . . . . .	58
3.4.1	Module de compressibilité . . . . .	59
3.4.2	Module de cisaillement . . . . .	60
<b>4</b>	<b>Echantillons numériques pour l'analyse d'images</b>	<b>65</b>
4.1	Obtention d'images 3D d'échantillons . . . . .	65
4.1.1	Echantillons réels (laines d'acier) . . . . .	65
4.1.2	Echantillons modèles . . . . .	66
4.2	Détermination de l'orientation des fibres simulées . . . . .	67
4.2.1	Autocorrélation . . . . .	71
4.2.2	Squelettisation . . . . .	72
4.3	Détermination du nombre de contacts . . . . .	73
4.3.1	Par la longueur des segments du squelette . . . . .	75
4.3.2	Par la mesure de la courbure du contour des fibres (J.P. Masse) . . . . .	76
4.4	Application des outils d'analyse aux images d'échantillons réels . . . . .	78
4.4.1	Orientation des fibres . . . . .	78
4.4.2	Nombre de contacts . . . . .	79
	<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>83</b>

**Bibliographie**



# Introduction

Il n'y a pas de définition précise d'un matériau enchevêtré. D'une façon générale, on peut regrouper sous cette appellation des matériaux (ou des systèmes) qui se présentent sous la forme d'un assemblage plus ou moins ordonné de fibres. Le terme « enchevêtré » renvoie plus précisément aux caractéristiques suivantes : les fibres présentent de grands rapports de forme, sont flexibles, sont en contact et les propriétés de l'ensemble sont intimement liées à la nature, au nombre et à l'évolution de ces contacts inter-fibres.

Le champ d'investigation est très large, des matériaux industriels (laine de verre, laines métalliques, feutre, papier, ...) jusqu'à des systèmes biologiques (tissus humains, cytosquelette, ...) en passant par des matériaux naturels (fibres animales, végétales pour les textiles notamment, ...). Ces systèmes enchevêtrés peuvent être considérés en tant que tels : c'est par exemple le cas des laines d'acier ou des laines de verre. Ils peuvent aussi apparaître comme renfort d'un matériau : c'est le cas des fibres pour les composites. Même dans le deuxième cas, il est clair que les propriétés globales sont directement liées aux propriétés effectives du réseau de fibres. Dans cette thèse, nous nous intéresserons uniquement à ce réseau de fibres (sans lien fort entre fibres de type pontage chimique) et à ses propriétés mécaniques. Nous nous restreindrons de plus à des assemblages désordonnés, excluant de fait tout ce qui concerne les assemblages réguliers tels que les tissages, pour lesquels plusieurs approches spécifiques ont été développées.

Ces systèmes enchevêtrés, outre la nature des fibres, sont très divers, que ce soit en termes d'échelle (de l'échelle nano pour des enchevêtrements de nanotubes de carbone à des échelles microscopiques pour les laines de verre), ou que ce soit en termes d'application visée (renfort, conduction électrique, isolation thermique). Sous plusieurs aspects, ils sont assez proches des matériaux cellulaires, ne serait-ce qu'en raison de leur faible densité et de leur architecture discrète. Pour ces derniers cependant, les vingt dernières années ont vu une véritable explosion d'études expérimentales et de modélisation, dans la foulée des travaux de Gibson & Ashby. Dans le domaine des matériaux enchevêtrés, rien de tel encore. La plupart des questions sont encore largement ouvertes, que ce soit en terme de phénoménologie du comportement, de compréhension des mécanismes élémentaires ou de modélisation.

La littérature consacrée demeure encore très restreinte. Qui plus est, on retrouve souvent cette littérature cantonnée à des domaines très spécialisés, tels que, par exemple, le textile. Le premier chapitre de cette thèse sera consacré à une revue bibliographique sur les propriétés mécaniques de ces systèmes enchevêtrés. On verra notamment que les résultats des travaux pionniers dans le domaine font encore référence et qu'on a du mal à dépasser les simples lois d'échelles issues d'analyses dimensionnelles. Depuis peu, toutefois, plusieurs approches numériques ont été développées.

C'est dans ce domaine des approches numériques que se place cette thèse. L'idée est de discrétiser les fibres en éléments simples (en l'occurrence des segments) et d'envisager le comportement de ces éléments simples : traction/compression, flexion, et non-recouvrement. L'évolution de ces éléments sera pilotée de façon analogue à ce qui se fait en dynamique moléculaire ou en dynamique

particulaire. Dans le chapitre 2, nous décrivons le modèles. Nous vérifierons que la discrétisation utilisée permet de rendre compte de manière satisfaisante du comportement individuel des fibres.

Dans le chapitre 3, nous appliquerons la modélisation mise en place à des systèmes de plusieurs centaines de fibres, générées aléatoirement dans des volumes d'étude cubiques. Nous essaierons d'identifier les principales caractéristiques de la réponse mécanique d'un tel assemblage soumis à des sollicitations simples telles que la compression isostatique ou le cisaillement. Nous distinguerons deux régimes. Le premier autour d'une fraction volumique critique de fibres, fraction pour laquelle apparaît une résistance mécanique. L'existence de ce seuil de percolation mécanique, à distinguer de la percolation « géométrique » plus couramment étudiée pour ce genre de milieux, sera discutée en fonction de paramètres « matériaux » tels que le rapport de forme ou le coefficient de frottement entre fibres. Le second régime étudié se situe au-delà de ce seuil de percolation. Nous mettrons en évidence des lois d'échelle analogues à celles développées pour les matériaux cellulaires de même que l'évolution du nombre de contacts en fonction de la fraction volumique de fibres. Ces évolutions seront également discutées en fonction des rapports de forme et du frottement.

La notion de nombre de contacts entre fibres est une des caractéristiques essentielles de ces enchevêtrements : on comprend qu'elle est fortement liée à leur réponse mécanique. On devine aussi qu'elle doit piloter d'autres propriétés, telles que les propriétés de conduction électrique ou thermique. Le problème est que les prédictions sur ce nombre de contacts en cours de déformation sont difficilement vérifiables expérimentalement. En parallèle de cette thèse, a été développée au laboratoire une procédure d'analyse d'images susceptible de détecter ces contacts. Cette procédure doit pouvoir s'appliquer sur des images tridimensionnelles obtenues par microtomographie aux rayons X sur des laines d'acier. Restait à valider cette méthode sur des échantillons numériques modèles, issus précisément de nos simulations. Cette validation est présentée au chapitre 4.

# Chapitre 1

## Bibliographie

Le terme « système enchevêtré » regroupe un grand nombre de matériaux ayant pour principale caractéristique d'être constitués d'objets de grand rapport de forme, c'est-à-dire ayant une dimension largement supérieure aux autres. Le rapport de forme est en général supérieur à 100 et peut atteindre plusieurs milliers. Mais cette grandeur est loin d'être suffisante pour caractériser les systèmes enchevêtrés au vu de leur grande diversité. Il convient aussi de déterminer si les fibres ont des liens permanents entre elles, si elles sont flexibles ou rigides, droites ou courbes, orientées aléatoirement dans le milieu ou, au contraire suivent un arrangement plus ou moins régulier... Une autre importante distinction est l'inclusion ou non des fibres dans une matrice (polymère, ciment, céramique...). Le cas de fibres immergées dans une matrice ne sera pas traité dans cette thèse. Afin de mieux appréhender ce type de matériau quelques exemples seront donnés dans le premier paragraphe. Le second paragraphe (§ 1.2) sera consacré à la présentation des grandeurs caractéristiques (fractions volumiques critiques, nombre de contacts) d'un ensemble de fibres. Dans les paragraphes suivants seront abordés les modèles analytiques (§ 1.3) et numériques (§ 1.4) du comportement d'ensembles de fibres longues en compression et en cisaillement. Enfin, le dernier paragraphe sera consacré à l'analyse d'images, maillon essentiel pour comparer les structures des échantillons réels à celles de leurs homologues numériques.

### 1.1 Exemples

Nous allons nous intéresser aux milieux enchevêtrés dont les fibres sont sans lien permanent entre elles et ne sont pas immergées dans une matrice. L'étude de la compression de ces matériaux a commencé voilà plusieurs décennies. Mais l'évolution à l'échelle microscopique (déformation des fibres, réarrangements...) reste encore mal connue. Dès 1938, Schofield utilise de la laine de mouton et énonce la première loi empirique reliant la hauteur de l'échantillon à la charge qui lui est appliquée [1]. Van Wyk se sert du même matériau pour vérifier le premier modèle analytique [2] (développé plus en détail dans le paragraphe 1.3). On peut également citer comme exemples les laines synthétiques, typiquement les laines de verre étudiées à forte compression par Baudequin et al. [3], la laine d'acier par Masse et al. [4] ou celle d'aluminium [5]. Poquillon et al. [6] ont comprimé comparativement différents types de matériaux enchevêtrés. Pour cela, ils ont effectué des compressions uniaxiales dans un cylindre (fig 1.1). Les résultats qu'ils obtiennent sont présentés sur la figure 1.2. Ils remarquent que tous les échantillons testés (mèches de coton, laine de verre, d'acier, de mouton, cheveux, nanotubes de carbone, crin végétal) présentent le même type de comportement. Ils répondent tous de façon non linéaire à la déformation imposée. Ceci permet de supposer que tous les échantillons se déforment selon le même mécanisme. Les

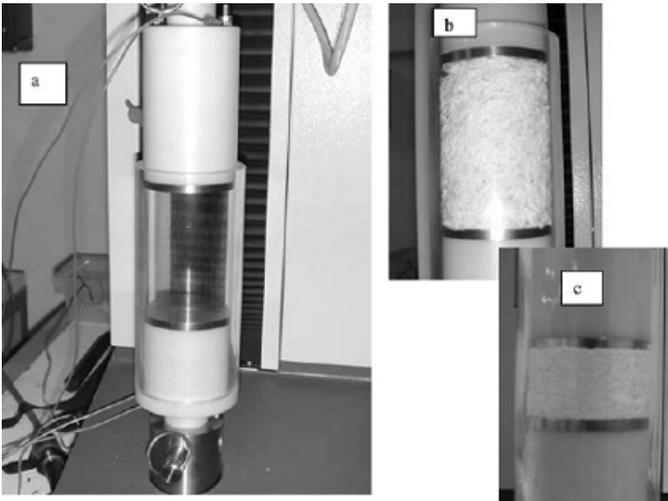


FIG. 1.1 – Dispositif expérimental (a) utilisé par Poquillon et al. pour la compression de différents milieux enchevêtrés (à l’image mèches de coton (b) en début et (c) en fin de compression) [6].

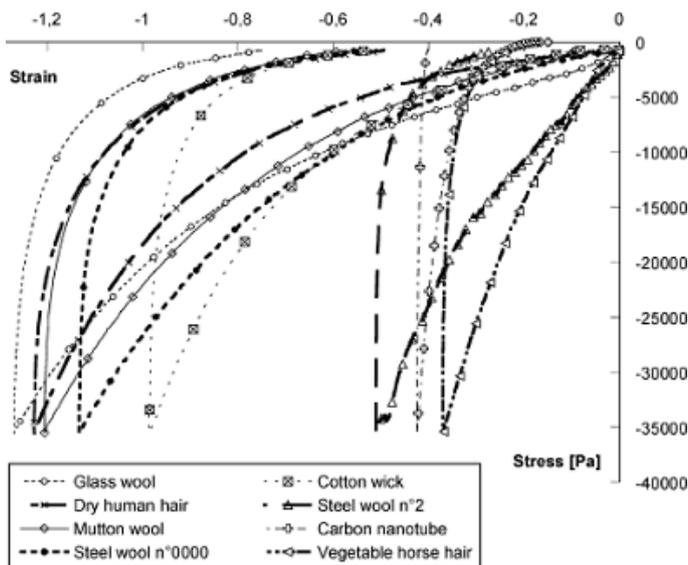


FIG. 1.2 – Courbes de contrainte-déformation pour différents types d’enchevêtrés d’après Poquillon et al. [6].

auteurs observent également que, pour tous les échantillons, la courbe en décharge n’est pas superposée à la courbe en compression. L’observation d’une hystérésis importante entre la charge et la décharge avait déjà été mentionnée par différents auteurs [4, 7–10].

Ces études se sont exclusivement intéressées à la compression d’ensembles de fibres enchevêtrées. On peut toutefois noter l’intérêt croissant de la réponse en cisaillement, en particulier sur des ensembles de filaments d’actine, lors d’études de type rhéologique du comportement mécanique des cellules du vivant [11–14].

Le comportement d’ensembles de fibres lors d’une sollicitation reste mal connu (mécanisme de déformation, réarrangement. . .). La littérature est relativement pauvre sur ce sujet, contrairement à celle traitant de la percolation géométrique ou mécanique, des empilements théoriques de fibres droites. . . Un rapide rappel des principaux résultats théoriques concernant les ensembles de fibres est présenté dans le paragraphe suivant.

## 1.2 Empilements de fibres et percolation mécanique

Dans la littérature, il existe deux façons de déterminer la fraction volumique de percolation mécanique, c'est-à-dire la fraction volumique à partir de laquelle le système (ensemble de fibres) fournira une réponse (résistera) à une sollicitation mécanique. La première consiste à placer aléatoirement des bâtonnets rigides dans l'espace libre laissé par les bâtonnets préalablement introduits. La fraction volumique critique est atteinte à partir du moment où aucun bâtonnet ne peut plus être ajouté. Cette approche repose sur des arguments géométriques. Une approche similaire permet d'étudier la percolation géométrique, qui correspond à la fraction volumique où apparaît le premier chemin de fibres percolant de part et d'autre de l'échantillon. La deuxième façon d'établir une densité critique de percolation mécanique est de rapprocher un ensemble de bâtonnets rigides dispersés aléatoirement dans l'espace. La fraction volumique critique correspond alors à celle atteinte quand le système ne peut plus être comprimé sans que les bâtonnets n'interagissent entre eux et ne se courbent. Cette description est basée sur des arguments mécaniques.

Ces deux types d'approches, géométrique et mécanique sont utilisées pour déterminer les fractions volumiques critiques ou les nombres de contacts par fibre.

### 1.2.1 Approche géométrique : théorie du volume exclu

Le point commun de toutes les études statistiques basées sur des arguments géométriques est la définition d'un volume exclu. Ce volume est défini comme le volume autour d'un objet dans lequel, en moyenne, le centre d'un autre objet similaire ne peut pas entrer si les recouvrements sont interdits. Le volume exclu d'une sphère est donc une sphère de rayon double. Dans le cas d'un sphérocyindre (cylindre avec une demi-sphère à chaque extrémité) l'expression du volume exclu est plus complexe et dépend de la distribution d'orientation des objets. Une des études les plus détaillées sur le sujet est celle de Balberg et al. [15]. Ils présentent les aires (2D) puis les volumes (3D) exclus d'objets divers, des plus simples, bâtonnets d'épaisseur nulle, aux plus complexes, sphérocyindres. Ils s'intéressent d'abord à l'aire exclue comme représentée sur la figure 1.3 pour deux sphérocyindres de longueur  $L$  et de diamètre  $D$  formant un angle  $\theta$ . Ils calculent l'aire exclue  $A_{ex}$  de ce cas particulier :  $4DL + \pi D^2 + L^2 \sin \theta$ , qu'ils intègrent ensuite sur toutes les orientations possibles afin d'obtenir l'aire exclue moyenne. La même démarche est utilisée pour le calcul du volume exclu d'un sphérocyindre. Après intégration, les auteurs

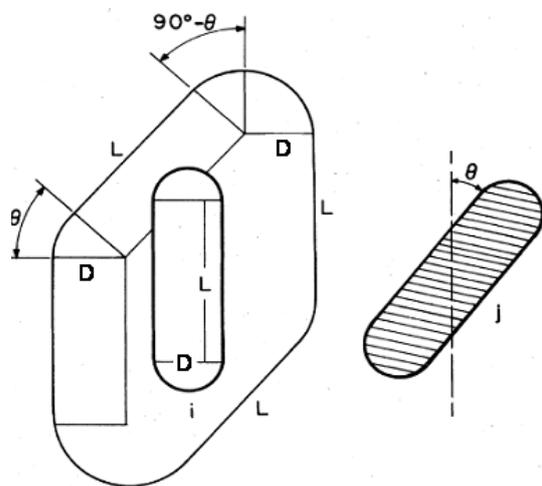


FIG. 1.3 – Schéma de l'aire exclue formée par deux sphérocyindres de longueur  $L$  et de diamètre  $D$  formant un angle  $\theta$  [15].

énoncent l'expression du volume exclu moyen

$$V_{ex} = (4\pi/3) D^3 + 2\pi D^2 L + 2DL^2 \langle \sin \theta \rangle \quad (1.1)$$

où  $\langle \sin \theta \rangle$  représente la moyenne sur tous les angles formés par deux bâtonnets ( $\langle \sin \theta \rangle = \pi/4$  dans le cas d'un arrangement aléatoire 3D).

La détermination du volume exclu d'une fibre permet d'accéder statistiquement aux principales grandeurs caractéristiques d'un ensemble de fibres : la fraction volumique de percolation géométrique, celle de percolation mécanique ou encore le nombre de contacts.

### Percolation géométrique

La percolation géométrique est atteinte lorsque, pendant que l'on rajoute des fibres dans un volume, un chemin continu (par contact ou intersection entre fibres) apparaît entre deux bords opposés du volume. Elle correspond à la fraction volumique critique au-delà de laquelle un ensemble de fibres conductrices devient conducteur. Dans la suite, on notera cette fraction volumique critique  $\Psi_C$ . Balberg et al. [16] font la conjecture que la fraction volumique de percolation géométrique est inversement proportionnelle au volume exclu dans le cas d'un ensemble aléatoire 3D de fibres droites

$$\Psi_C \propto \frac{V_f}{V_{ex}} \quad (1.2)$$

où  $V_f$  est le volume d'une fibre. Cette expression a été largement vérifiée numériquement [16–20]. Bug et al. font l'approximation que, dans le cas des grands rapports de forme, la proportionnalité devenait une égalité [21]. Dans le cas de sphérocyindres de grand rapport de forme  $\alpha = L/D \rightarrow \infty$ , les termes dus aux extrémités, aussi bien dans l'expression du volume d'une fibre  $V_f$  que dans celle du volume exclu (deux premiers termes de l'équation 1.1), sont négligeables. Ce qui entraîne  $V_f = \frac{\pi D^2 L}{4}$  et, dans le cas d'un arrangement aléatoire 3D,  $V_{ex} = \frac{\pi D L^2}{2}$ . Ainsi, on obtient  $\frac{V_{ex}}{V_f} = 2 \frac{L}{D} = 2\alpha$ . Garboczi et al. [22] ont montré numériquement (simulations de type Monte Carlo), que l'on pouvait écrire la fraction volumique au seuil de percolation géométrique en fonction du rapport de forme :

$$\Psi_C = \frac{k}{\alpha} \quad \text{avec} \quad k = 0,6 \quad (1.3)$$

Dans une autre étude de simulation de type Monte Carlo, Favier trouve une valeur de la constante  $k$  de 0,7 [23]. Expérimentalement, Bigg [24] et Yi et al. [25] retrouvent la dépendance de la fraction volumique critique en fonction de l'inverse du rapport de forme, la valeur de  $k$  dépendant fortement de la matrice polymère utilisée pour maintenir les fibres conductrices.

### Percolation mécanique

On définit la fraction volumique de percolation mécanique comme la fraction volumique à partir de laquelle le système (ensemble de fibres) fournit une réponse à une sollicitation mécanique. Cette fraction volumique (notée par la suite  $\phi_C$ ) est reliée au volume exclu par une loi du même type que pour la percolation géométrique mais avec un facteur  $K$  plus grand. Pour cela, il faut considérer des fibres impénétrables. De leurs simulations de type Monte Carlo, Garboczi et al. [22] mettent en évidence une relation entre la fraction volumique au seuil de percolation mécanique et le rapport de forme

$$\phi_C = \frac{K}{\alpha} \quad \text{avec} \quad K = 5,1 \quad (1.4)$$

Expérimentalement, Philipse obtient une valeur de  $K$  égale à 5,4 (pour  $\alpha > 15$ ) [26] et Desmond et al. une valeur de 5,25 [27]. De la comparaison de ce résultat avec celui obtenu pour la percolation géométrique (eqn. 1.3), il ressort que, à rapport de forme constant, la fraction volumique de percolation mécanique est environ dix fois supérieure à la fraction volumique de percolation géométrique ( $K \approx 10k$ ).

### Détermination du nombre de contacts

Dans une étude antérieure à celle de Balberg et al. [15], Komori et al. [28] font l'hypothèse que si les fibres sont suffisamment longues ( $L/D \gg 1$ ), les interactions faisant intervenir les extrémités des fibres sont négligeables. Ils utilisent alors l'expression du volume exclu en ne gardant que le terme dominant quand  $\alpha \rightarrow \infty$ ,  $V_{ex} = 2DL^2 \langle \sin \theta \rangle$ . La valeur moyenne de  $\sin \theta$  sur tout l'échantillon est notée  $I$ . Si une fibre test est placée dans un volume  $V$  et qu'une seconde fibre est insérée au hasard, la probabilité  $P$  que les deux fibres se touchent est  $P = \frac{V_{ex}}{V}$ . Si les recouvrements de fibres sont autorisés (fibres fantômes), alors le nombre de contacts par fibre, pour un ensemble de  $N_f \gg 1$ , est directement donné par

$$N_c = (N_f - 1)P \sim N_f P = N_f \frac{V_{ex}}{V} = \frac{2N_f DL^2}{V} I \quad (1.5)$$

Les auteurs en déduisent le nombre moyen de contacts par unité de longueur de fibre  $\bar{n}_c$  ainsi que son inverse, la longueur moyenne entre contacts  $\bar{b}$  :

$$\bar{n}_c = \frac{1}{\bar{b}} = \frac{2DN_f L}{V} I \quad (1.6)$$

Komori et al. ont également montré que la forme de la section de l'élément n'avait pas d'influence sur ce résultat.

On trouve dans la littérature d'autres approches pour calculer le nombre de contacts dans un ensemble de fibres. Elles consistent à considérer un cylindre de diamètre  $2D$  autour d'une fibre de longueur  $L$  et à dénombrer les intersections des autres fibres de l'ensemble avec le cylindre. Certains auteurs [2, 29] estiment la longueur de fibres dans le cylindre et la projettent dans le plan perpendiculaire à l'axe du cylindre. Le nombre de contacts par fibre est alors égal à la longueur de cordes dans le cercle (projection des fibres) divisée par la longueur moyenne d'une corde. Ainsi van Wyk retrouve pour un système orienté aléatoirement ( $I = \pi/4$ ) [2]

$$\bar{n}_c = \frac{1}{\bar{b}} = \frac{\pi DN_f L}{2V} \quad (1.7)$$

D'autres auteurs s'intéressent aux intersections des fibres de l'ensemble avec la surface du cylindre : par la détermination de la probabilité d'intersection d'une surface quelconque dans l'ensemble (et donc la surface courbe du cylindre) [30] ou, dans une logique analogue à celle de la théorie du volume exclu, par détermination du volume autour du cylindre dans lequel peuvent se trouver le centre des fibres l'intersectant [31–33]. Cette dernière méthode donne comme expression pour le nombre moyen de contacts par unité de longueur de fibre

$$\bar{n}_c = \frac{2DN_f L}{V} I + \frac{\pi N_f D^2}{V} J + \frac{\pi N_f D^2}{V}$$

$I$  est la valeur moyenne sur tout l'échantillon du sinus de l'angle ( $\theta$ ) formé par deux fibres en contact et  $J$  celle du cosinus de cet angle. Le premier terme correspond aux fibres entrant dans

le cylindre par la surface courbe du cylindre, le deuxième aux fibres entrants par les extrémités planes. Le troisième terme est le nombre de fibre dont le centre est à l'intérieur du cylindre. Pour des fibres de grand rapport de forme, le premier terme est prédominant et on retrouve l'expression 1.6.

Dans les raisonnements précédents, les fibres sont considérées comme fantômes. D'autres auteurs ont tenté d'inclure dans l'expression du volume exclu des termes d'encombrement stérique dus aux fibres déjà en contact avec la fibre considérée. On remarque dans les expressions ci-dessous que ceux-ci n'interviennent que comme préfacteurs correctifs de l'équation 1.6. Pan [34] s'est intéressé à l'influence de la surface déjà occupée sur la fibre par les contacts antérieurs. Il calcule une fonction  $\Psi$  pour prendre en compte la surface interdite sur la fibre.  $\Psi$  ne dépend que de la densité d'orientation des fibres, c'est-à-dire de la distribution statistique de leurs orientations. Cette fonction est introduite dans un facteur d'encombrement  $h_{Pan} = 1/(1 + 4\Psi\phi/\pi)$  où  $\phi$  est la fraction volumique. Le nombre de contacts moyen par unité de longueur de fibre pour un arrangement aléatoire 3D ( $\Psi = \pi^2/4$ ) s'écrit :

$$\bar{n}_c = \frac{2DN_f L}{V} I h_{Pan} \quad \text{où} \quad I = \pi/4$$

$$h_{Pan} = 1/(1 + \pi\phi)$$

Komori et al. [35] introduisent un volume interdit autour des fibres en contact dans lequel ne peut pas se placer une autre fibre. Ils définissent un facteur d'encombrement  $h$  pour marquer la déviation due à la restriction sur le volume accessible de la probabilité de contact par rapport au cas idéal (fibres fantômes).  $h$  ne dépend que de la fraction volumique et du rapport de forme. Pour une structure aléatoire 3D, on obtient

$$\bar{n}_c = \frac{2DN_f L}{V} I h \quad \text{où} \quad I = \frac{\pi}{4}$$

$$h = (1/4q\alpha\phi^2) \{ (1 + 2q\phi) - \sqrt{(1 + 2q\phi)^2 - 8q\alpha\phi^2} \}$$

$$q \equiv 8/\pi$$

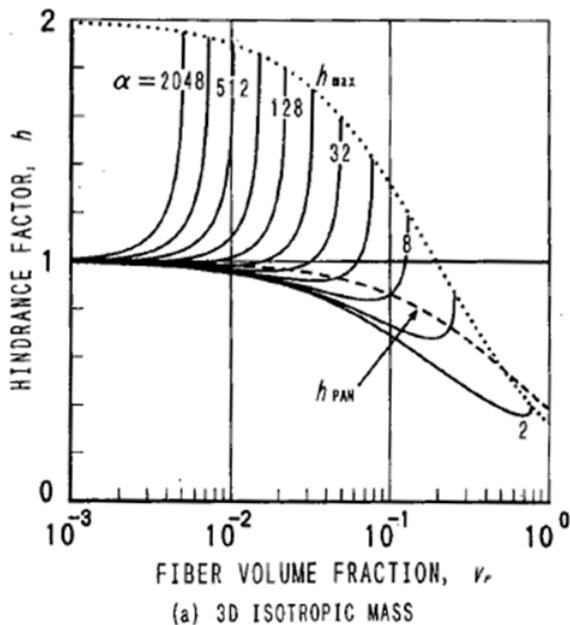


FIG. 1.4 - Graphe représentant les valeurs des facteurs d'encombrement ( $h_{Pan}$ ) de Pan (tirets) [34] et ( $h$ ) de Komori et al. (trait plein) [35] pour différents rapports de forme en fonction de la fraction volumique (graphe issu de [35])

La figure 1.4 représente les valeurs des facteurs d'encombrement calculé par Pan  $h_{Pan}$  [34] et Komori et al.  $h$  [35] en fonction de la fraction volumique pour différents rapports de forme.  $h_{Pan}$  décroît, car quand la fraction volumique augmente, de nouveaux contacts se forment, la longueur libre des fibres diminue et réduit les chances de former de nouveaux contacts.  $h$  peut augmenter car en réduisant le volume accessible aux fibres entrantes, la formation de nouveaux contacts est favorisée.

### 1.2.2 Approche mécanique

#### Percolation mécanique

Expérimentalement, on peut définir deux fractions volumiques critiques liées à l'empilement aléatoire d'objets sphériques ou allongés [36]. La première correspond à l'empilement « initial » qui tient en équilibre grâce à des équilibres stables locaux (frottement, bord du conteneur...) mais dans lequel les objets peuvent encore se réarranger. La fraction volumique associée s'appelle la « loose packing density ». Dans le cas d'un empilement de sphères de même taille, elle vaut environ 0,58. Le système peut ensuite être amené vers un état d'équilibre plus dense dans lequel les objets n'ont plus la place de se réarranger (« close packing density »). Différentes méthodes expérimentales sont proposées pour obtenir cet équilibre sans formation d'arrangement ordonné : des secousses [26, 37–39], utilisées aussi bien dans le cas de particules sphériques [38] que de particules allongées [26, 39], des vibrations ultrasoniques [38] ou des insufflations d'air [27] sont les méthodes les plus couramment employées. Les résultats expérimentaux donnent des fractions volumiques de percolation mécanique, dans le cas de systèmes où le frottement est négligeable, aux alentours de  $\phi_C = 0,64$  pour un ensemble de sphères et de  $\phi_C = 0,25$  pour des bâtonnets de rapport de forme 20. Ces valeurs sont retrouvées par simulations numériques ([38, 40–44] pour des ensembles de sphères et [45, 46] pour des fibres rigides ou faiblement flexibles).

Williams et al. [45] ont développé un modèle numérique basé sur la « contraction mécanique ». En utilisant des simulations de type Monte Carlo, ils préparent un milieu isotrope dilué de sphérocyindres monodisperses (de longueur  $L$  et de diamètre  $D$ ) dans une boîte cubique périodique. La boîte est ensuite comprimée et les bâtonnets déplacés de façon homothétique. Les particules se recouvrant sont ensuite séparées de manière itérative par modification de leur orientation et par glissement le long de leur axe de symétrie dans le cas des fibres de grand rapport de forme.

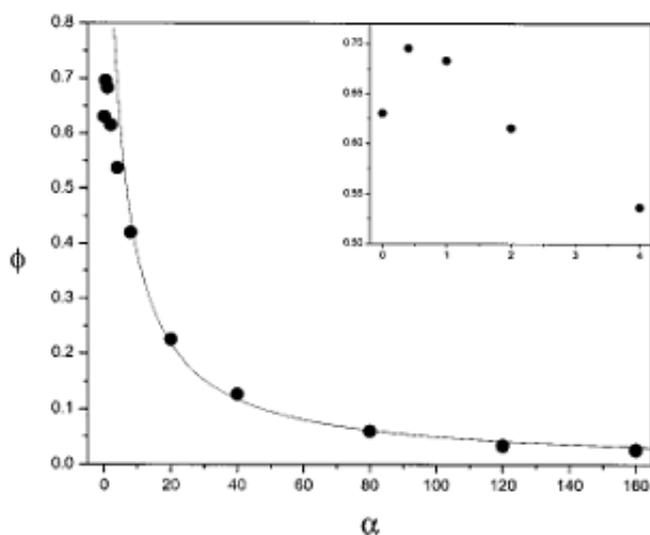


FIG. 1.5 – Fraction volumique de percolation mécanique  $\phi$  en fonction du rapport de forme  $\alpha = L/D$  pour des ensembles amorphes. La courbe correspond à l'expression  $\phi_C = 5,1/\alpha$ . (Résultats obtenus par Williams et al. [45])

Le système subit des compressions successives jusqu'à ce que les recouvrements de fibres ne puissent plus être dissipés. Les auteurs obtiennent ainsi des systèmes amorphes au maximum de compaction sans déformation des bâtonnets. La figure 1.5 représente les valeurs de fractions volumiques obtenues au maximum de compaction en fonction du rapport de forme. Pour les fibres de grand rapport de forme, les auteurs montrent un parfait accord entre leurs résultats et la courbe  $\phi_C = 5,1/\alpha$  (eqn 1.4). Ils remarquent aussi que des objets de rapport de forme inférieur à 1 ont un seuil de percolation plus élevé que des sphères, avec un maximum pour  $\alpha \approx 0,4$ <sup>1</sup> (encart de la fig. 1.5).

### Nombre de contacts par fibre

Lors de leur étude d'un ensemble aléatoire 3D, Williams et al. [45] montrent que le nombre de contacts par fibre à la percolation mécanique n'est pas constant dans le cas des faibles rapports de forme et dépend de celui-ci. Par contre quand  $\alpha \gg 1$  le nombre moyen de contacts par fibre est une constante qu'ils estiment à 3.

Ce que l'on retient de ces deux approches, géométrique et mécanique, est que dans le cas particulier d'un arrangement aléatoire 3D de fibres, elles conduisent à une fraction volumique critique de percolation mécanique équivalente. Il est toutefois important de noter que ces études ne font pas intervenir de frottement entre fibres. Il semble que l'influence de celui-ci n'a été étudié que pour des empilements de sphères [37, 42].

On peut déterminer une autre fraction volumique critique. Elle est généralement notée  $\phi_0$  et est déterminée comme la fraction volumique à partir de laquelle, par extrapolation des courbes expérimentales, la contrainte en compression est nulle [2, 4, 5, 7, 47]. Elle se retrouve sous forme de constante d'intégration dans différents modèles analytiques exprimant la contrainte en compression en fonction de la fraction volumique [2, 33, 47–49]. Elle est parfois confondue (par erreur) avec la fraction volumique initiale de la mesure (expérimentale).

## 1.3 Modèles analytiques du comportement mécanique d'ensembles de fibres longues

Le mécanisme le plus communément admis pour expliquer la déformation des matériaux enchevêtrés sans lien fort entre fibres est la flexion des fibres. Plusieurs approches dimensionnelles ont été développées à partir d'une représentation schématique du type de celle représentée à la figure 1.6 composée d'une fibre en appui sur deux contacts distants de  $2\bar{b}$ . Sans lien perma-

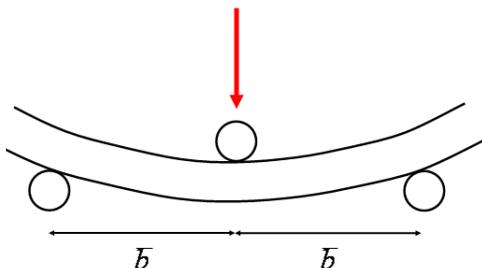


FIG. 1.6 – Schéma d'une cellule élémentaire de déformation : segment de fibre en flexion maintenu par deux contacts distants de  $2\bar{b}$  et supportant un troisième

<sup>1</sup>Le rapport de forme est ici défini par  $\frac{L}{D}$  et non  $\frac{L+D}{D}$ . Il peut donc être inférieur à 1 et vaut 0 pour une sphère.

ment entre fibres, celles-ci peuvent glisser le long des contacts. La compression, la tension et la torsion dans les fibres sont considérées négligeables. Le nombre de contacts dans un échantillon est généralement donné par l'équation 1.6. Toutes les études basées sur cette hypothèse conduisent, pour les grandeurs caractéristiques telles que pression, module de compression ou de cisaillement, à des lois puissance en fonction de la fraction volumique systématiquement caractérisées par un exposant 3. Les différences viennent des méthodes utilisées pour parvenir à ce résultat, et en particulier la façon dont est introduite la déformation. On peut déterminer deux grands courants. Le premier, le plus ancien, considère une force appliquée aux contacts (et en déduit un incrément de déformation). Le second impose des incréments de déformation. Pour toutes ces études, des hypothèses simplificatrices sont faites. Les fibres sont représentées par une suite de segments indépendants entre points de contacts. De plus, pour modéliser des grandes déformations, l'orientation des fibres est recalculée à partir de l'incrément de déformation par déplacement homothétique des points de contacts.

Dans toutes ces études, l'état initial est toujours considéré sans aucune contrainte interne.

### 1.3.1 Forces aux contacts

Van Wyk développe, dès 1946, un modèle basé sur l'hypothèse de forces uniformément appliquées aux contacts pour un arrangement aléatoire 3D [2]. Le mode de déformation est la flexion des fibres. Si on se réfère à la cellule élémentaire de la figure 1.6, un incrément de force  $dF$  induit une augmentation de la flèche  $d\delta$  telle que

$$dF \propto \frac{E_f I}{\bar{b}^3} d\delta$$

$E_f I$  est le module de flexion de la fibre. La constante de proportionnalité prend en compte les différentes caractéristiques des fibres (conditions aux limites) ainsi que la déviation de la direction de la force par rapport à la normale de la fibre. L'auteur détermine la longueur de fibre par unité de volume  $\frac{N_f L}{V}$  puis le nombre de cellules élémentaires (contenant une longueur  $\bar{b}$  de fibres entre deux contacts) dans un sous-volume de section unitaire et de hauteur notée  $c$  équivalente à la hauteur d'une cellule élémentaire soit  $\frac{c N_f L}{V \bar{b}}$  cellules dans un sous-volume ( $V$  est le volume total de l'ensemble). Une augmentation de force  $dF$  sur chaque unité conduit à une augmentation de pression  $dP$

$$dP = \frac{c N_f L}{V \bar{b}} dF$$

soit en fonction de la flèche

$$dP \propto \frac{E_f I c N_f L}{V \bar{b}^4} d\delta$$

L'auteur fait l'hypothèse que le changement de volume du sous-volume dû à l'augmentation de pression est proportionnel à l'augmentation de la flèche  $dV \propto \frac{V}{c} d\delta$  et en déduit

$$dP \propto \frac{E_f I c^2 N_f L}{V^2 \bar{b}^4} dV$$

L'auteur s'intéresse à un arrangement aléatoire 3D,  $c$  est alors du même ordre de grandeur que  $\bar{b}$ . Les fibres sont de section circulaire  $I = \frac{\pi D^4}{64}$ .  $\bar{b}$  est donné par l'équation 1.7 :  $\bar{b} = \frac{2V}{\pi D N_f L}$ . En remplaçant ces valeurs dans l'expression de l'incrément de pression, van Wyk obtient

$$dP \propto \frac{E_f m^3}{12\rho^3} \cdot \frac{dV}{V^4}$$

où  $m$  est la masse de l'ensemble de fibres et  $\rho$  la masse volumique des fibres. Après intégration, il trouve l'expression

$$P \propto \frac{E_f m^3}{\rho^3} \left( \frac{1}{V^3} - \frac{1}{V_0^3} \right) \quad (1.8)$$

$V$  et  $V_0$  sont les volumes comprimé et initial de l'ensemble de fibres tels que  $P=0$  quand  $V=V_0$ . La valeur de 3 pour l'exposant est compatible avec la valeur de 1/0,3 de la relation empirique de Schofield proposée à partir de résultats expérimentaux [1] :

épaisseur de l'échantillon  $\propto (\text{charge})^{-0,3}$ .

Dans les études suivantes, différents paramètres sont introduits : la dépendance explicite de l'orientation des fibres ou les réarrangements. En 1985, Lee et al. [50] s'appuient sur l'évaluation du nombre de contacts proposée par Komori et al. [28] dépendant de l'orientation initiale des fibres (eqn. 1.6) pour déterminer le module de compression initial. Pour simplifier les calculs, ils ne considèrent pas de changement d'orientation des fibres et donc du nombre de contacts lors d'une compression infinitésimale. Ils déterminent un module de compression initial dans la direction du chargement proportionnel au cube de la fraction volumique de fibre.

Une autre étude importante est celle de Carnaby et al. [51], en 1989, qui parvient à rendre compte de l'hystérésis entre la charge et la décharge, telle que observée expérimentalement (voir fig. 1.2), par introduction de frottement et glissements aux contacts. Pour cela, ils utilisent un critère de glissement (de type Coulomb) qui dépend de la force appliquée au contact et de l'inclinaison des fibres. Les fibres vont commencer à glisser l'une sur l'autre si (fig. 1.7)

$$F_p \geq \mu F_n + F_a$$

$F_p$  est la projection de la force de compression ( $F$ ) le long de la fibre du dessous et  $F_n$  sa projection normale.  $\mu$  est le coefficient de frottement entre les deux fibres en contact et  $F_a$  la force d'adhésion. Dans ce cas précis cette force d'adhésion est tangentielle ; on pourrait imaginer de définir également une force d'adhésion normale (dans le cas par exemple de forces de van der Waals, de force de capillarité... ). Par projection sur l'axe de compression (verticale), l'angle critique  $\chi$  au-delà duquel les fibres sont maintenues par frottement est défini par

$$\cos \chi - \mu \sin \chi = F_a/F$$

Cette valeur critique permet de déterminer la quantité de contacts glissants et de recalculer la part de la contrainte qui leur sera appliquée (dépendant de  $F_a$ , de la projection normale et tangentielle de la force appliquée et de la fonction de densité d'orientation), les contacts frottants

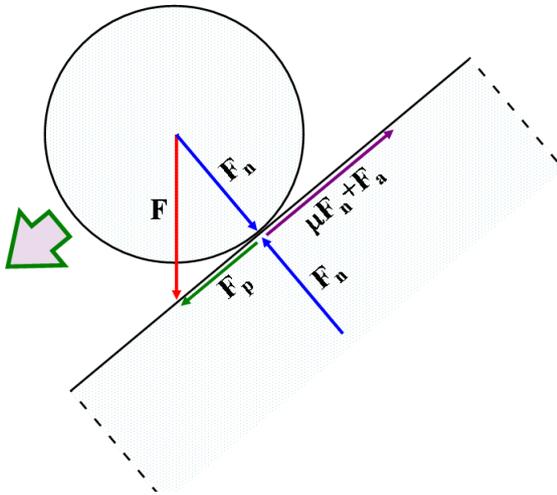


FIG. 1.7 – Schéma d'une interaction avec frottement entre deux fibres à un point de contact. (Schéma issu de [51])

portant le reste. Les auteurs ont voulu appliquer leur modèle aux grandes déformations. Ils calculent un incrément de compression à partir de la variation de la flèche due à l'incrément de contrainte imposée et modifient la fonction de densité d'orientation, itérativement, pour chaque incrément de compression. Ils déterminent ainsi, à chaque pas de compression, un module de compression dans la direction de charge qui, comme Lee et al. [50], est proportionnel au cube de la fraction volumique de fibre, l'influence du glissement ne se faisant sentir que sur la constante de proportionnalité. La modélisation de la décharge diffère de la compression par le calcul de la contrainte supportée par les contacts frottants. En décharge elle ne dépend plus de la projection normale de la force appliquée. Ils ont ainsi réussi à obtenir une hystérésis entre la courbe de contrainte en compression et en décharge comme observé expérimentalement (voir § 1.1). Le même modèle est utilisé pour déterminer un module de cisaillement [52]. Leurs calculs conduisent à un module de cisaillement proportionnel au cube de la fraction volumique de fibres. Comme dans le cas du module de compression dans la direction de charge, le glissement n'intervient que sur la constante de proportionnalité.

### 1.3.2 Déformation imposée

Komori et al. [53], en 1991, choisissent de modéliser la compression d'un ensemble de fibres en imposant un incrément de déformation conduisant à une réorientation des fibres (modification de la fonction de densité d'orientation), méthode initialement proposée par Stearn [30]. Pour simplifier la représentation, les auteurs ne tiennent pas compte du glissement entre fibres. Ils recalculent à chaque pas de compression la fonction de densité d'orientation et en déduisent l'énergie de flexion du système. L'application de leur modèle à la compression isostatique (dans les trois directions) d'un système aléatoire 3D conduit à une valeur de la contrainte en compression dépendant de la fraction volumique au cube

$$\sigma = \frac{4}{9} E_f [\phi^3 - \phi_0^3] \quad (1.9)$$

où  $\phi_0$  et  $\phi$  sont respectivement les fractions volumiques initiale (constante d'intégration) et comprimée de l'ensemble de fibres,  $E_f$  le module d'Young d'une fibre. Komori et al. retrouvent l'exposant de 3 pour relier la contrainte en compression à la fraction volumique de l'échantillon. De même leur modèle [54] prédit une dépendance en  $\phi_0^3$  pour les modules de compression et de cisaillement initiaux. Ils introduisent, lors d'études ultérieures, la tortuosité initiale des fibres. Il n'y a pas de définition stricte de la tortuosité mais il est couramment admis qu'on la définit comme la moyenne des longueurs entre extrémités des fibres sur leur longueur totale [55] puis deux autres paramètres, la longueur de persistance et l'encombrement stérique [56].

De leur côté, Lee et al [57, 58], en 1992, utilisent des éléments de modélisation proches : compression par désorientation des fibres, tortuosité initiale, courbure des fibres entre les contacts... Ils considèrent en plus les possibilités de glissement des fibres. Les auteurs déterminent ainsi l'influence des différents paramètres (diamètre des fibres, densité, tortuosité, distribution des longueurs d'éléments, coefficient de Poisson...) sur l'énergie du système.

### 1.3.3 D'autres approches

En 1998, Toll [33] reprend les hypothèses de van Wyk [2] d'un modèle simplifié où les fibres sont droites et infinies, de section circulaire et ne pouvant se déformer que par flexion entre

points de contact, aucun réarrangement ni aucun encombrement stérique ne sont considérés. Il le généralise en jouant sur les différentes valeurs de la hauteur  $c$  de la cellule élémentaire (fig 1.6). Il considère d'abord un milieu aléatoire 3D où la hauteur  $c$  est de l'ordre de grandeur de la longueur moyenne entre contacts  $\bar{b}$ . Par ce biais, il retrouve un exposant 3 pour la loi puissance entre la pression  $P$  et la fraction volumique de fibres

$$P \propto E_f (\phi^3 - \phi_0^3) \quad 3D \text{ aléatoire}$$

où  $E_f$  est le module d'Young d'une fibre,  $\phi_0$  et  $\phi$  sont les fractions volumiques de fibres respectivement initiale (constante d'intégration) et compressée. Il considère ensuite un milieu aléatoire 2D (arrangement aléatoire plan). La flèche possible est limitée par la hauteur de la cellule élémentaire qui correspond au diamètre d'une fibre. De cette hypothèse découle un exposant 5 entre la pression et la fraction volumique

$$P \propto E_f (\phi^5 - \phi_0^5) \quad 2D \text{ aléatoire}$$

En 2007, Alkhagen et al. [47] développent un modèle de type Eléments Discrets. Ils considèrent que les fibres sont constituées d'une suite d'éléments cylindriques droits indépendants (leur longueur est directement liée à la tortuosité de la fibre). Ces éléments subissent de la flexion et de la torsion par interaction avec d'autres éléments. Leur modèle fait apparaître un exposant de 3 grâce à la torsion et un autre de 5 par flexion des fibres. Un arrangement aléatoire 2D où les fibres ne travaillent qu'en flexion donne un résultats semblable à celui de Toll [33], la pression est proportionnelle à  $\phi^5$ .

Neckář [48] parvient à retrouver un exposant de 3, sans faire d'hypothèse sur l'orientation des fibres, en basant son analyse sur l'augmentation linéaire des « volumes de contact » avec la fraction volumique de fibres. Il propose aussi, de façon à inclure le volume des fibres, une modification de l'expression de la pression faisant intervenir la fraction volumique maximale que peut atteindre l'ensemble de fibres  $\phi_{max}$

$$P \propto \frac{\phi^3}{\left(1 - \frac{\phi^3}{\phi_{max}^3}\right)^3} - \frac{\phi_0^3}{\left(1 - \frac{\phi_0^3}{\phi_{max}^3}\right)^3}$$

Dans leur modèle d'arrangements 2D aléatoires, Pawlak et al. [49] ajoutent au terme en  $\phi^5$  un deuxième terme en  $\phi^4$  dans l'expression de la pression pour tenir compte des extrémités de fibres. Tous les travaux présentés jusqu'ici concernaient des milieux enchevêtrés de faible fraction volumique. Une toute autre étude, celle de Baudequin et al. [3], s'est intéressé à la réponse d'un milieu fibreux à très fort taux de compression. Leur modèle repose sur la statistique de formation de nouveaux contacts, donc de diminution de la longueur moyenne entre contacts et de son comportement en flexion. Ils définissent une compression maximale  $\varepsilon^*$  et obtiennent comme expression de la contrainte  $\sigma \propto (\varepsilon^* - \varepsilon)^{-3/2}$  pour  $\frac{\varepsilon^* - \varepsilon}{\varepsilon^*} \ll 1$  (fig 1.9). Ils confirment leur résultat sur des essais expérimentaux obtenus sur des laines de verre.

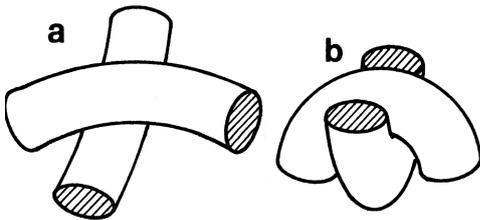


FIG. 1.8 – Schéma des « volumes de contact » incompressibles entre deux fibres en contact : (a) faible force au contact, (b) grande force au contact. (Schéma issu de [48])

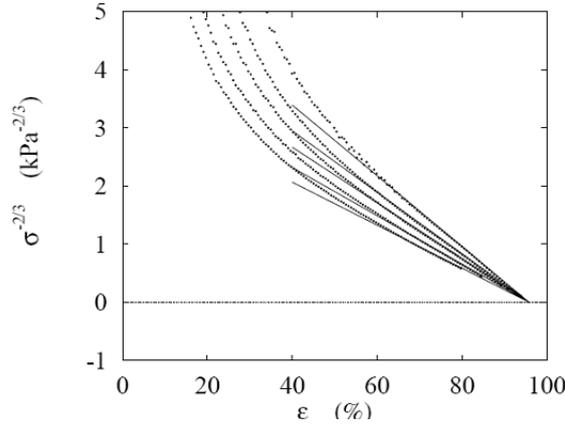


FIG. 1.9 – Graphe de la contrainte à un exposant  $(-2/3)$  en fonction de la déformation pour des échantillons de laine de verre ayant subi différentes compressions initiales avant la mesure [3]

A faible taux de compression, les auteurs retrouvent l'exposant 3 pour la loi puissance entre la fraction volumique et différentes grandeurs caractéristiques comme la pression, le module de compression ou de cisaillement. Cette valeur de 3 est associée au mécanisme de déformation des fibres pris en compte, il est caractéristique de la flexion des segments de fibre entre contact. Différentes études ont également pris en compte du frottement ou l'encombrement stérique. Les auteurs ont montré cela ne modifiait pas la valeur de l'exposant.

Ces modèles sont des modèles de type « Milieux Effectifs » (« effective medium theory » en anglais). Ils présentent donc une capacité limitée à décrire en détail un ensemble de fibres. Grâce au développement de l'informatique, une autre approche de ces milieux a été abordée. Elle consiste à considérer individuellement chaque interaction entre fibres et ses conséquences en terme de déformation au niveau des fibres pour en extraire le comportement de l'ensemble.

## 1.4 Modèles numériques du comportement mécanique d'ensembles de fibres longues

Il existe, dans la littérature, différents types de représentation numérique d'une fibre. Certaines sont basées sur l'utilisation des éléments finis (les trois premières études présentées), d'autres sont inspirées de la dynamique moléculaire (quatrième étude présentée).

Durville [59] utilise un modèle de fibres de longueur infinie (insérées dans une cellule initialement cubique par conditions périodiques aux bords). Une fibre est représentée par une suite de segments curvilignes de longueur finie décrits par une abscisse associée à deux vecteurs caractérisant la section. L'auteur utilise un modèle de poutres avec un champ de déplacement défini en chaque point par trois vecteurs, un pour la translation du centre de section, les deux autres pour la modification de la direction de la section. La flexion des segments est introduite par référence à une configuration de cylindres droits dans l'expression du travail virtuel. L'auteur apporte une attention particulière à la recherche des points de contact entre segments courbes. Il introduit aussi dans son modèle du frottement aux contacts au moyen d'une loi de Coulomb régularisée qui permet de petits déplacements réversibles avant glissement.

$$\text{Si } \Delta \mathbf{U}_T \leq u_T \quad \text{alors } \mathbf{F}_F = \frac{\mu \|\mathbf{F}_I\|}{u_T} \Delta \mathbf{U}_T \quad \text{sinon } \mathbf{F}_F = \frac{\mu \|\mathbf{F}_I\|}{\|\Delta \mathbf{U}_T\|} \Delta \mathbf{U}_T$$

où  $\Delta \mathbf{U}_T$  est la composante tangentielle du déplacement relatif,  $\mathbf{F}_F$  la composante tangentielle au contact due au frottement et  $\mathbf{F}_I$  la composante normale de la réaction au contact,  $\mu$  le coeffi-

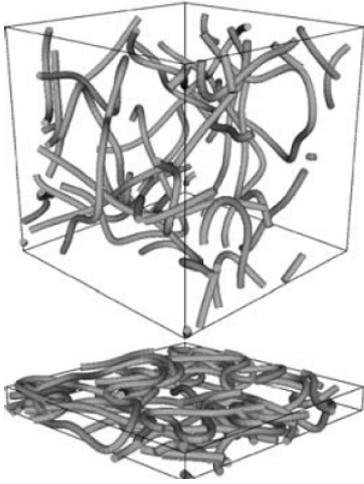


FIG. 1.10 – Configurations initiale (haut) et finale (bas) d'un échantillon pour une compression d'environ 90% (Durville [59])

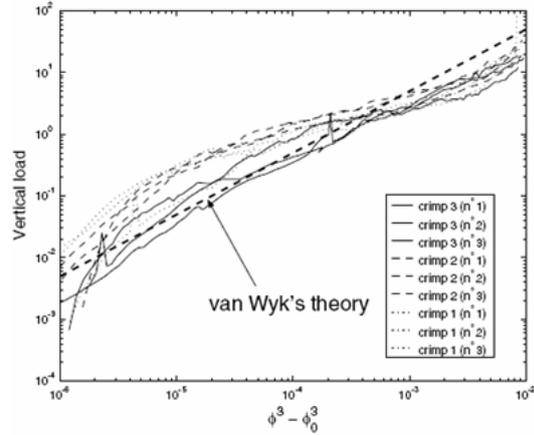


FIG. 1.11 – Comparaison des courbes de charge pour différentes tortuosité avec la théorie de van Wyk (Durville [59])

cient de frottement et  $u_T$  est un paramètre ajustable qui correspond au déplacement réversible tangentiel. Il génère des échantillons de différentes tortuosités qu'il comprime ensuite jusqu'à des taux de déformation importants ( $\sim 90\%$ ) (fig. 1.10). Les résultats obtenus en début de déformation sont présentés sur la figure 1.11. Pour de faibles déformations (fig. 1.11), l'auteur retrouve l'exposant 3 de la théorie de van Wyk [2].

Beil et al. [60–62] se sont intéressés à un ensemble de fibres de forme hélicoïdale initialement aléatoirement orientées dans une cellule 3D (fig. 1.12). Comme dans l'étude de Durville [59], les fibres sont discrétisées en segments définis par leur abscisse curviligne et deux vecteurs dessinant leur section. Beil et al., se basant sur le modèle de Love-Kirchhoff, ajoutent un troisième vecteur tangent à la ligne centrale de la fibre, les courbures selon chaque direction (flexion dans les directions de section et torsion dans la direction tangente), les forces subies ainsi que la matrice de passage du repère local au repère global (soit 18 paramètres par segment). Les interactions aux contacts sont modélisées par des forces de répulsion normales  $\mathbf{F}_I$  à la ligne centrale et des

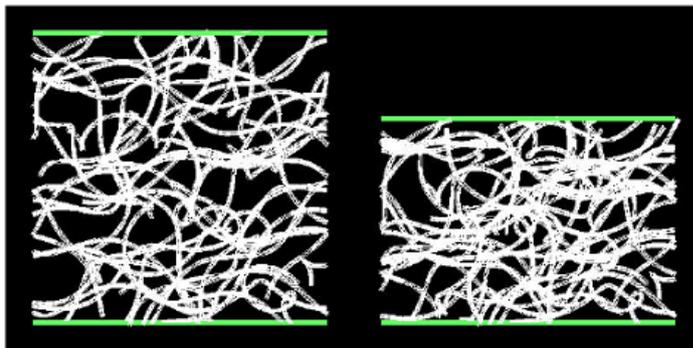


FIG. 1.12 – Vue de coté d'une cellule cubique unitaire, contenant un ensemble représentatif constitué de 50 fibres pour une fraction volumique de 0,8%, avant et après une compression de 70% du volume initial (Beil et al. [60–62])

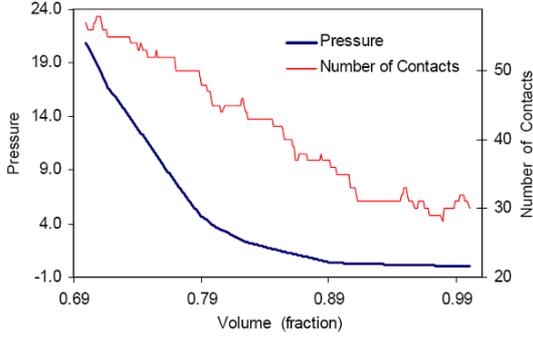


FIG. 1.13 – Pression et nombre de contacts calculés pendant la compression (70%) (unité de pression  $E_f/10^9$ ) (simulations de Beil et al. [61,62])

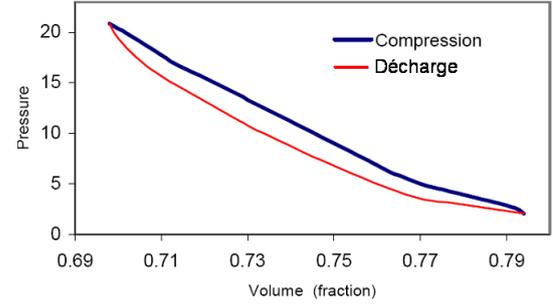


FIG. 1.14 – Hystérésis sur la pression observée sur le neuvième cycle de charge-décharge (unité de pression  $E_f/10^9$ ) (simulations de Beil et al. [61,62])

forces de frottement  $\mathbf{F}_F$  perpendiculaires aux forces normales. La norme de  $\mathbf{F}_F$  est définie par  $F_F = K_F d_F$  où  $K_F$  est une constante positive et  $d_F$  la distance entre points en contact entre chaque pas de temps. Les auteurs fixent également deux autres paramètres  $\mu_s$  et  $\mu_k$  (les coefficients de frottement respectivement statique et glissant pour un frottement de Coulomb) tels que si  $F_F > \mu_s F_I$  le contact est requalifié glissant, la classification des contacts entre glissants et non-glissants s'appuie sur le travail de Carnaby et al. [51], la force de frottement appliquée à un contact glissant équivaut à  $F_F = \mu_k F_I$  avec  $\mu_k < \mu_s$ .

Selon les auteurs, les conditions appliquées aux extrémités des fibres sur les quatre faces verticales de la boîte représentent les forces et les moments transmis par leur prolongement fictif en dehors de la boîte. Pour cela ils insèrent des ressorts de forte rigidité pour limiter les mouvements perpendiculaires à la face et de faible raideur pour les mouvements dans le plan des surfaces et fixent les orientations à leur état initial. Pour modéliser la compression uniaxiale (verticale), les auteurs introduisent de plus sur les côtés verticaux de la cellule des ressorts positionnés entre l'extrémité d'une fibres et son extrémité fictive si elle s'était déplacée proportionnellement à la compression. La figure 1.13 représente une courbe non linéaire pour la pression en fonction du volume et linéaire par rapport au nombre de contacts dans l'échantillon. Les résultats qu'ils obtiennent pour la pression sont proches du modèle défini par van Wyk (eqn. 1.8). Ils parviennent à estimer une valeur de la constante de proportionnalité du même ordre de grandeur que les résultats expérimentaux [60,61]. Ils retrouvent aussi une dépendance linéaire, comme dans l'équation 1.6, entre le nombre de contacts et le volume de la cellule. De même, ils obtiennent une courbe hystérétique entre la pression de compression et celle de relaxation, une boucle qui, bien que faible, ne disparaît pas même après plusieurs cycles. La figure 1.14 représente la courbe obtenue pour le neuvième cycle [60]. Les auteurs ont aussi observé une faible compression irréversible pendant les cinq premiers cycles environ, ce qui correspond à une perte d'au moins 2% du volume original. Or un milieu réel affiche une perte du volume sur un plus grand nombre de cycles [7]. Les auteurs expliquent cette différence par l'omission de la viscoplasticité des fibres.

Ben Boubaker et al. [63–65] ont développé un modèle discret de structure tissée. Ils considèrent le couplage entre des fibres chaînes et des fibres trames. Les fibres sont représentées par un réseau de nœuds (affectés d'une masse et d'une rigidité en rotation) connectés par des barres élastiques (fig. 1.15). Des interactions entre fibres peuvent être prises en compte au niveau des nœuds. Le tissu est soumis à une charge en traction. Les auteurs définissent l'énergie potentielle totale d'un sous-système (chaîne ou trame) comme la somme de l'énergie interne du sous-système

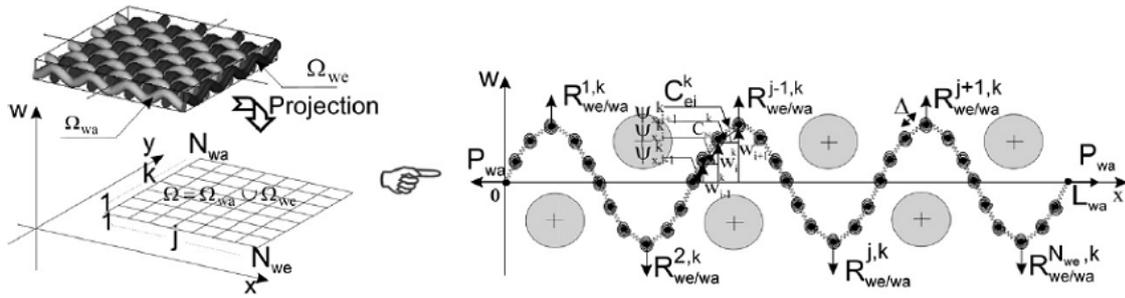


FIG. 1.15 – Modèle discret d’une structure tissée (Ben Boubaker et al. [64])

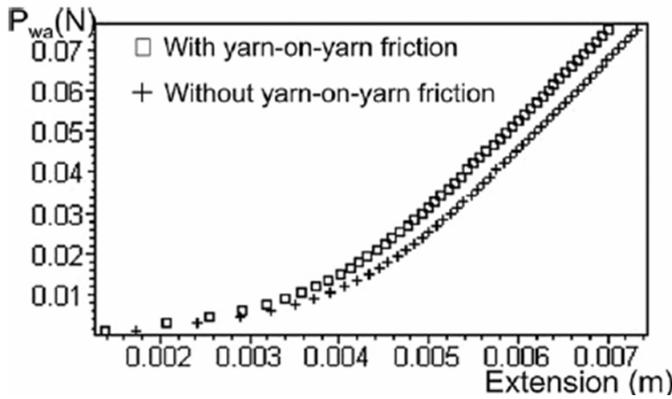


FIG. 1.16 – Traction uniaxiale d’une structure tissée : effet du frottement sur la courbe charge en traction-extension [64].

et du travail des forces extérieures. L’état d’équilibre est obtenu par minimisation de l’énergie totale. Ils introduisent également du frottement aux points de contact de type Coulomb. Ils observent les courbes non-linéaires de la force en traction en fonction de l’extension (fig. 1.16), les fibres commencent par se tendre (et résistent au transfert d’ondulation d’un sous-système à l’autre) puis s’étirent. L’introduction du frottement conduit à une augmentation de la raideur du tissé (fig. 1.16).

La quatrième étude présentée est celle de Rodney et al. [46]. Elle s’appuie également sur une discrétisation nodale des fibres (dans ce cas orientées aléatoirement). Mais la méthode de résolution diffère. Ils utilisent des techniques adaptées de la dynamique moléculaire, instrument généralement utilisé pour les chaînes polymères. Les fibres semi-flexibles sont discrétisées en une suite de nœuds sphériques (fig 1.17). Le rapport de forme est égal au nombre de nœuds par fibre. Leurs positions correspondent aux degrés de liberté du système. Sont pris en compte le

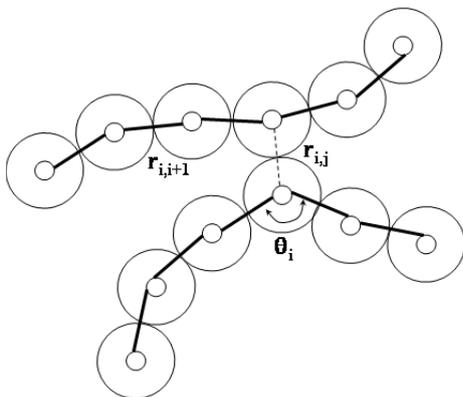


FIG. 1.17 – Schéma de deux fibres discrétisées en nœuds sphériques [46]

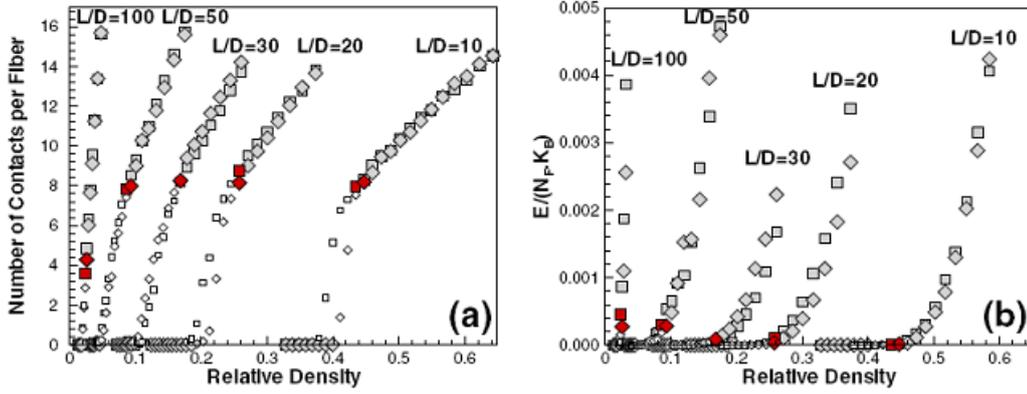


FIG. 1.18 – (a) Nombre de contacts par fibre et (b) énergie par fibre en fonction de la fraction volumique, pour différents rapports de forme (Rodney et al. [46])

comportement en traction et en flexion des fibres ainsi que leur non-recouvrement. L'énergie potentielle d'un tel système peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned}
 E = & \sum_{\substack{(i,i+1) \\ \text{consécutifs}}} \frac{K_S}{2} \left(1 - \frac{r_{i,i+1}}{D}\right)^2 + \sum_{\substack{(i-1,i,i+1) \\ \text{consécutifs}}} \frac{K_B}{2} (\theta_i - \pi)^2 \\
 & + \sum_{\substack{(i,j) \text{ non} \\ \text{consécutifs}}} \frac{K_I}{2} H(D - r_{i,j}) \left(1 - \frac{r_{i,j}}{D}\right)^{5/2} \quad (1.10)
 \end{aligned}$$

où  $K_S$  et  $K_B$  sont liées aux rigidités respectivement en traction et flexion des fibres.  $r_{i,i+1}$  est la distance entre deux nœuds consécutifs,  $r_{i,j}$  celle entre deux nœuds non consécutifs,  $\theta_i$  l'angle formé par trois nœuds consécutifs,  $H(D - r_{i,j})$  la fonction escalier de Heaviside. Les fibres, de diamètre  $D$ , sont initialement droites et orientées aléatoirement dans l'espace. Ils choisissent de simuler des compressions isostatiques par déplacements homothétiques des fibres avec la déformation (par rapport à leur centre de gravité), le système étant ensuite relaxé jusqu'à atteindre un état d'équilibre. La minimisation de l'énergie potentielle se fait à l'aide de l'algorithme de Verlet (agrémenté d'une condition sur le produit scalaire de la force par la vitesse d'un nœud de manière à permettre la convergence). Ce modèle permet ainsi aux auteurs d'étudier la percolation mécanique et les premiers stades de la déformation au-delà de la percolation, puisque les fibres peuvent se déformer. La figure 1.18 représente les résultats qu'ils obtiennent pour (a) le nombre de contacts par fibre et (b) l'énergie potentielle par fibre en fonction de la fraction volumique, pour différents rapports de forme ( $\alpha = L/D$ ). La première observation est la transition entre deux états à l'équilibre : un état où les fibres sont sans contact et un état où elles interagissent (nombre fini de contacts par fibre et énergie non nulle). Les configurations n'atteignant pas un équilibre (lors de la transition) sont indiquées par des symboles plus petits. En effet, la convergence des calculs pour des configurations à la transition est très lente et n'est pas atteinte sur le temps imparti. Les carrés et les losanges correspondent à deux états 3D aléatoires initiaux différents. La percolation mécanique est repérée par les gros symboles en rouge. Les fibres de relativement faible rapport de forme ( $\alpha < 100$ ) supportent environ 8 contacts à la percolation, ce nombre diminuant quand  $\alpha$  augmente. Sur la figure 1.19 sont reportées les valeurs obtenues par simulation (gros symboles) et des valeurs expérimentales ou simulées rapportées par Williams et al. [45] (petits cercles) (voir section 1.2.2). Rodney et al. utilisent comme courbe de lissage

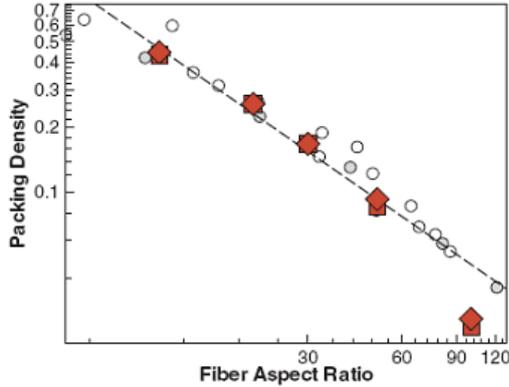


FIG. 1.19 – Fraction volumique de percolation mécanique en fonction du rapport de forme. La ligne pointillée correspond à  $\phi_C = 4,6/\alpha$  (Rodney et al. [46])

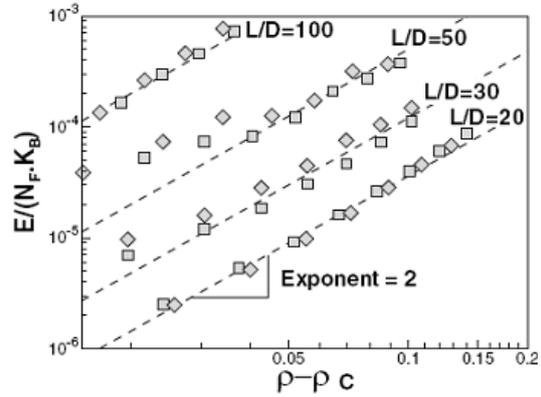


FIG. 1.20 – Graphe double-logarithmique de l'énergie en fonction de la différence entre la fraction volumique en compression et la fraction volumique de percolation mécanique (Rodney et al. [46])

$\phi_C = 4,6/\alpha$  pour des rapports de forme intermédiaires (entre 20 et 50), la valeur de 4,6 est proche mais légèrement inférieure aux résultats obtenus à partir de la théorie du volume exclu (§ 1.4). L'écart pour des rapports de forme supérieur est dû à la flexibilité des fibres. Les auteurs se sont aussi intéressés à l'exposant reliant l'énergie potentielle (par fibre) et la différence entre la fraction volumique en compression et la fraction volumique de percolation mécanique :  $E/N_F \sim (\phi - \phi_C)^\gamma$ . Ils observent que  $\gamma$  prend la valeur 2 et en déduisent donc un exposant de 3 reliant la pression en compression et la fraction volumique. Ils obtiennent toutefois des résultats différents des autres études présentées, la pression dépend de  $(\phi - \phi_C)^3$  et non de la différence de  $(\phi^3 - \phi_0^3)$ .

## Conclusion

Toutes ces études numériques traitent de la compression de systèmes de fibres sans lien permanent. Il ne semble pas exister, dans la littérature, d'étude de cisaillement sur de tels systèmes. Ce mode de déformation a principalement été étudié sur des systèmes présentant des liens permanents aux croisements de fibres, soit par extension du modèle de l'élasticité des fibres flexibles [11], soit par des modèles 2D aléatoires de fibres droites (« modèle mikado ») par éléments finis [66–70]. Une seule étude récente a été réalisée sur un réseau 3D (modélisant des filaments d'actine liés chimiquement) dans le cas des grandes déformations [71].

Plusieurs études ont donc été effectuées sur la prédiction du comportement mécanique d'un ensemble de fibres en compression. Toutes ont fourni une loi puissance reliant la pression et la fraction volumique avec un exposant de 3. Ceci est lié au mode de déformation c'est-à-dire la flexion des fibres entre points de contacts ainsi qu'à la variation du nombre de contacts. Mais ces études n'ont encore jamais été couplées à des observations de la microstructure d'échantillons réels. Pourtant des techniques d'observation ont été développées, surtout ces vingt dernières années, les moyens informatiques ayant atteint les capacités nécessaires.

## 1.5 Analyse d'images

De nombreuses travaux ont porté sur l'orientation des fibres dans des matériaux réels en particulier dans des arrangements quasi-2D comme le papier ou les mats servant de renfort dans des matériaux composites. C'est pourquoi ces études portent principalement sur des images 2D, l'extension à des images 3D est relativement récente.

### 1.5.1 Orientation des fibres sur des images 2D

En 2D, on peut approximativement différencier deux types d'images, les images des sections des fibres (fig. 1.21) et des images des longueurs des fibres (fig 1.22). Différentes méthodes ont donc été mises au point pour mesurer l'orientation des fibres.

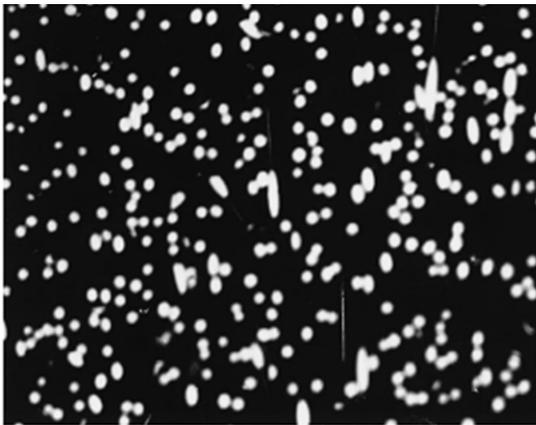


FIG. 1.21 – Image obtenue en microscopie par réflexion de fibres de verre dans une matrice PA66 (Mlekusch et al. [72])

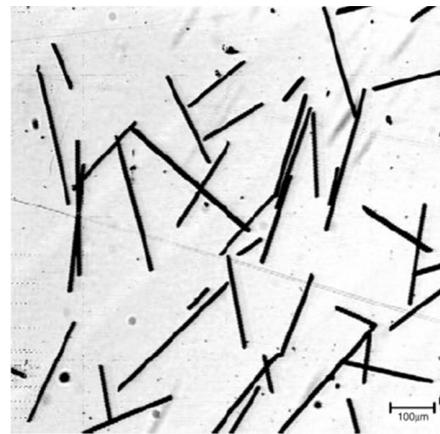


FIG. 1.22 – Image obtenue par microscopie en transmission de fibres de verre dans une boîte de Petri (Davidson et al. [73])

### Par mesure des sections elliptiques

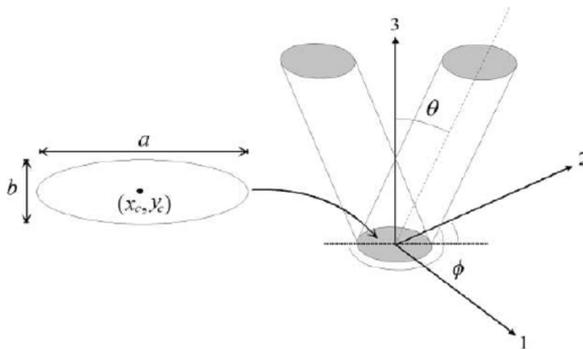


FIG. 1.23 – La position et l'orientation d'une fibre peut être déterminée à partir des paramètres de la coupe elliptique ( $a$ ,  $b$ ,  $x_c$ ,  $y_c$ ,  $\phi$ ). Cette méthode permet de déterminer l'angle  $\phi$  avec une ambiguïté de  $180^\circ$ . (Eberhardt et al. [74])

Cette méthode est basée uniquement sur la géométrie de la section elliptique de la fibre et permet par considérations stéréologiques de remonter aux propriétés volumiques (fraction volumique, orientation. . .) de l'échantillon. Elle n'est valable que pour des fibres droites de section circulaire, et nécessite un choix de coupe dépendant de l'orientation des fibres. En effet, si les fibres sont coupées sur leur longueur, leur section n'est plus elliptique. A l'opposé, si les fibres

sont quasiment perpendiculaires à la coupe, leur section sera très proche d'un disque avec une très grande incertitude sur les mesures. A partir des paramètres de l'ellipse, on peut déterminer l'orientation de la fibre (généralement notée  $\mathbf{p}(\phi, \theta)$ ). Si on nomme  $a$  le grand axe de l'ellipse et  $b$  le petit axe (fig 1.23), l'expression de l'angle  $\phi$  dans le plan de coupe est donné par la direction du grand axe (ou la direction du grand axe  $+ 180^\circ$ , l'étude du volume permet de lever cette ambiguïté) et l'angle  $\theta$  par rapport à la normale du plan de coupe correspond à  $\theta = \arccos(b/a)$ . La détermination de ces deux angles pour chaque fibre permet d'accéder à la distribution des orientations. On détermine ainsi [74,75] un tenseur d'orientation  $a_{ij}$  tel que

$$\begin{aligned} a_{11} &= \sin^2 \theta \cos^2 \phi \\ a_{22} &= \cos^2 \theta \cos^2 \phi \\ a_{33} &= \cos^2 \theta \\ a_{12} &= a_{21} = \sin^2 \theta \cos \phi \sin \phi \\ a_{13} &= a_{31} = \sin \theta \cos \theta \cos \phi \\ a_{23} &= a_{32} = \sin \theta \cos \theta \sin \phi \end{aligned}$$

Blanc et al. [76] ont tracé des graphes polaires (angle  $\phi$  et distance  $\theta$ ) pour déterminer les directions principales (fig 1.24). Ils se sont affranchis de l'ambiguïté sur  $\phi$  en traçant leurs graphe sur  $2\phi$ . Ils retrouvent ainsi trois taches correspondant aux trois directions principales de leur échantillon. Cette représentation s'apparente à celle issue de la transformée de Hough.

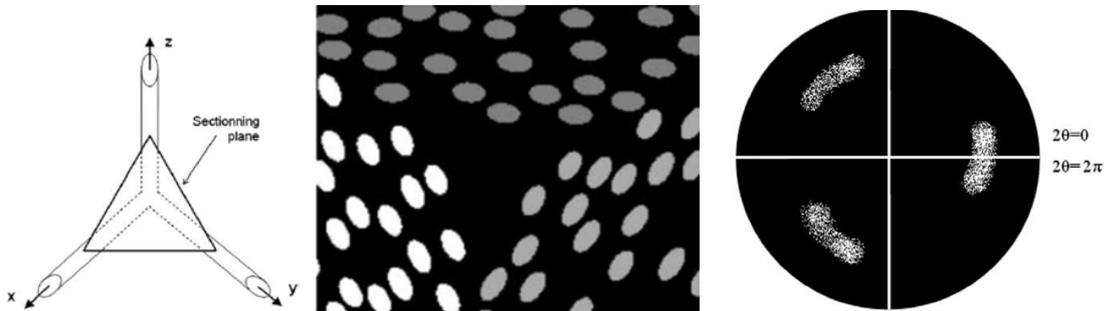


FIG. 1.24 – Schéma de coupe, coupe 2D et graphe polaire des orientations obtenues d'un composite dont les fibres sont orientées suivant les trois directions  $(1\ 0\ 0)$ . (Blanc et al. [76])

### Transformée de Hough

La technique de la transformée de Hough consiste à associer à chaque fibre une équation en coordonnées cartésiennes ou polaires, de la tracer ensuite dans l'espace des paramètres  $((a,b)$  ou  $(r, \theta)$ ) et ainsi de déterminer la distribution des orientations. On peut prendre comme exemple le travail de Xu et al. [77] présenté à la figure 1.25. A chaque fibre sont associées les coordonnées polaires  $(r, \theta)$  où  $r$  est la distance normale par rapport à l'origine (plus petite distance entre l'origine et la fibre) et  $\theta$  l'angle entre cette ligne normale à la fibre et l'axe  $x$ . Du tracé de la transformée de Hough, ils obtiennent une distribution des orientations, comme le montre la figure 1.25(b). Pour l'échantillon choisi, celle-ci n'est pas aléatoire mais présente un pic vers  $90^\circ$  et un autre plus large centré sur  $180^\circ$ .

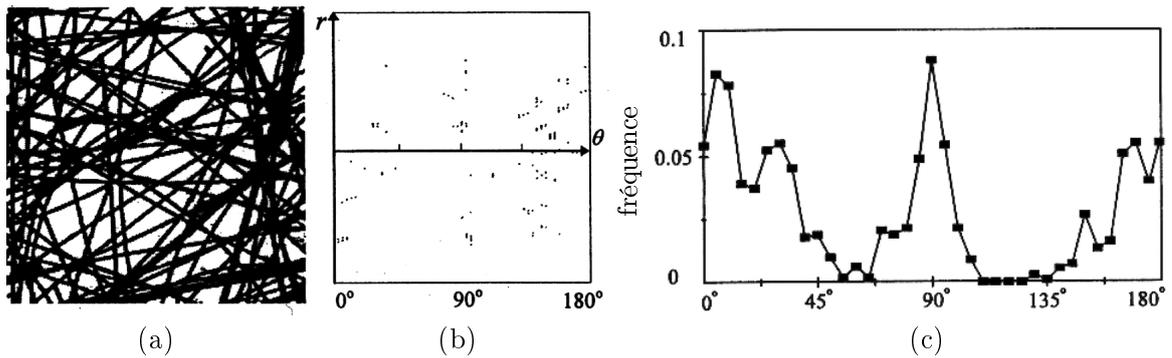


FIG. 1.25 – Image d'un échantillon d'aramide non-tissé (a), sa transformée de Hough dans l'espace  $(r, \theta)$  (b) et la distribution d'orientation des fibres en fonction de  $\theta$  (c) (Xu et al. [77])

### Autocorrélation

La distribution d'orientation des fibres est également donnée par des roses des orientations obtenues par autocorrélation des images. La valeur des pixels (noté  $F(x, y)$ ) dans l'image d'autocorrélation est donnée par

$$F(x, y) = \frac{\sum_{i,j} I(x, y) \cdot I(x + i, y + j)}{\sum I^2(x, y)}$$

où  $I(x, y)$  est la valeur du pixel situé en  $(x, y)$  de l'image de l'échantillon. L'intérêt de cette mesure est que la valeur des pixels de l'image d'autocorrélation est plus élevée dans les directions privilégiées. Sur cette image d'autocorrélation, l'intensité est sommée dans toutes les directions et reportée dans une représentation polaire sur une « rose des orientations ». La figure 1.26 représente une image de BMC (Bulk Molding Compounds) obtenue par Teyssier et al. [78] divisée en sous-images pour lesquelles des roses des orientations ont été tracées reproduisant les variations locales d'orientation du milieu.

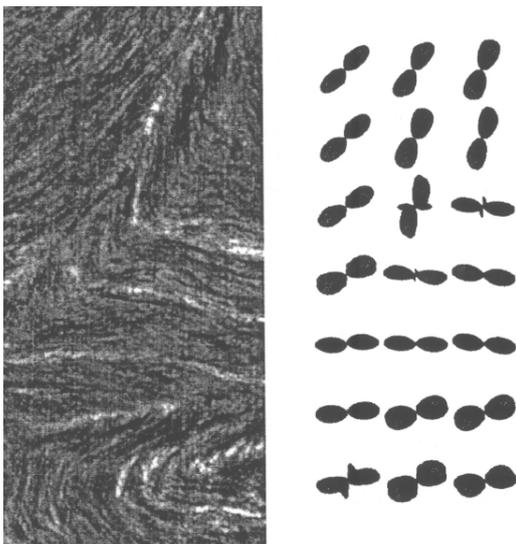


FIG. 1.26 – Image digitalisée d'un BMC et roses des orientations obtenues pour les 21 sous-images. (Teyssier et al. [78])

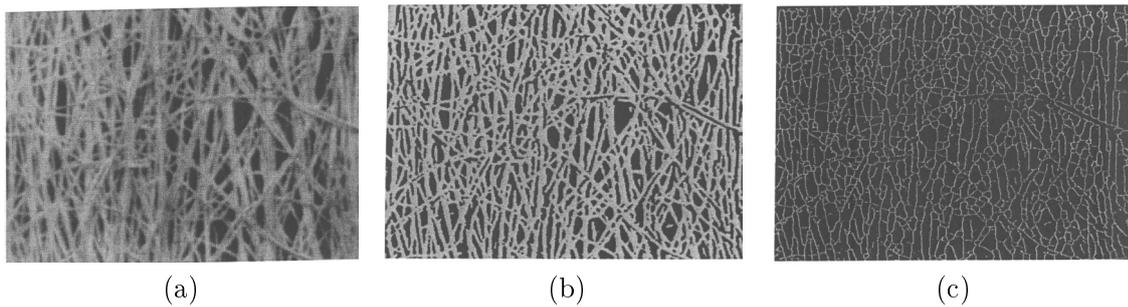


FIG. 1.27 – Exemple d’une image digitalisée (a) puis segmentée (binarisée) (b) et enfin squelettisée (c) (Gong et al. [79])

### Squelettisation

Gong et al. [79] mesurent l’orientation des fibre pour le système enchevêtré présenté à la figure 1.27(a). Pour cela, ils binarisent par segmentation leur image digitalisée (fig 1.27). Ils développent ensuite un algorithme de squelettisation. Celui-ci vise à réduire les fibres à leur épaisseur minimale (squelette filaire d’un pixel d’épaisseur) mais en gardant leur forme et leur orientation. Les fibres sont ainsi divisées en segments connectés de longueur et d’orientation variables. Cette méthode, qui permet également d’accéder au nombre de contacts dans l’échantillon (petits segments connectés à d’autres), reste très délicate à employer de façon systématique, les critères d’une bonne squelettisation étant très difficiles à déterminer pour un matériau donné. Les auteurs mesurent la distribution d’orientation à partir de l’orientation des segments de squelette. Pourdehimi et al. [80] et Talbot et al. [81] utilisent également cette technique.

Il faut noter que ces techniques (autocorrélation, squelettisation), présentées ici dans le cas d’image 2D, sont également utilisées aujourd’hui pour des images 3D.

### 1.5.2 Orientation des fibres sur des images 3D

La méthode pour obtenir des images 3D consiste à effectuer des images de coupes 2D du matériau à étudier et à les rassembler afin d’obtenir une image 3D. Dans la suite ne seront présentées que quelques techniques permettant d’obtenir des coupes 2D de façon non-destructive.

McGrath et al. [82] ont développé une technique optique permettant d’observer un échantillon sur une profondeur maximum de 1,3 mm (à partir d’images unitaires de  $1,077\text{mm} \times 0,797\text{mm} \times 14,9\mu\text{m}$  avec des voxels de  $\sim 3\mu\text{m} \times 2\mu\text{m} \times 15\mu\text{m}$ ) à l’aide d’un microscope inversé, d’une source lumineuse (400 nm) et d’une camera vidéo (détails dans [83]) (fig 1.28). Ils utilisent pour cela des échantillons transparents (thermoplastique : PMMA, fibres de verre) contenant comme traceurs des fibres de carbone. Après squelettisation des images, les auteurs déterminent les distributions d’orientation des fibres (fig 1.29) obtenues en sommant la longueur totale des fibres suivant différents angles solides.

Clarke et al. [84–86] ont utilisé comme source lumineuse un laser (514 nm), ce qui leur permet d’observer directement, par fluorescence, les fibres de verre (dans une matrice semi-transparente epoxy ou POM) sur des images de  $1\text{mm} \times 1\text{mm} \times 50\mu\text{m}$  avec une meilleure résolution que l’étude précédente (voxel  $0,25\mu\text{m} \times 0,25\mu\text{m} \times 0,3\mu\text{m}$ ). Ils en déduisent des tenseurs d’orientation et des fonction de probabilité de distribution (fig 1.30).

Une autre technique, plus récemment développée, est la tomographie aux rayons X (la source lumineuse est remplacée par une source aux rayons X. Elle a été utilisée par Delisée et al. sur des composites à base de fibres de bois [87,88], par Åström et al. sur des laines minérales [89] ou

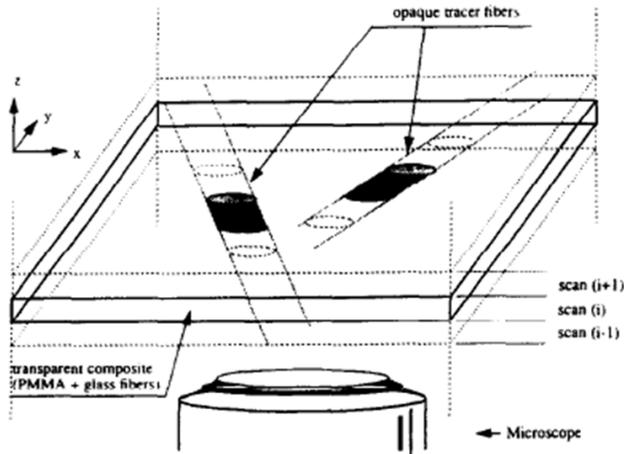


FIG. 1.28 – Schéma de coupes optiques. Des fibres de carbone sont introduites comme traceurs dans un composite transparent (PMMA + fibres de verre) (McGrath et al. [82])

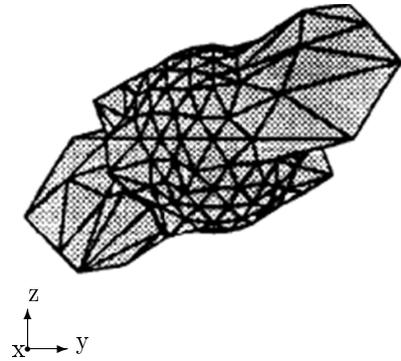


FIG. 1.29 – Histogramme 3D représentant une distribution d'orientation des fibres (McGrath et al. [82])

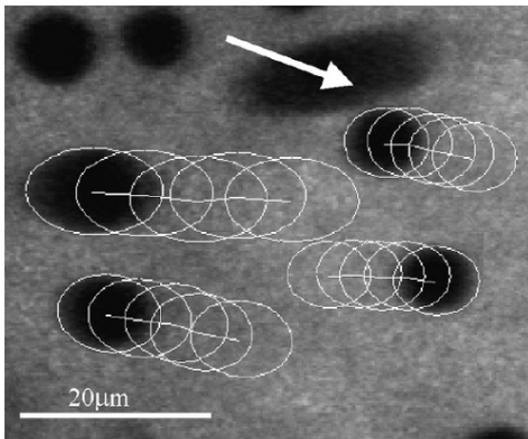


FIG. 1.30 – Schéma des ellipses de contours de fibres sur 5 coupes successives (fibres de verre dans une matrice polyarylamide) (Clarke et al. [86])

par Rolland du Roscoat sur du papier [90] pour une comparaison avec les modèles développés. Yang et al. (mats numérique et synthétique) [91], Eberhardt et al. (composite fibres de verre courte dans une matrice PP et feutre de polyarylamide) [92], Lux et al. (composite à base de fibre de bois) [93], Clyne et al. (laine d'acier frittée) [94,95] et Masse et al. (laine d'acier frittée ou non-frittée) [4] ont successivement utilisée cette technique pour mesurer (quantitativement) l'orientation des fibres, tous sont passés par la squelettisation du volume observé (fig 1.31).

Jusqu'à maintenant, à cause de la difficulté d'analyse, relativement peu d'études se sont intéressées au nombre de contacts entre fibres dans un échantillon volumique de distribution aléatoire des orientations. Les contacts sont pourtant l'élément à la base de la mécanique des milieux fibreux, en particulier en compression (voir la figure 1.6). En effet, le mode de déformation le plus couramment admis pour expliquer les lois puissances entre la pression et la fraction volumique (avec un exposant de 3) est la flexion des fibres entre points de contacts.

Afin de mieux comprendre les liens entre le comportement mécanique d'un ensemble de fibres et sa microstructure, nous avons mis au point un modèle numérique basé sur le comportement

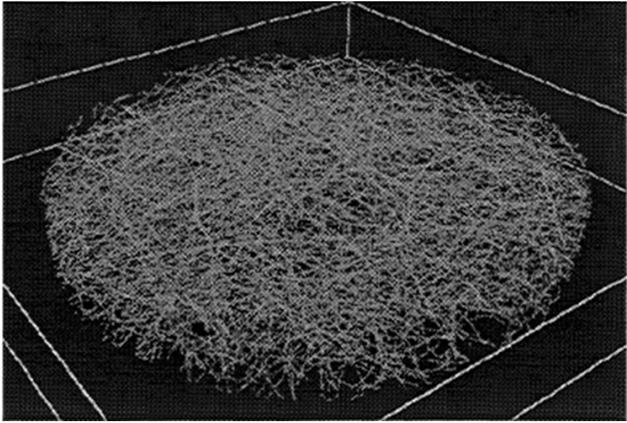


FIG. 1.31 – Image 3D du squelette d'un mat fibreux synthétique (Yang et al. [91])

individuel des fibres. Une approche de type dynamique moléculaire où les fibres sont discrétisées par une suite de segments a permis de limiter la charge des calculs, tout en reproduisant les principaux modes de déformation (traction, flexion). Cette approche est également adaptée à l'introduction de frottement entre fibres. Ce modèle sera présenté dans la partie 2. Les résultats obtenus lors de simulations de compressions isostatiques et de cisaillement d'ensembles de fibres seront développés dans la partie 3. Enfin, dans la partie 4, ce modèle sera utilisé pour la validation des outils d'analyse d'images ensuite appliqués à des volumes de laine d'acier (observés par tomographie aux rayons X).

# Chapitre 2

## Le modèle numérique

Ce chapitre est consacré à la description du modèle numérique que nous avons développé. Ce modèle s'appuie sur une discrétisation des fibres en éléments simples (segments) et s'inspire des techniques de la dynamique moléculaire pour les polymères. On présente au paragraphe 2.1 la discrétisation choisie ainsi que les forces prises en compte (élongation, flexion, non-recouvrement). Cette description est d'abord validée sur le cas simple du comportement de fibres isolées (§ 2.2). Notre modèle numérique est ensuite appliqué à des ensembles de fibres initialement placées et orientées aléatoirement (§ 2.3). Ces systèmes sont soumis à différentes sollicitations (compression isostatique, cisaillement) (§ 2.4). Le frottement entre fibres est également pris en compte (§ 2.5).

### 2.1 Modèle de fibres

Cette thèse vient en prolongement du travail de Rodney et al. [46]. Dans cette approche (décrite dans le paragraphe 1.4) chaque fibre est discrétisée en une suite d'éléments sphériques (collier de perles). Le rapport de forme de la fibre (rapport de la longueur sur le diamètre) est égal au nombre de perles décrivant chaque fibre. Selon ce modèle, chaque perle possède trois degrés de liberté qui sont ses déplacements dans les trois directions de l'espace. L'augmentation linéaire du nombre d'éléments avec le rapport de forme des fibres rend rapidement les calculs très lourds. L'idée, dans le cadre de cette thèse, est de diminuer le nombre de degrés de liberté (à même rapport de forme), en remplaçant les perles par des éléments cylindriques de même diamètre. Une fibre de diamètre  $D$  sera décrite par  $N$  segments de longueur  $\ell$  (fig 2.1). Un nombre suffisant de cylindres doit cependant être conservé pour garder une représentation mécanique correcte des

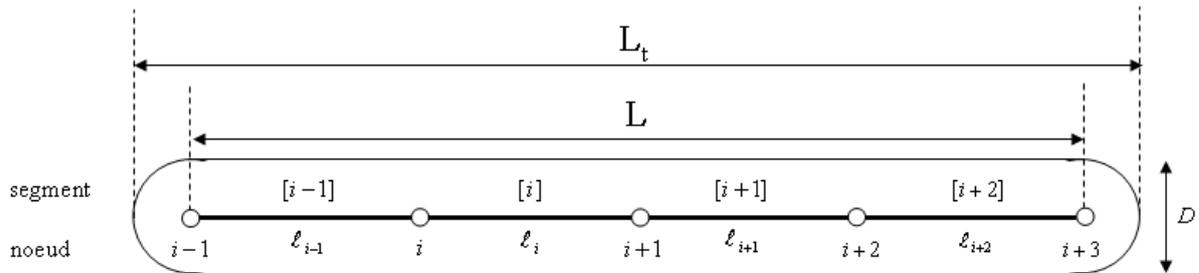


FIG. 2.1 – Schéma d'une fibre de diamètre  $D$  composée de quatre segments, ici notés de  $[i-1]$  à  $[i+2]$ . Le segment  $[i]$  relie les nœuds  $i$  et  $i+1$ .

fibres, en particulier lors de déformations faisant intervenir la flexion (voir §2.2). Dans la suite, on note  $[i]$  le segment de longueur  $\ell_i$  reliant les nœuds  $i$  et  $i + 1$ .

### 2.1.1 Energie potentielle

De façon identique à [46], le système peut être décrit par une énergie potentielle composée de trois termes :

$$E = \sum_{[i] \text{ segments}} \frac{K_S}{2} \left(1 - \frac{\ell_i}{\ell_0}\right)^2 + \sum_{\substack{([i-1],[i]) \\ \text{consécutifs}}} \frac{K_B}{2} (\theta_i - \pi)^2 + \sum_{\substack{([i],[j]) \text{ non} \\ \text{consécutifs}}} \frac{K_I}{2} H(D - r_{i,j}) \left(1 - \frac{r_{i,j}}{D}\right)^{5/2} \quad (2.1)$$

Le premier terme modélise la résistance à l'élongation à l'aide d'un ressort de rigidité  $K_S$  le long d'un segment.  $\ell_i$  est la longueur du ressort et  $\ell_0$  sa longueur à vide. Il n'y a pas de dissymétrie entre les élongations positive et négative.

Le deuxième terme correspond à un ressort angulaire de rigidité  $K_B$  qui représente la résistance en flexion d'une fibre. L'angle  $\theta_i$  est l'angle formé par les segments  $[i-1]$  et  $[i]$  (fig 2.2). L'angle d'équilibre est  $\pi$ , ce qui conduit à une fibre droite hors sollicitation.

Le troisième terme modélise les interactions entre fibres et plus précisément leurs contacts et non-interpénétrations. Il prend une valeur non nulle quand deux segments (deux fibres) sont à une distance  $r_{i,j}$  inférieure à la distance  $D$ , diamètre des fibres. Il prend la forme d'un potentiel de Hertz [96].  $K_I$  est la constante introduite dans le potentiel de Hertz,  $H(D - r_{i,j})$  la fonction de Heaviside. La forme « puissance 5/2 » du potentiel d'interaction entre fibres permet d'avoir une augmentation très rapide de la répulsion tout en gardant une dérivée continue et donc un champ de force continu nécessaire à une stabilité du système, ce qui n'aurait pas été le cas avec un potentiel de type sphère dure. L'introduction d'autres autres types de potentiels (en arctangente ou en exponentielle) n'a pas montré de changement remarquable dans le comportement global d'un ensemble de fibres [46].

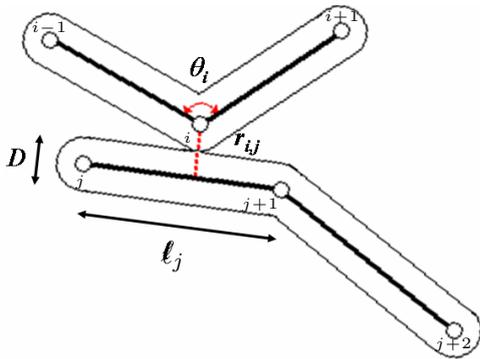


FIG. 2.2 – Schéma de deux fibres de diamètre  $D$  composées chacune de deux segments de longueur  $\ell_i$  en interaction

### 2.1.2 Forces et tenseur des contraintes

Des trois termes de l'énergie potentielle (eqn 2.1) découlent les trois forces suivantes : les forces d'élongation, de flexion et de répulsion.

### Forces d'élongation (traction/compression)

La force d'élongation est celle d'un ressort le long du segment, de direction la direction du segment et d'intensité

$$F_S = -\frac{K_S}{\ell_0} \left(1 - \frac{\ell_i}{\ell_0}\right) \quad (2.2)$$

Elle s'applique aux deux nœuds des extrémités du segment, de norme égale et de directions opposées.

### Forces de flexion

La force de flexion agit perpendiculairement aux segments (fig 2.3). Elle fait intervenir deux segments consécutifs, donc trois nœuds consécutifs. L'intensité de la force équivaut à

$$F_B = \frac{K_B}{\ell_{\{i-1 \text{ ou } i\}}} (\theta_i - \pi) \quad (2.3)$$

où  $\ell_{i-1}$  est la longueur de  $[i-1]$  et  $\ell_i$  celle de  $[i]$ . La direction est donnée par,

$$\begin{aligned} \text{sur le nœud } i-1 : & \quad \vec{I}_{i-1} = \vec{t}_i - \vec{t}_{i-1} \cos \theta_i \\ \text{sur le nœud } i+1 : & \quad \vec{I}_{i+1} = \vec{t}_{i-1} - \vec{t}_i \cos \theta_i \end{aligned}$$

$\vec{t}_{i-1}$  vecteur directeur unitaire de  $[i-1]$  dans le sens  $i$  vers  $i-1$ ,  $\vec{t}_i$  vecteur directeur unitaire de  $[i]$  dans le sens  $i$  vers  $i+1$ .

Afin de s'assurer de l'équilibre des forces du système, le nœud  $i$  subit une force égale à l'opposée de la somme des forces sur les nœuds  $i-1$  et  $i+1$ .

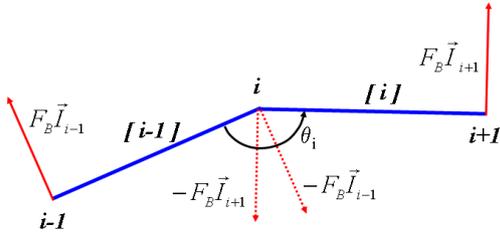


FIG. 2.3 – Schéma de l'application de la force de résistance à la flexion : la force sur le nœud  $i-1$  s'applique dans la direction  $\vec{I}_{i-1}$  perpendiculaire au segment  $[i-1]$  et celle sur le nœud  $i+1$  s'applique dans la direction  $\vec{I}_{i+1}$  perpendiculaire au segment  $[i]$ . Pour que le système soit à l'équilibre le nœud  $i$  supporte une force égale à l'opposée de la somme des forces sur les nœuds  $i-1$  et  $i+1$ .

### Forces de répulsion

Le dernier type de force issue de l'énergie potentielle est la force de répulsion entre segments. Le gradient du troisième terme de l'équation 2.1 donne :

$$F_I = -\frac{5}{4} \frac{K_I}{D} \left(1 - \frac{r_{i,j}}{D}\right)^{3/2} \quad (2.4)$$

Cette force n'agit que dans le cas où la distance  $r_{i,j}$  entre les segments  $[i]$  et  $[j]$  est inférieure à  $D$  le diamètre des fibres. La distance  $r_{i,j}$  est la plus petite distance entre les deux segments  $[i]$  et  $[j]$ . Elle est calculée par la méthode proposée par Kumar et al. [97]. Ils introduisent une variable  $t_i$  qui se déplace le long d'un segment telle que  $-0,5 \leq t_i \leq 0,5$ , le milieu du

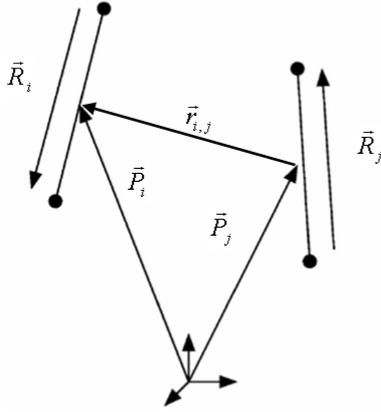


FIG. 2.4 – Vecteurs utilisés pour modéliser les interactions entre segments.  $\vec{R}_i$  caractérise le segment  $[i]$  (direction et longueur) et  $\vec{P}_i$  donne la position du milieu du segment (schéma de Kumar et al. [97])

segment correspondant à  $t_i = 0$ . Le vecteur distance  $\vec{r}_{i,j}$  entre deux segments est alors donné par  $\vec{r}_{i,j} = \vec{P}_i + t_i \vec{R}_i - (\vec{P}_j + t_j \vec{R}_j)$  où  $\vec{P}_i$  et  $\vec{P}_j$  pointent vers les milieux des segments  $[i]$  et  $[j]$  respectivement,  $\vec{R}_i$  et  $\vec{R}_j$  étant les vecteurs directeurs de ces segments. A partir de la minimisation de la distance  $r_{i,j}$ , c'est-à-dire de ses dérivées par rapport à  $t_i$  et  $t_j$ , et selon les notations de la figure 2.4, les auteurs obtiennent

$$t_i = \frac{(\vec{P}_i - \vec{P}_j) \cdot (R_j^2 \vec{R}_i - R_{ij} \vec{R}_j)}{R_{ij}^2 - R_i^2 R_j^2} \quad t_j = \frac{(\vec{P}_j - \vec{P}_i) \cdot (R_i^2 \vec{R}_j - R_{ij} \vec{R}_i)}{R_{ij}^2 - R_i^2 R_j^2}$$

avec  $R_i^2 = \vec{R}_i \cdot \vec{R}_i$ ,  $R_j^2 = \vec{R}_j \cdot \vec{R}_j$ , et  $R_{ij} = \vec{R}_i \cdot \vec{R}_j$ . Si  $t_i > 0,5$  ou  $t_i < -0,5$ , sa valeur est ramenée à  $0,5$  ou  $-0,5$  respectivement, c'est le cas où la plus petite distance est obtenue sur une extrémité de segment. Il en est de même pour  $t_j$ . La force est appliquée sur les nœuds des extrémités des segments suivant la règle du bras de levier, c'est-à-dire avec un coefficient proportionnel à la distance de l'extrémité au point de contact :  $(0,5 - t_i)$  sur le nœud  $i$  et  $(0,5 + t_i)$  sur le nœud  $i + 1$  du segment  $[i]$ , la même démarche étant appliquée au segment  $[j]$ .

### Tenseur des contraintes, pression

A partir des forces agissant sur chaque nœud  $i$ , on déduit le tenseur des contraintes macroscopiques [98] :

$$\sigma^{(kl)} = \frac{1}{2V} \sum_i \sum_{j>i} (\vec{r}_{ij}^k \vec{F}_{ij}^l + \vec{r}_{ij}^l \vec{F}_{ij}^k)$$

avec  $V$  le volume de la cellule,  $\vec{r}_{ij}^k$  la  $k$ -ième composante de la distance relative entre les nœuds  $i$  et  $j$  en interaction ( $j$  peut être  $i + 1$ ), et  $\vec{F}_{ij}^l$  la  $l$ -ième composante de la force d'interaction entre  $i$  et  $j$ . La façon dont la matrice des contraintes est calculée lui assure d'être symétrique. On peut en déduire la pression dans les échantillons. Elle correspond à la moyenne des termes diagonaux :

$$P = \frac{1}{3} \sum_{k=1}^3 \sigma^{(kk)}$$

## 2.2 Comportement d'une fibre isolée

Les propriétés mécaniques d'une fibre isolée sont caractérisées par son comportement lors de déformations de traction, de flexion et de flambement. Nous analysons ces déformations pour

finalemeut en déduire les relations entre différentes grandeurs du modèle telles que la constante d'élongation  $K_S$ , de flexion  $K_B$ , le diamètre  $D$  et la longueur  $L$  des fibres ainsi que le nombre de segments par fibre choisi  $N$ .

### 2.2.1 La traction

En traction, seul le premier terme de l'énergie potentielle (eqn. 2.1) intervient. La déformation s'exprime par

$$\epsilon = \frac{\ell_0 - \ell_i}{\ell_0}$$

et la contrainte

$$\sigma = \frac{F}{S} = \frac{K_S}{\ell_0 \pi D^2 / 4} \left( \frac{\ell_0 - \ell_i}{\ell_0} \right) = \frac{4K_S}{\ell_0 \pi D^2} \epsilon$$

d'où par comparaison avec la loi de Hooke, on obtient un module d'Young pour la fibre

$$E_f = \frac{4K_S}{\ell_0 \pi D^2}$$

La constante d'élongation  $K_S$  est directement contrôlée par le module d'Young de la fibre  $E_f$ .

### 2.2.2 La flexion

Afin de vérifier son comportement en flexion, une fibre isolée, composée de  $(N - 1)$  segments, est encastrée à une extrémité et soumise à une force verticale  $F$  à l'autre extrémité (Fig. 2.5). On calcule son énergie potentielle à l'équilibre. On peut montrer que la variation de l'énergie de traction/compression est négligeable. L'énergie potentielle est composée de l'énergie de courbure diminuée du travail de la force appliquée.

$$E = \sum_{i=1}^{N-2} \left( \frac{1}{2} K_B (\theta_i - \pi)^2 \right) - F\delta \quad (2.5)$$

On peut exprimer la flèche à l'extrémité  $\delta$  comme la somme des déplacements verticaux des nœuds ( $x_i$ ) en fonction des  $i$  angles  $\theta_i$  (hypothèse des petites déformations).

$$\begin{aligned} \frac{x_i}{\ell_0} &= \sin \left( \sum_i (\pi - \theta_i) \right) \approx \sum_i (\pi - \theta_i) \\ \Rightarrow \frac{\delta}{\ell_0} &= \sum_{i=1}^{N-2} (N - i - 1) (\pi - \theta_i) \end{aligned} \quad (2.6)$$

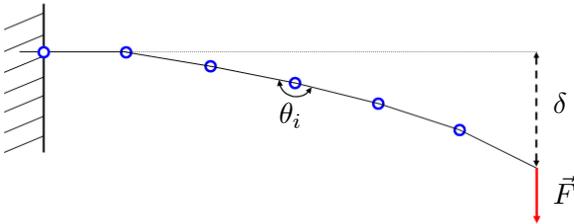


FIG. 2.5 – Schéma d'une poutre en flexion soumise à une force verticale  $\vec{F}$ .

On introduit l'expression de la flèche dans l'énergie puis on minimise par rapport aux angles  $\theta_i$

$$\frac{\partial E}{\partial \theta_i} = K_B(\theta_i - \pi) + F\ell_0(N - i - 1) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \pi - \theta_i = \frac{F\ell_0}{K_B}(N - i - 1)$$

L'expression de la flèche devient (d'après l'expression de la somme des carrés)

$$\frac{\delta}{\ell_0} = \frac{F\ell}{6K_B}(N - 2)(N - 1)(2N - 3) \quad (2.7)$$

donc, après normalisation par le diamètre de la fibre, on obtient

$$\frac{\delta}{D} = \frac{F\kappa}{3} \left(\frac{L}{D}\right)^3 \quad \text{où} \quad \kappa = \frac{D^2}{K_B\ell_0} \left(1 - \frac{\ell_0}{L}\right) \left(1 - \frac{\ell_0}{2L}\right) \quad (2.8)$$

où  $L = N.\ell_0$ . L'expression de la flèche est similaire à celle donnée par la théorie des poutres

$$\frac{\delta}{D} = \frac{F\kappa}{3} \left(\frac{L}{D}\right)^3 \quad \text{où} \quad \kappa = \frac{D^2}{E_f I}$$

où  $E_f$  est le module d'Young et  $I$  le moment quadratique de la poutre. On en déduit une correspondance entre  $\frac{D^2}{EI}$  et  $\frac{D^2}{K_B\ell_0} \left(1 - \frac{\ell_0}{L}\right) \left(1 - \frac{\ell_0}{2L}\right)$  qui, dans la limite où le nombre de segments tend vers  $\infty$  c'est-à-dire si  $\ell/L \rightarrow 0$ , se simplifie en  $\frac{D^2}{K_B\ell_0}$ .

Le comportement d'une fibre lors de plus grandes déformations a aussi été vérifié. Pour cela, des simulations ont été réalisées pour différentes discrétisations à rapport de forme constant. Les valeurs de la flèche obtenues en fonction de la force appliquée sont reportées sur le graphe 2.6 pour des fibres de rapport de forme  $L/D = 19$  discrétisées respectivement en 19 segments (correspondant au modèle collier de perles [46]) et 4 segments. Pour évaluer leur pertinence, des valeurs issues de simulation par Éléments Finis (EF) ont également été reportées. Elles sont calculées pour une poutre de section carrée de même rapport de forme avec le code Comsol. On remarque que les courbes modèles et EF, superposées dans le domaine linéaire, restent en bon accord dans le domaine non-linéaire, en particulier dans le cas d'une discrétisation plus fine (19 segments). La discrétisation en seulement 4 segments induit une rigidité supplémentaire à la fibre sans toutefois modifier la tendance du comportement.

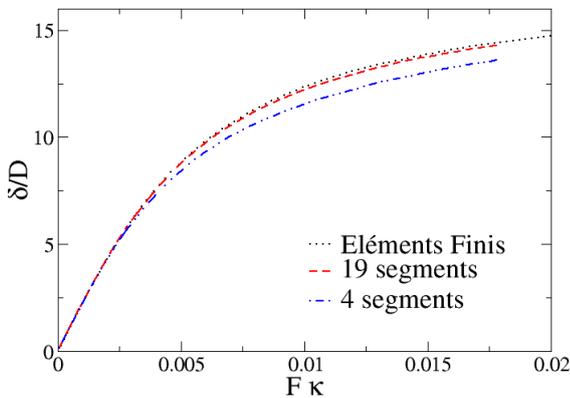


FIG. 2.6 – Comparaison entre différentes discrétisations d'une fibre telle que  $L/D = 19$  (soit  $L_t/D = 20$ ) et les éléments finis de la flèche adimensionnée en fonction de la force adimensionnée.

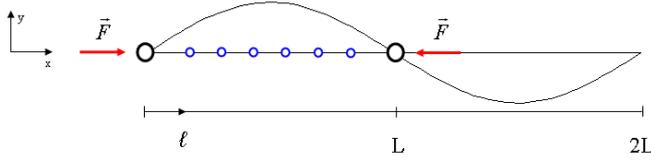


FIG. 2.7 – Schéma d'une poutre articulée aux extrémités soumise à des forces axiales, de déformation sinusoïdale de période  $2L$ .

### 2.2.3 Le flambement

Le flambement est une instabilité de la poutre en compression. Dans un modèle discret, il correspond à une configuration où la matrice dynamique du système  $\left[ \frac{\partial^2 E}{\partial r_i^k \partial r_j^l} \right]$  admet une valeur propre strictement négative.

Dans l'analyse suivante, on ne retient que les termes transverses à la fibre, c'est-à-dire susceptibles de causer le flambement, la matrice dynamique devenant alors  $\frac{\partial^2 E}{\partial y_i \partial y_j}$ . On considère une poutre de longueur  $L$  articulée aux extrémités. Pour garder une solution analytique, on applique des conditions périodiques à cette fibre sur une longueur  $2L$  (fig 2.7). La matrice dynamique est de structure bande car le terme d'élongation couple un nœud  $n$  seulement à ses voisins de gauche et de droite ( $n-1$  et  $n+1$ ) et le terme de flexion couple un nœud  $n$  aux nœuds  $n-2$ ,  $n-1$ ,  $n+1$ ,  $n+2$ . La ligne  $n$  contient les termes ( $\ell_0$  longueur à vide du segment,  $\ell$  sa longueur perturbée)

	$n-2$	$n-1$	$n$	$n+1$	$n+2$
nœud $n$	$K_B/\ell^2$	$\frac{K_S}{\ell_0 \ell} \left(1 - \frac{\ell}{\ell_0}\right)$ $-4 K_B/\ell^2$	$-2 \frac{K_S}{\ell_0 \ell} \left(1 - \frac{\ell}{\ell_0}\right)$ $6 K_B/\ell^2$	$\frac{K_S}{\ell_0 \ell} \left(1 - \frac{\ell}{\ell_0}\right)$ $-4 K_B/\ell^2$	$K_B/\ell^2$

Cette matrice admet comme vecteurs propres des ondes planes. On cherche la première valeur propre strictement négative. Ce qui conduit à la valeur critique de longueur de segment  $\ell_c$  à partir de laquelle le système flambe.

$$\text{Si } \frac{\ell}{\ell_0} < \frac{\ell_c}{\ell_0} = \frac{1 + \sqrt{1 - 16 \frac{K_B}{K_S} \sin^2 \left( \frac{\pi}{2N} \right)}}{2} \quad (2.9)$$

Ce mode correspond à une sinusoïde de période  $2L$ . Comme le montre la figure 2.7, elle correspond bien sur la longueur  $L$  à une déformation de flambement. Par l'intermédiaire d'une force de compression et de la longueur critique, on déduit l'expression de la force critique au delà de laquelle la fibre flambe :

$$F_c = \frac{K_S}{\ell_0} \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{1 - 16 \frac{K_B}{K_S} \sin^2 \left( \frac{\pi}{2N} \right)} \right) \quad (2.10)$$

Dans la limite où  $N$  le nombre de segments tend vers  $\infty$ , on retrouve la forme de la force critique donnée par la théorie d'Euler, soit :

$$(\text{Euler}) \quad F_c = \pi^2 \frac{E_f I}{L^2} \quad (\text{modèle}) \quad F_c \approx \pi^2 \frac{K_B \ell_0}{L^2}$$

Comme dans le cas de la déformation en flexion, on trouve la même correspondance entre  $K_B$  et  $\frac{E_f I}{\ell_0}$ .

### 2.2.4 Relations entre les grandeurs du modèle

Le modèle proposé ici, bien que très simple, parvient donc à modéliser les modes principaux de déformation de fibres (traction, flexion, flambement) avec pertinence. On remarque qu'il existe des relations entre les paramètres matériau tels que le module de flexion  $E_f I$  et les paramètres numériques comme la longueur de la fibre  $L$ , le diamètre  $D$  et le nombre de segments de discrétisation  $N$ . Afin de reproduire le comportement d'une poutre de section circulaire ( $I = \frac{\pi D^4}{64}$ ) et de module d'Young  $E_f$ , les valeurs de  $K_S$  et  $K_B$  doivent être choisies telles que :

$$K_S = \frac{\pi D^2 L}{4N} E_f \quad K_B = \frac{N}{L} E_f I$$

On obtient ainsi, pour le système :

$$\frac{D^2}{\ell_0^2} = 16 \frac{K_B}{K_S} \quad \text{soit} \quad \frac{L}{D} = \frac{N}{4} \sqrt{\frac{K_S}{K_B}}$$

En toute rigueur, pour un type de fibre donné ( $E_f, I, D, L$ ), pour une discrétisation donnée,  $K_S$  et  $K_B$  sont couplées par les relations précédentes. Comme on le verra au chapitre 3, pour des raisons essentiellement numériques, nous nous sommes toutefois permis de décorréler les valeurs de  $K_S$  et  $K_B$ .

### 2.2.5 Normalisation

Le travail présenté ici est un travail théorique, les grandeurs matériau (constante d'élongation  $K_S$ , flexion  $K_B$ , répulsion  $K_I$ , la longueur  $L_t$  et le diamètre  $D$  des fibres) sont liées entre elles et dépendent du système simulé. Les résultats seront présentés de façon normalisée par rapport au nombre de fibres  $N_F$ , à  $K_B$ , à la longueur totale d'une fibre  $L_t = L + D$  (les fibres simulées ayant toutes la même longueur totale) et à celle d'un segment  $\ell_0$ . L'énergie  $E$  sera donc normalisée par  $L_t / (N_F \cdot K_B \ell_0)$ , la contrainte  $\sigma$  et la pression  $P$  par  $(L_t)^4 / (K_B \ell_0)$ .

## 2.3 Génération d'un ensemble de fibres

Le but de cette thèse est d'étudier le comportement mécanique d'un ensemble aléatoire 3D de fibres. La cellule de simulation est choisie cubique. Afin de s'affranchir des effets de bords, des conditions périodiques sont appliquées (fig 2.8). À chaque fibre sortant de la cellule est associée son image périodique à l'intérieur de la cellule. Dans ces conditions, il faut choisir une dimension

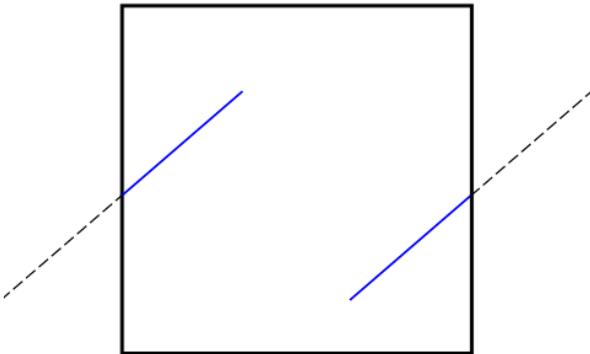


FIG. 2.8 – Schéma d'une cellule avec conditions périodiques aux bords, une fibre et son image périodique.

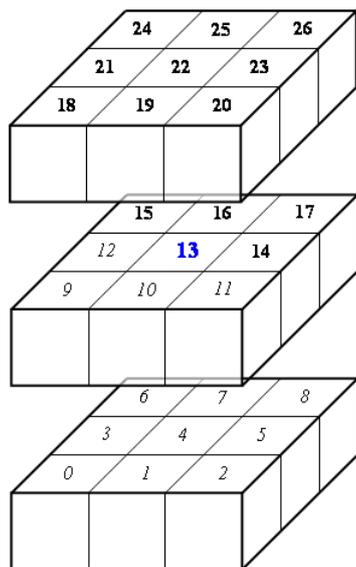


FIG. 2.9 – Schéma d'une cellule subdivisée en  $3 \times 3 \times 3$  boîtes (espacées pour une meilleure lisibilité).

de la cellule supérieure à celle de la fibre. Afin de diminuer le temps de simulation, la méthode de la liste des voisins est introduite [98]. Elle consiste à subdiviser la cellule en  $M \times M \times M$  boîtes pour limiter le nombre de recherches d'interactions de répulsion entre segments (fig 2.9). Le nombre  $M$  est défini comme le résultat de la division entière du côté de la cellule par une longueur critique correspondant à la distance au-delà de laquelle deux segments ne peuvent plus être en interaction. Pour le modèle, cette longueur critique vaut  $\ell_0 + D$  (un facteur de 1,2 est introduit dans le cas du cisaillement pour tenir compte du « glissement » des cellules les unes par rapport aux autres (§2.4.2)). Les segments sont répertoriés dans les boîtes selon leur centre, et l'on ne regarde que les interactions de répulsion des segments entre boîtes adjacentes. La figure 2.9 représente les boîtes contenues dans une cellule 3D dans le cas où  $M$  est minimum et égal à 3. Si on regarde la boîte 13, elle est adjacente à toutes les autres, mais pour ne pas compter deux fois les interactions, les voisins des segments de 13 ne seront cherchés que dans les boîtes de 14 à 26. Les conditions périodiques sont également appliquées aux boîtes. Ainsi, la boîte 26 sera associée à 24, 18, 19, 20, et 0 à 8.

Dans la configuration initiale, les fibres sont uniformément réparties dans la cellule de simulation, la position de leur premier nœud est choisie par une fonction aléatoire rapportée dans la cellule. L'orientation des fibres est également tirée par une fonction aléatoire dans le cas de l'angle azimutal. L'angle polaire est choisi selon une distribution pondérée par le sinus d'un nombre aléatoire afin d'obtenir une distribution angulaire uniforme [20]. Les fibres sont introduites droites sans tenir compte des recouvrements. Une relaxation initiale du système conduira aux réarrangements provoqués par l'encombrement stérique.

## 2.4 Evolution d'un ensemble de fibres

Le modèle présenté ici permet de modéliser des sollicitations (compression ou cisaillement) en imposant des incréments de déformation. Pour chaque incrément de déformation, on détermine l'état d'équilibre par itérations successives suivant un schéma numérique de type « dynamique trempée » : dans la suite, on fera référence à cette étape sous la dénomination de « relaxation ».

### 2.4.1 Procédure pour atteindre l'état d'équilibre

Le modèle présenté dans cette thèse permet d'obtenir des états d'équilibre successifs pour un système en cours de déformation. Pour cela, la cellule est déformée par incréments et entre chaque incrément de déformation, le système est relaxé sur plusieurs centaines de milliers de pas. A chaque pas, les éléments sont déplacés selon la méthode suivante :

1. on calcule les forces subies par chaque élément. (§2.1.2)
2. on détermine les nouvelles positions des segments à l'aide d'un algorithme de Verlet basé sur les forces subies et les positions antérieures des nœuds.
3. on calcule les grandeurs permettant l'analyse du système (tenseur des contraintes, nombre de contacts. . .)

L'algorithme de Verlet est basé sur la résolution explicite de l'équation de Newton  $\mathbf{a}(t) = \partial^2 \mathbf{r}(t) / \partial t^2 = \mathbf{f}(t) / m$  (avec  $\mathbf{f}(t)$  la somme des forces appliquées sur un nœud et  $m$  sa masse fictive) à partir du développement de Taylor de la position d'un nœud par rapport à un incrément de temps  $\delta t$ .

$$\mathbf{r}(t + \delta t) = \mathbf{r}(t) + \frac{\partial \mathbf{r}(t)}{\partial t} \delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathbf{r}(t)}{\partial t^2} \delta t^2 + \dots$$

$$\mathbf{r}(t - \delta t) = \mathbf{r}(t) - \frac{\partial \mathbf{r}(t)}{\partial t} \delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathbf{r}(t)}{\partial t^2} \delta t^2 + \dots$$

La nouvelle position d'un nœud est donnée par la somme des deux expressions précédentes

$$\mathbf{r}(t + \delta t) = 2 \mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t - \delta t) + \delta t^2 \frac{\mathbf{f}(t)}{m}$$

La vitesse à l'instant  $t$  dépend du déplacement du nœud :  $\mathbf{v}(t) = \frac{\mathbf{r}(t+\delta t) - \mathbf{r}(t-\delta t)}{2\delta t}$ . Pour atteindre l'équilibre, un algorithme de « dynamique trempée » est introduit, c'est-à-dire une condition sur le produit scalaire de la force et de la vitesse est ajoutée et conduit à l'annulation de l'énergie cinétique du nœud quand celui-ci est négatif

$$\text{Si } \mathbf{f}(t) \cdot \mathbf{v}(t) < 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{r}(t + \delta t) = \mathbf{r}(t) + \frac{1}{2} \delta t^2 \frac{\mathbf{f}(t)}{m}$$

Le paramètre crucial de cette méthode est le pas de temps. En effet cette méthode ne permet de déplacer que les extrémités de segments. Donc, si le pas de temps est trop grand, on risque de manquer des événements de type « croisement de segments ». Une condition est donc imposée sur le pas de temps afin de les détecter pour les éviter. Elle considère l'intersection d'un segment et de l'aire décrite par le déplacement d'un autre segment (fig 2.10). Elle est implémentée comme suit

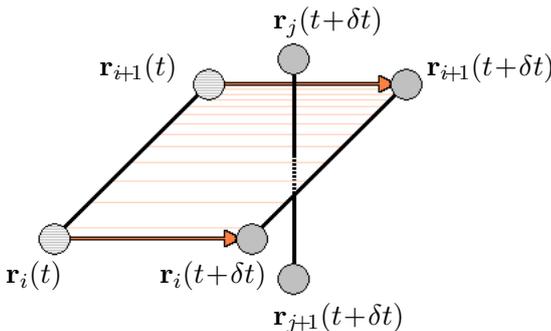


FIG. 2.10 – Condition sur le déplacement des fibres : la nouvelle position d'un segment  $[j]$  ne doit pas intersecter l'aire décrite par le déplacement du segment  $[i]$ .

1. on calcule toutes les nouvelles positions des nœuds à  $t + \delta t$
2. segment par segment, on cherche l'aire décrite par le déplacement d'un segment (entre  $t$  et  $t + \delta t$ ) et on regarde si aucun autre segment (dans sa nouvelle position) n'intersecte cette aire.
3. si aucun croisement n'est détecté les nouvelles positions sont validées, sinon on recommence avec un paramètre d'intégration diminué de moitié (tant que celui-ci n'a pas atteint une valeur minimum).

Les calculs effectués pour vérifier l'intégrité topologique du système sont très lourds. Ils ne sont effectués que lors des 200 premiers pas de chaque relaxation (de 100 à 300 mille pas). Il a été vérifié que ce nombre est suffisant.

### 2.4.2 Sollicitations imposées

Deux modes de sollicitations ont essentiellement été étudiés : la compression et le cisaillement.

#### Compression isostatique

Le modèle permet d'effectuer des compressions isostatiques, c'est-à-dire dans les trois directions de l'espace. Cette sollicitation permet de conserver un arrangement aléatoire dans l'échantillon. Elle est modélisée par une diminution du volume de la cellule de simulation (réduction de la longueur des côtés) et par le déplacement homothétique des centres de gravité des fibres par rapport au centre de la cellule. Le déplacement homothétique n'est pas imposé aux extrémités des segments afin d'éviter une contraction non-physique des segments en début d'incrément. La décharge est, quant à elle, modélisée seulement par une augmentation du volume de la cellule, les fibres n'étant pas déplacées. Après chaque incrément de déformation, le système est relaxé (§2.4.1).

Deux valeurs d'incrément de compression ont été utilisées. L'une est de l'ordre de grandeur du diamètre des fibres pour modéliser des déformations importantes dans un temps raisonnable. L'autre est environ 20 fois inférieure de façon à examiner le domaine linéaire ( $\sim 1\%$  de déformation) autour de l'état d'équilibre de l'échantillon étudié et ainsi de déterminer le module de compressibilité  $B$ .

#### Déplacement pour modéliser le cisaillement

La modélisation du cisaillement se fait aussi à partir du centre de gravité des fibres (afin d'éviter un changement de longueur des fibres) mais également à partir de leur orientation (figs 2.11 et 2.12). Le vecteur directeur unitaire  $(n_x, n_y, n_z)$  de chaque fibre est déterminé comme le vecteur directeur de la droite entre ses extrémités. L'angle  $\chi$  est ensuite calculé comme étant l'angle de rotation du vecteur directeur cisailé d'un angle  $\gamma$  selon l'axe x (fig. 2.12). Il est donné par l'expression

$$\tan \chi = \frac{\sin \eta}{\cos \eta + \frac{1}{\tan \gamma \cos \varphi}} \quad \text{soit en coordonnées} \quad \tan \chi = \frac{(n_y^2 + n_z^2)^{1/2}}{n_x + \frac{1}{n_z \tan \gamma}}$$

cartésiennes

où  $\eta$  est l'angle formé par l'axe x et la fibre.

Les fibres sont ensuite tournées de l'angle  $\chi$  autour de leur centre de gravité. Enfin, elles sont déplacées d'une distance  $\Delta r$  dépendant de la distance de leur centre de gravité par rapport au milieu de la cellule  $h$  :  $\Delta r = h \tan \gamma$ .

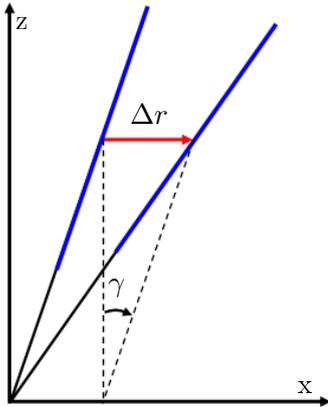


FIG. 2.11 – Vue dans le plan  $(x,z)$  du déplacement d'une fibre lors d'une sollicitation en cisaillement d'un angle  $\gamma$  (rotation et translation de  $\Delta r$ )

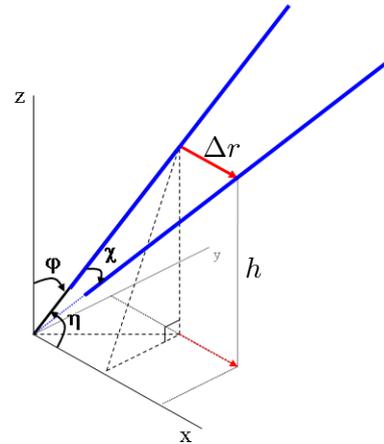


FIG. 2.12 – Schéma (vue dans l'espace) du cisaillement appliqué : les fibres pivotent d'un angle  $\chi$  et tradent de  $\Delta r$

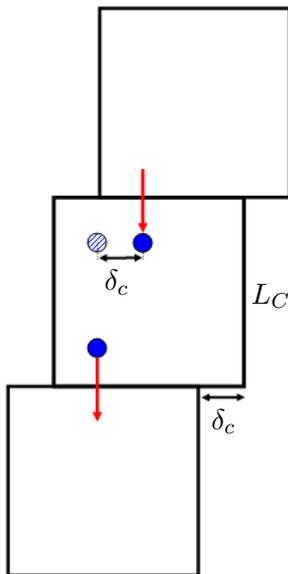


FIG. 2.13 – Schéma des conditions périodiques adaptées au cisaillement proposées par Lees et al. [99]. Ici sont représentées trois cellules,  $\delta_c$  est le décalage imposé tel que  $\delta_c = L_C \tan \gamma$  et  $L_C$  la longueur du côté de la cellule

Afin de pouvoir cisailer des cellules périodiques, les conditions périodiques sont décalées selon le procédé décrit par Lees et al. [99] (fig 2.13). Dans le cas d'un cisaillement selon l'axe  $x$  et perpendiculairement à l'axe  $z$ , si un nœud traverse une des faces perpendiculaires à l'axe  $z$ , son image périodique est introduite dans la cellule avec un décalage selon  $x$  de  $\pm\delta_c$  correspondant au cisaillement imposé  $\gamma$  tel que  $\delta_c = L_C \tan \gamma$  avec  $L_C$  la longueur du côté de cellule. Les conditions périodiques sur les autres faces restent inchangées. Des petites déformations ( $\sim 1\%$ ) sont simulées pour obtenir le module de cisaillement  $G$  de l'échantillon considéré.

## 2.5 Frottement

Deux approches pour modéliser le frottement ont été mises en œuvre. Dans les deux cas, on considère que la force de frottement est modélisée en faisant intervenir un ressort entre deux fibres

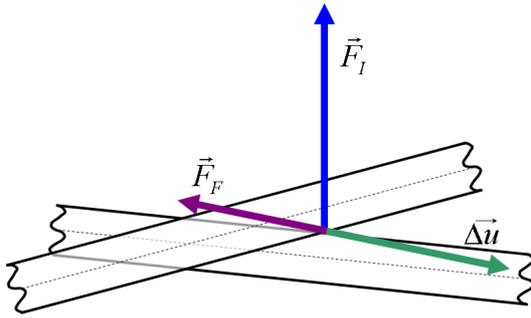


FIG. 2.14 – Schéma des forces intervenant dans l'application du frottement :  $\vec{F}_I$  force de répulsion,  $\vec{F}_F$  force de frottement,  $\Delta\vec{u}$  vitesse relative

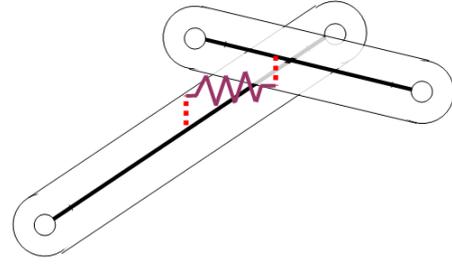


FIG. 2.15 – La force de frottement est modélisée par un ressort entre les fibres en contact.

en contact. Ces deux modélisations sont, comme dans la littérature (voir §1.4), des frottements de type Coulomb ( $\vec{F}_F$  force de frottement,  $\vec{F}_I$  force de répulsion (fig 2.14),  $\mu_s$  coefficient de frottement statique et  $\mu_k$  glissant)

$$\begin{aligned} \|\vec{F}_F\| &\leq \mu_s \|\vec{F}_I\| \quad \longrightarrow \quad \text{la force de frottement est appliquée} \\ &\geq \mu_s \|\vec{F}_I\| \quad \longrightarrow \quad \vec{F}_F = -\mu_k \|\vec{F}_I\| \frac{\Delta\vec{u}}{\|\Delta\vec{u}\|} \quad \text{avec } \Delta\vec{u} \text{ déplacement relatif au contact} \end{aligned}$$

Ces approches diffèrent par leur façon

1. de définir les forces de rappel  $\vec{F}_F$  entre les fibres
2. de définir le coefficient  $\mu_k$

Dans la suite, on qualifiera ces deux approches respectivement de « frottement de type ressort » et de « frottement de type milieux granulaires ».

### Frottement par ressort

Chronologiquement, la première approche a consisté à introduire un ressort de raideur  $K_F$  entre deux points à la surface des fibres préalablement en contact. Elle est implémenté de la sorte :

1. on cherche les contacts entre fibres
2. on regarde si ces contacts existaient à  $t - \delta t$

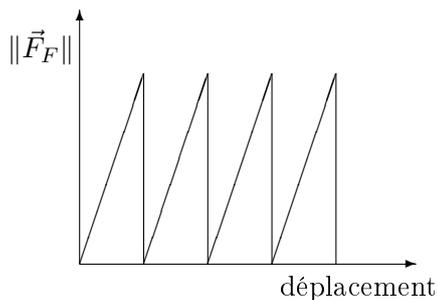


FIG. 2.16 – Profil de la norme de la force de frottement de type « ressort » appliquée au contact en fonction du déplacement relatif.

3. si oui, on retrouve à quels points sur leur surface les fibres étaient en contact, on place le ressort entre ces deux points et on calcule la force de frottement  $\vec{F}_F$

Si les segments sont en contact sur plusieurs incréments de relaxation, on garde en mémoire la localisation du premier contact ( $\|\vec{F}_F\| = 0$ ) sur la surface des fibres. L'évolution d'un ressort peut se faire selon deux autres cas. Le premier cas est celui où les deux fibres ne sont plus en contact, le ressort se rompt. Le deuxième cas correspond à une force de rappel du ressort supérieure à la force de répulsion multipliée par le coefficient de frottement statique  $\|\vec{F}_F\| \geq \mu_s \|\vec{F}_I\|$ , un frottement de type Coulomb est appliqué mais avec un coefficient de frottement glissant nul, le ressort est rompu. Cette même valeur de  $\mu_k$  a été utilisée pour la modélisation de flocculation de fibres [100, 101]. Dans notre modèle, si au pas de temps suivant le contact existe toujours, le ressort se reforme. Ceci conduit à un profil en « dent de scie » de la norme de la force de frottement en fonction du déplacement relatif (fig. 2.16). Les valeurs de  $\mu_s$  utilisées dans cette thèse sont 0,0 (pas de frottement), 0,3, 0,5, et 0,8.

Une fois cette approche implémentée et testée sur plusieurs simulations, des discussions ont fait apparaître que le gestion du frottement dans les milieux granulaires, quoique basée sur le même principe, diffère en au moins deux points : la définition de  $\vec{F}_F$  et la valeur de  $\mu_k$ . Ces deux modifications ont été implémentées dans ce qu'on appellera par la suite l'approche du « frottement de type milieux granulaires ».

### Frottement analogue aux milieux granulaires

Dans les milieux granulaires, le modèle du frottement appliqué est celui de Hertz-Mindlin [38, 96]. Il dépend de l'indentation des grains, de leur déplacement relatif ainsi que du frottement appliqué précédemment (histoire du contact). Le calcul de la force de frottement est implémenté comme suit :

1. on cherche les contacts entre fibres
2. on regarde si ces contacts existaient à  $t - \delta t$
3. si oui on calcule le déplacement relatif des fibres en contact, on prend sa composante perpendiculaire au contact (direction entre les lignes centrales  $\vec{n}$ )  $\Delta \vec{u}$  multipliée par une

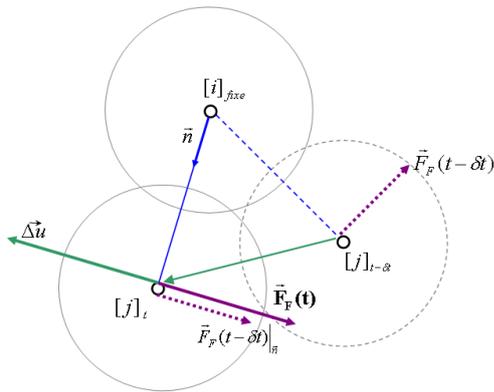


FIG. 2.17 – Schéma du frottement de type Hertz-Mindlin sur [j] (la coupe du segment [i] est représenté fixe pour visualiser le déplacement relatif des fibres)  $\vec{F}_F(t) = \vec{F}_F(t - \delta t) \Big|_{\vec{n}} - K_F \Delta \vec{u}$

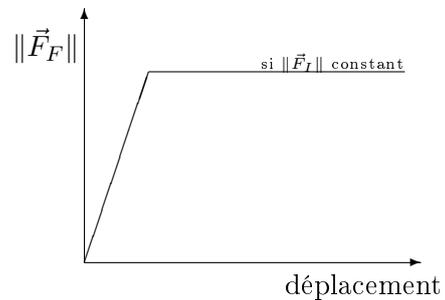


FIG. 2.18 – Profil de la norme de la force de frottement de type « milieux granulaires » appliquée au contact en fonction du déplacement relatif.

constante  $K_F$  (fig 2.17). La force de frottement est la somme de ce terme et de l'histoire au contact c'est-à-dire la force de frottement à  $t - \delta t$  ramenée perpendiculairement au contact

$$\vec{F}_F(t) = \vec{F}_F(t - \delta t) \Big|_{\vec{n}} - K_F \Delta \vec{u}$$

Le modèle de fibres présenté ne contient pas de terme de torsion, le frottement est donc appliqué uniquement par des forces perpendiculaires au contact.

Pour ce modèle de frottement,  $\mu_s$  et  $\mu_k$  ont été choisies égales, les valeurs simulées sont 0,1, 0,3 et 0,5. Contrairement au profil de la figure 2.16, celui de la norme de la force de frottement en fonction du déplacement relatif dans le cas du type milieu granulaire (fig 2.18) peut être décrit par deux régimes :  $\|\vec{F}_F\|$  augmente avec le déplacement ce qui maintient les fibres en position, puis au-delà du seuil  $\mu_s \|\vec{F}_I\|$ ,  $\|\vec{F}_F\|$  est maintenue constante, les fibres glissent.

## Conclusion

Nous avons donc développé un modèle numérique qui, par la discrétisation de fibres en un nombre variable de segments (cylindriques), permet de diminuer le nombre de degrés de liberté d'un ensemble de fibres par rapport à un modèle « collier de perles ». Les principaux inconvénients sont la dépendance des propriétés mécaniques d'une fibre (en particulier la flexion) avec le nombre de segments de discrétisation et la lourdeur des calculs de recherche de croisements de segments lors des phases de relaxation. Des ensembles de fibres, introduits dans des boîtes cubiques avec conditions périodiques aux bords, ont été soumis à des compressions isostatiques. Le système a été étudié en cisaillement et du frottement entre fibres a également été introduit.



# Chapitre 3

## Résultats

Dans cette partie sont présentés les principaux résultats obtenus avec le modèle d'ensemble de fibres développé dans le chapitre 2. Seront détaillées en introduction des courbes typiques de pression et de nombre de contacts obtenues pour des milieux fibreux 3D aléatoires lors de compressions isostatiques. La seconde partie sera consacrée à l'étude en fonction du rapport de forme du comportement autour du seuil de transition mécanique. On s'intéressera ensuite à l'influence du frottement sur la compression isostatique ainsi que sur l'hystérésis et dans une quatrième partie aux modules de compressibilité et de cisaillement.

### 3.1 Courbes typiques et influence des paramètres numériques

Le modèle présenté permet de modéliser des compressions isostatiques (dans les trois directions de l'espace) de fibres représentées par une suite de segments de diamètre constant. Les fibres peuvent s'étirer (élongation des segments) ou fléchir (flexion aux joints entre segments). Les répulsions entre fibres sont gérées en tenant compte effectivement de leur diamètre contrairement aux approches de type « fibres fantômes ». Le modèle permet d'évaluer la pression à l'intérieur d'un ensemble modèle (aléatoire 3D) de même que le nombre moyen de contacts par fibre.

#### 3.1.1 Evolutions typiques

Les milieux enchevêtrés sont composés de fibres longues et flexibles qui, quand le milieu est suffisamment peu dense, peuvent se réarranger de façon à annuler leurs contacts et les contraintes internes (quand la gravité n'est pas considérée). Quand la fraction volumique atteint un certain seuil (dépendant du rapport de forme, de la flexibilité et du frottement entre fibres), les fibres n'ont plus la place de se réarranger et interagissent par contacts entre elles. Cette transition est à associer au seuil de percolation mécanique présenté dans le chapitre 1 (section 1.2.2). Les graphes de la figure 3.1 sont typiques de ce type de comportement pour un ensemble aléatoire 3D. Ils représentent en (a) le nombre de contacts moyen par fibre et en (b) la pression en fonction de la fraction volumique pour des fibres sans frottement de rapport de forme de 20 discrétisées en 4 segments lors d'un premier cycle compression/décharge. Lors de la compression, trois régimes peuvent être identifiés. Quand la fraction volumique est inférieure à environ 0,2, les fibres se réarrangent de façon à n'avoir aucun contact<sup>2</sup> entre elles, la pression est nulle. Ensuite le nombre de contacts augmente rapidement mais la pression reste très basse. Après cette transition, le

---

<sup>2</sup>On définit comme étant en contact des fibres situées à une distance légèrement inférieure à leur diamètre ( $0,9996D$ ) et donc en répulsion non négligeable.

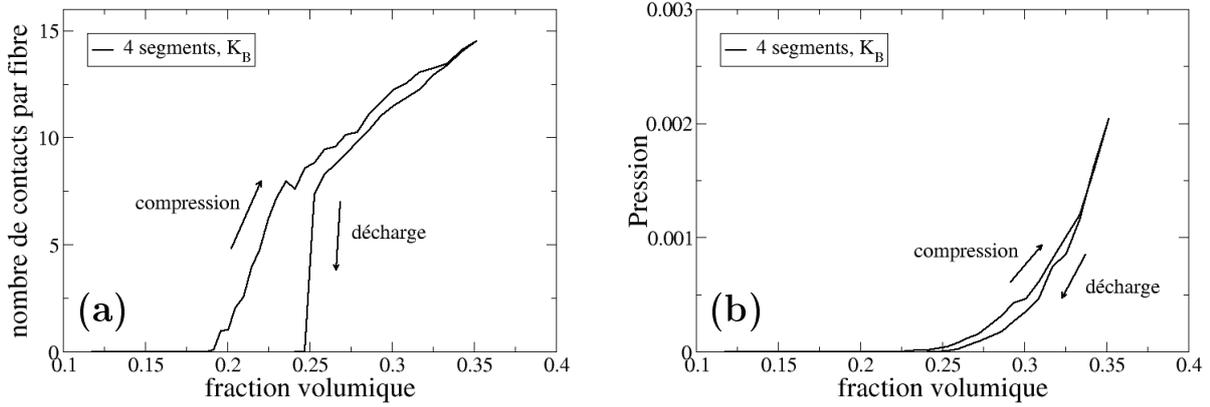


FIG. 3.1 – Courbes typique du nombre de contacts par fibre (a) et de la pression (b) en fonction de la fraction volumique. Ces résultats sont obtenus pour un ensemble de fibres de rapport de forme 20 discrétisées en 4 segments.

nombre de contacts par fibre augmente quasiment linéairement avec la fraction volumique et la pression augmente de façon plus rapide. Une décharge est ensuite effectuée. On retrouve les mêmes comportements : une variation quasi linéaire du nombre de contacts suivie d'une chute rapide et assortie d'une diminution de la pression (non linéaire). On note cependant une différence importante entre la compression et la décharge. Lors de la compression le nombre de contacts commence à augmenter pour une fraction volumique inférieure à celle de fin de décharge (ici 0,2). De plus, la gamme de fractions volumiques sur laquelle se fait la transition est plus étalée. Ces différences peuvent s'expliquer par un effet de l'histoire de la déformation de l'empilement. Lors de la première compression, on comprime un empilement complètement aléatoire qui a encore une forte capacité de réarrangement. A la décharge, cette capacité est fortement réduite par la compression au-delà du seuil de percolation. Cet effet est connu expérimentalement et par simulations [38, 40, 41, 47]. Il peut faire penser à la différence entre la « loose packing density » et la « close packing density » introduite au paragraphe 1.2.2. Il est à noter que lors de la compression du second cycle de compression/décharge, la fraction volumique à la transition est très proche de celle à la décharge du premier cycle. Cette valeur de fraction volumique est donc certainement une meilleure mesure de la fraction volumique de percolation (mécanique) que celle mesurée lors de la première compression, mais elle demande des calculs numériques plus longs. Dans la suite, nous allons utiliser la fraction volumique de la seconde compression pour l'étude de l'influence du frottement (voir §3.3). Par contre, nous avons utilisé la fraction volumique de première compression (valeur située environ au milieu de la transition) pour l'étude en fonction du rapport de forme (voir §3.2). A la fin de la transition en compression, les fibres se bloquent les unes les autres avec un certain nombre de contacts et commencent à se déformer, la pression augmente notablement. Ce nombre de contacts, appelé « caging number », vaut environ 8 pour des fibres de rapport de forme de 20, comme le montre la figure 3.1(a). Comme il sera détaillé dans la section 3.2, le nombre de contacts par fibre augmente ensuite quasi-linéairement, en accord avec les prédictions du modèle du volume exclu présenté dans la section 1.2.1, voir eqn. 1.6 :  $N_c = 2 \frac{N_f \pi D^2 L}{4V} \cdot \frac{L}{D} = 2\phi \frac{L}{D}$ . Dans un ensemble dense, le principal mode de déformation est la flexion des fibres, en accord avec les modèles analytiques présentés dans la section 1.3. Ceci conduit à une courbe de pression non-linéaire typique et particulièrement à un exposant de 3 reliant la fraction volumique (plus exactement la différence entre la fraction volumique de

l'ensemble et celle à la percolation mécanique  $\phi - \phi_C$  à la pression :  $P \propto (\phi - \phi_C)^3$  (voir § 3.2.5). La valeur de 3 de l'exposant a été largement reportée dans la littérature (voir §1.3 et 1.4) dans le cas d'arrangements aléatoires 3D (cas simulés ici).

La faible hystérésis visible entre la compression et la décharge sur la courbe de pression est due à un nombre réduit de réarrangements, une compression isostatique ne favorisant pas ce comportement.

### 3.1.2 Reproductibilité

Afin de s'assurer que le comportement observé dépend de la nature des fibres et non de la configuration initiale, différentes configurations initiales aléatoires d'un même ensemble de fibres (même nombre de fibres, même discrétisation, même flexibilité des fibres...) ont été utilisées lors de compressions isostatiques. Vu le temps de calcul pour une simulation, nous n'avons pas à proprement parler effectué d'étude de reproductibilité au sens statistique du terme. Nous nous sommes contenté à chaque fois de lancer deux configurations aléatoires différentes. Sur la figure 3.2 nous reportons dans le cas présent (250 fibres de rapport de forme de 20) ces deux évolutions en fonction de la fraction volumique : en (a) le nombre moyen de contacts par fibre et en (b) la pression. Il apparaît une assez bonne reproductibilité des résultats, aussi bien sur le nombre moyen de contacts, la fraction volumique de percolation mécanique et le « caging number » que sur la pression à l'intérieur du système. On peut déduire que le volume simulé ici (contenant 250 fibres) est suffisant pour être un volume élémentaire représentatif. Cette condition a été vérifiée pour tous les autres ensembles simulés.

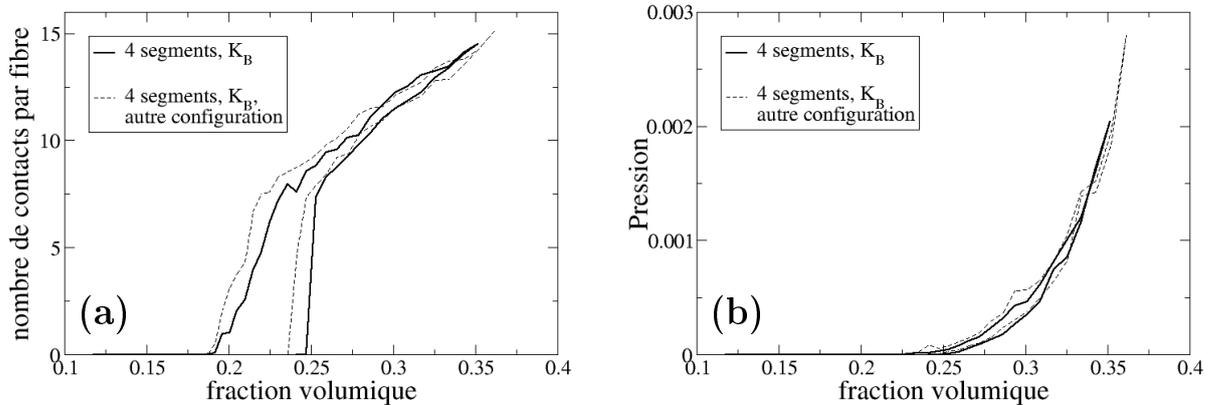


FIG. 3.2 – Nombre de contacts par fibre (a) et de la pression (b) en fonction de la fraction volumique pour deux configurations initiales différentes d'ensembles de fibres de rapport de forme 20 discrétisées en 4 segments. La bonne reproductibilité des résultats montre que le volume élémentaire choisi est représentatif.

### 3.1.3 Effets de la discrétisation et de la constante de flexion

Une exploration a également été faite de l'influence de la flexibilité des fibres sur les courbes typiques. Il a été montré précédemment (§2.2) que le module de flexion d'une fibre  $E_f I$  correspondait approximativement dans notre modèle, à  $K_B \ell_0$ , autrement dit la flexibilité d'une fibre dépend de la valeur de la constante de flexion  $K_B$  et de la discrétisation ( $\ell_0$  longueur d'un segment).

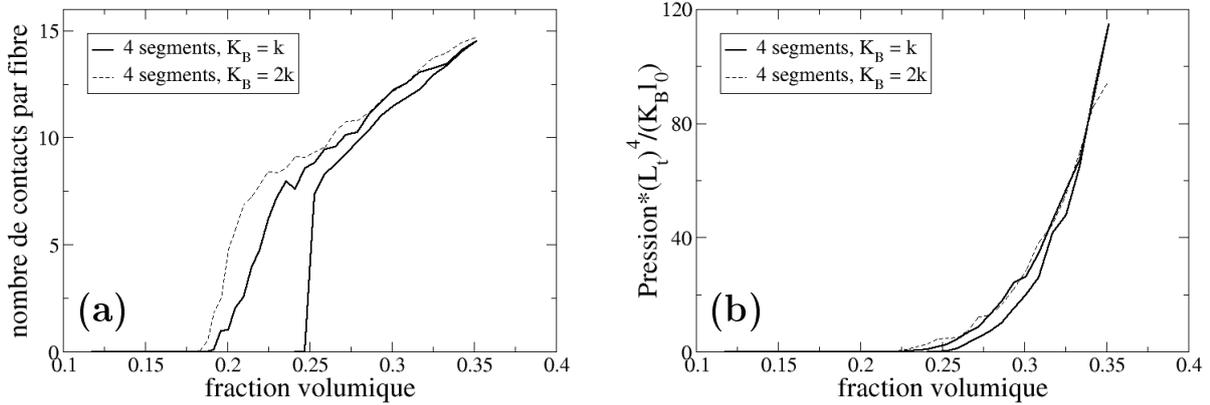


FIG. 3.3 – Nombre de contacts par fibre (a) et de la pression normalisée (b) en fonction de la fraction volumique pour des ensembles de fibres de même discrétisation et de rigidité différente : la courbe en tiret correspond à une valeur de  $K_B$  double de celle de la courbe en trait plein.

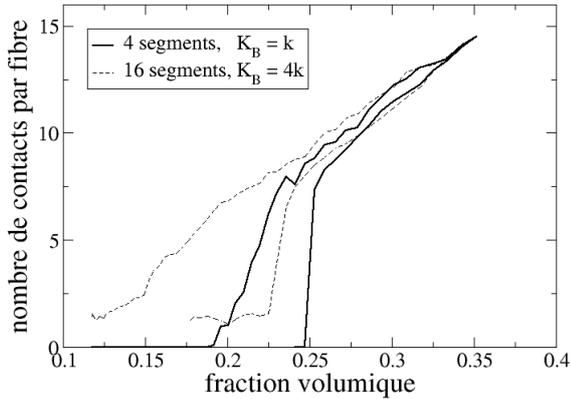


FIG. 3.4 – Nombre de contacts par fibre en fonction de la fraction volumique pour deux ensembles de discrétisation différentes : 4 segments par fibre (trait plein), 16 segments par fibre (tirets) dont les fibres sont de même flexibilité. La courbe en tirets n'est pas suffisamment relaxée, ce qui a pour effet d'étaler la zone de transition.

Une première comparaison a été faite entre des ensembles de fibres de même discrétisation mais avec des valeurs de  $K_B$  double l'une de l'autre. Sur les résultats présentés sur la figure 3.3, on remarque que le nombre moyen de contacts par fibre (a) n'est guère plus modifié que dans le cas d'une configuration initiale différente (fig 3.2(a)) : une flexibilité différente des fibres conduit à une configuration différente à l'approche de la transition mais ne semble pas modifier les caractéristiques de cette dernière en terme de « caging number », de fraction volumique de percolation. Le graphe de la pression normalisée (divisée par  $K_B$ ) (fig. 3.3(b)) montre que les courbes sont superposées. La pression est donc proportionnelle à  $K_B$ . Ce résultat a également été observé pour des différences de  $K_B$  plus importantes (1:8 ou 1:16) et sur des rapports de forme plus importants (200) non présentés ici.

Une deuxième comparaison a été faite pour des ensembles de fibres de flexibilité équivalente ( $\sim K_B l_0$ ) mais de discrétisation différente (différents  $l_0$ ). L'exemple choisi est celui de fibres discrétisées en 4 segments et de constante de flexion  $K_B = k$  et de fibres de 16 segments et  $K_B \approx 4k$ ,  $l_0$  étant 4 fois inférieur (la valeur exacte de  $K_B$  est calculée grâce à l'équation 2.8). Le résultat (nombre moyen de contacts par fibre en fonction de la fraction volumique) est présenté sur la figure 3.4. On voit une différence notable entre les courbes de discrétisations différentes. Ceci provient en grande partie du fait que, malgré un doublement du nombre de pas de relaxation, les fibres les plus discrétisées n'ont pas eu le temps (numérique) de se réarranger, le nombre moyen

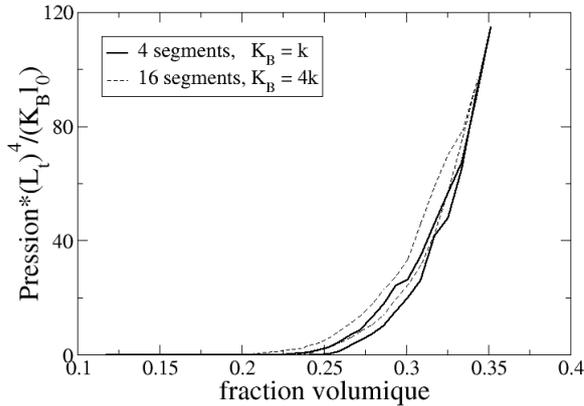


FIG. 3.5 – Pression normalisée en fonction de la fraction volumique pour deux ensembles de discrétisation différentes : 4 segments par fibre (trait plein), 16 segments par fibre (tirets) dont les fibres sont de même flexibilité. Malgré la relaxation insuffisante (voir fig 3.4), les deux courbes sont quasiment superposées.

de contacts par fibre (présenté à la figure 3.4) n'est pas nul pour des fractions volumiques bien inférieures au seuil de percolation mécanique. Un autre effet du manque de relaxation est l'étalement de la transition. Par contre les effets semblent limités sur le nombre de contacts passé la transition. La différence entre les courbes est également plus faible à la décharge qu'à la charge, ce qui tend à confirmer que l'effet est dû à des limitations numériques plus qu'à une différence physique entre les deux discrétisations. On s'intéresse maintenant aux valeurs de la pression obtenues pour ces deux ensembles de fibres de flexibilité identique mais de discrétisation différente. Quand on trace la pression normalisée en fonction de la fraction (fig. 3.5), on s'affranchit des effets de la discrétisation. On remarque que les courbes sont quasiment superposées. Cela confirme qu'un léger manque de relaxation n'a que très peu d'influence sur le système au-delà de la transition (où les réarrangements sont limités).

A condition de choisir correctement les paramètres de simulation (nombre de pas de relaxation...), le modèle conduit à des résultats quasiment indépendants, pour un rapport de forme donné, des différentes configurations initiales, de la valeur de la constante de flexion  $K_B$  (au moins dans la gamme des fortes rigidités explorée ici) ou de la discrétisation. Une discrétisation minimale est cependant nécessaire pour atteindre des fractions volumiques au-delà du seuil de percolation où les fibres se déforment en flexion. Des fibres représentées par un seul segment ne peuvent donc pas supporter cette déformation, les calculs divergent quand ce seuil est franchi.

## 3.2 Comportement en compression et percolation mécanique

Dans cette partie, nous allons nous intéresser au seuil de percolation mécanique d'ensembles de fibres et à leur comportement au-delà, lors des compressions isostatiques.

### 3.2.1 Description de la transition

Comme nous venons de le voir, dans un ensemble de fibres peu dense, celles-ci peuvent se réarranger jusqu'à ce qu'elles n'aient plus de contact entre elles, donc aucune pression dans le système. Lorsque l'on continue la compression, il arrive un moment où les fibres n'ont plus la place de se réarranger, des contacts apparaissent, la pression dans le système devient non-nulle. La fraction volumique à partir de laquelle les fibres commencent à interagir est appelée la fraction volumique de percolation mécanique  $\phi_C$ . Elle a été étudiée dans la littérature, aussi bien expérimentalement que théoriquement ou numériquement, pour des fibres rigides (voir §1.2.1).

Il ressort de toutes ces études une relation entre le rapport de forme  $\alpha$  et  $\phi_C$  :  $\phi_C = K/\alpha$  où  $K$  est compris entre 4,6 et 5,4 dans le cas d'un empilement maximum (« close packing density »).

### 3.2.2 Description des ensembles de fibres

Des simulations de compressions isostatiques d'ensembles monodisperses de fibres de différents rapports de forme ont été effectuées. Les rapports de forme étudiés sont compris entre 1,4 et 200 (fig 3.6). Les ensembles simulés sont constitués de 100 fibres dans le cas des plus petits

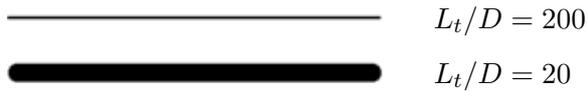


FIG. 3.6 – Profils des fibres pour différents rapports de forme ( $L_t/D$ ) simulés.

rapports de forme, 250 pour un rapport de forme de 20, et jusqu'à 900 fibres pour le plus grand (200). Pour les fibres de rapport de forme de 20 et plus, la longueur totale d'une fibre  $L_t$  a été fixée égale pour tous les échantillons. Le nombre de pas de relaxation entre deux incréments de compression varie aussi selon le rapport de forme : il est compris entre 10 000 et 300 000 pas. Les valeurs choisies pour chaque rapport de forme sont reportées dans le tableau 3.1. Le choix du nombre de segments par fibre est un compromis entre différentes conditions : il faut un certain nombre de segments pour que les fibres accommodent les déformations et les contacts au-delà de la percolation mécanique ; mais un grand nombre de segments par fibre conduit à des temps de simulation prohibitifs. Il existe également des conditions dues au modèle lui-même concernant la longueur totale d'une fibre et la longueur d'un segment par rapport à la taille de la cellule, elles sont exposées dans le paragraphe 2.3. Les valeurs de discrétisation présentées dépendent en fait du type d'analyse : pour les rapports de forme inférieurs à 5, nous ne nous sommes intéressés qu'à la fraction volumique de percolation mécanique et non au comportement au-delà (qui aurait impliqué de la flexion), c'est pourquoi les fibres ne sont représentées que par un segment. Chaque essai correspond à une configuration initiale différente (graine aléatoire différente). Dans la dernière colonne du tableau 3.1 sont également signalés les temps approximatifs de durée des simulation présentées ici.

rapport de forme $L_t/D$	( $L/D$ )	nombre de segments	nombre de fibres	pas de relaxation	nombre d'essai	moyen de calculs <sup>3</sup>	temps de calculs
1,4	(0,4)	1	100	10000	4	PC	60 min
1,5	(0,5)	1	100	10000	3	PC	60 min
2	(1)	1	100	10000	5	PC	60 min
3	(2)	1	100	10000	3	PC	60 min
5	(4)	1	100	10000	2	PC	60 min
20	(19)	4	250	75000	2	B32	15 jours
50	(49)	10	400	200000	2	C32	24 jours
100	(99)	15	650	250000	2	C32	2 mois
200	(199)	20	900	300000	2	C32	4 mois

TAB. 3.1 – Paramètres de simulation

<sup>3</sup>Chaque simulation tourne sur un seul processeur.

**PC** : Intel Pentium, RAM 256Mo, 2,4GHz ; **B32** : biprocesseur Intel Xeon 32b, RAM 4Go, 3,2GHz ; **C32** : nœud d'une grappe Intel Xeon 32b, RAM 2Go, 3GHz.

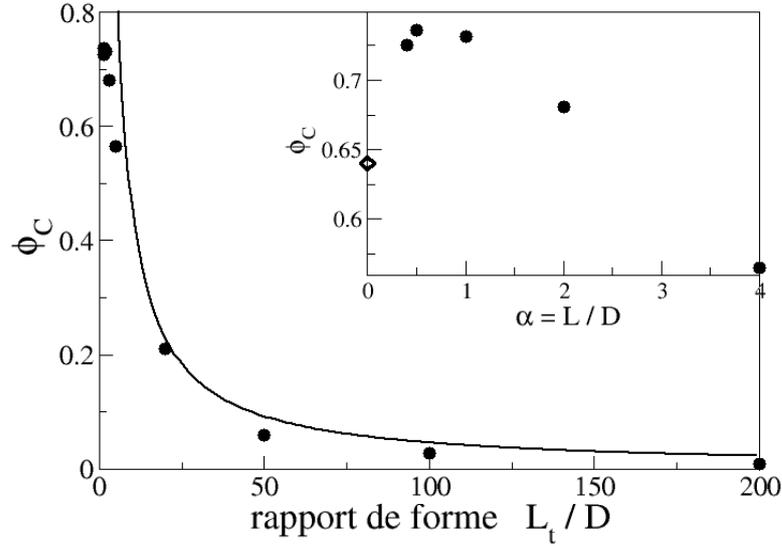


FIG. 3.7 – Fraction volumique de percolation mécanique  $\phi_C$  en fonction du rapport de forme ( $L_t/D$ ) ou de  $\alpha$  ( $L/D$ ) pour différents ensembles de fibres (cercles pleins) et pour un ensemble de sphères (diamant ouvert). La courbe correspond à l'expression  $\phi_C = 4,6/\alpha$  obtenue par modélisation en collier de perles [46].

### 3.2.3 Fraction volumique de percolation mécanique en fonction du rapport de forme

Les valeurs de fraction volumique à la transition mécanique ( $\phi_C$ ) obtenues avec des fibres discrétisées en segments lors de la première compression (tableau 3.1) sont présentées dans la figure 3.7. Ces valeurs sont la moyenne sur au minimum deux essais. Les incertitudes sur la mesure sont systématiquement inférieures à 10%. La fraction volumique de percolation mécanique pour un ensemble de sphères sans frottement ( $\phi_{C\text{sphères}} = 0,64$ ) a également été reportée. On remarque que le graphe de  $\phi_C$  en fonction du rapport de forme présenté à la figure 3.7 est semblable à celui de Williams et al. [45] (fig1.5). En particulier pour les rapports de forme inférieurs à 5 (encart), on retrouve qu'il existe des ensembles compacts de fraction volumique supérieure à celle d'ensembles compacts de sphères ( $\diamond$ ). Par contre, les valeurs obtenues pour les plus grands rapports de forme sont inférieures à celles trouvées par Rodney et al. [46], la courbe pleine correspond à  $\phi_C = 4,6/\alpha$  et a fortiori inférieures à celles prévues par la théorie du volume exclu  $\phi_C = 5,1/\alpha$  (eqn 1.4). Elles sont reportées sur le graphe log log de la figure 3.8, de même que la courbe  $\phi_C = 5,1/\alpha$  (pour des empilements denses de fibres rigides) et celle obtenue expérimentalement par Nardin et al.  $\phi_C = 0,9/\alpha$  (pour des empilements lâches de fibres rigides obtenus par décantation dans un fluide) [36]. On peut faire l'hypothèse que, dû au modèle utilisé (et aux valeurs des différents paramètres), on s'écarte progressivement de la « close packing density » pour se rapprocher d'une « loose packing density ». On a l'impression que, quand le rapport de forme augmente,  $\phi_C$  (tel qu'on le détermine ici à la première compression) est plus proche d'une « loose packing density » que d'une « close packing density ». Ceci peut s'expliquer soit par la flexion des fibres, soit par le comportement de l'ensemble de fibres et de la difficulté de relaxer le système quand le rapport de forme et le nombre de segments (de degrés de liberté) augmentent.

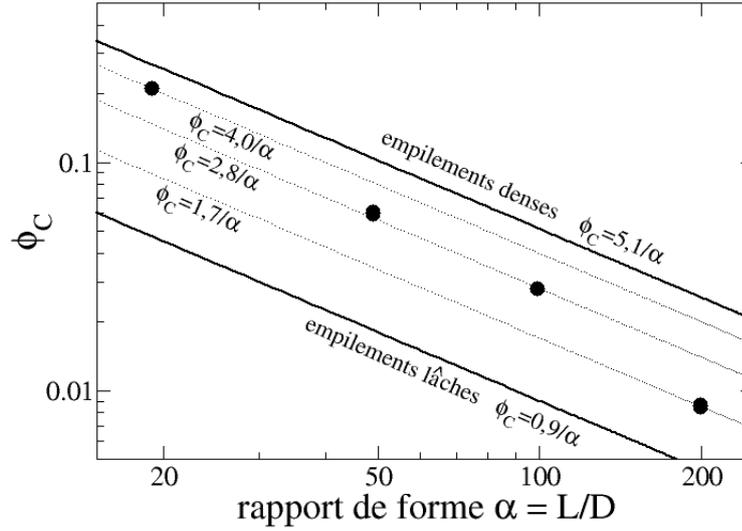


FIG. 3.8 – Graphe log log de la fraction volumique de percolation mécanique  $\phi_C$  en fonction du rapport de forme ( $L/D$ ) pour les rapports de forme les plus élevés de la figure 3.7. Les courbes en gras correspondent, pour les empilements denses (« close packing density »), au résultat théorique obtenu avec la théorie du volume exclu  $\phi_C = 5,1/\alpha$  [22] et pour les empilements lâches (« loose packing density »), au résultat expérimental obtenu par Nardin et al. [36]  $\phi_C = 0,9/\alpha$ . Les autres courbes (tirets) sont données à titre indicatif.

### 3.2.4 Nombre de contacts par fibre

Nous nous sommes également intéressés, pour les grands rapports de forme (20 et plus, fibres constituées de plusieurs segments), au comportement de l'ensemble au-delà de la transition mécanique. Le nombre moyen de contacts par fibre est présenté sur la figure 3.9 en fonction de la fraction volumique pour des fibres de rapport de forme de 20 à 200. On identifie facilement la zone de transition (augmentation très rapide du nombre de contacts) située entre un état peu dense de l'ensemble où les fibres n'interagissent pas (aucun contact) et un état dense où le nombre de contacts par fibre augmente quasi-linéairement. L'application de la théorie du volume exclu prédit la linéarité entre la fraction volumique et le nombre de contacts par fibre  $N_c = 2\phi\alpha$  lors d'une compression sans réarrangement, pour un ensemble aléatoire 3D de fibres de grand rapport de forme (fibres fantômes) ( voir § 1.2.1.0). On remarque que les résultats des simulations diffèrent de la théorie par l'absence de contact pour les faibles fractions volumiques à cause des réarrangements entre fibres. On observe cependant une relation linéaire entre la fraction volumique et le nombre de contacts par fibre, pour les fibres de grand rapport de forme, avec un coefficient compris entre 2 et 3. Des régressions linéaires des valeurs obtenues après transition donnent les relations suivantes

$\alpha$	$2\alpha$	$N_c$
20 → 40		$54.087 \phi - 4.115$
50 → 100		$84.727 \phi + 1.044$
100 → 200		$204.31 \phi + 0$
200 → 400		$572.117 \phi + 0$

Il faut noter que les résultats présentés ici sont obtenus pour des compressions isostatiques, c'est-à-dire dans les trois directions de l'espace. Ces déformations ne modifient pas en moyenne l'orientation des fibres, un arrangement aléatoire 3D avant déformation le sera encore à la fin

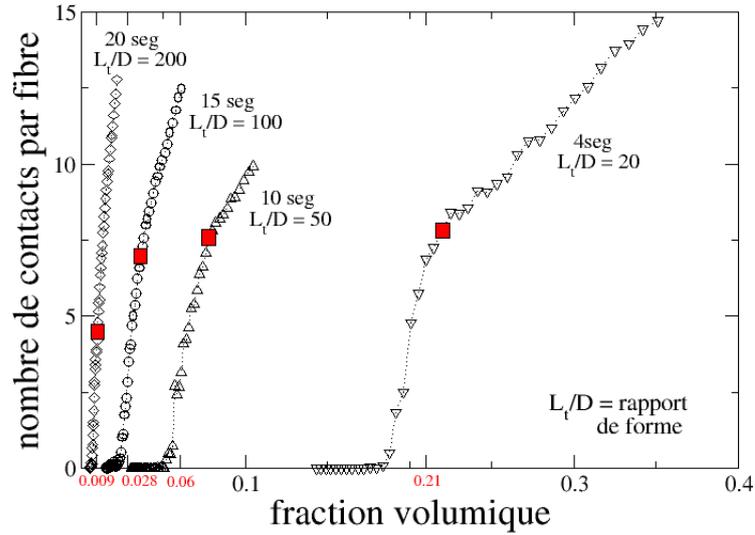


FIG. 3.9 – Nombre de contacts par fibre en fonction de la fraction volumique pour des ensembles de rapport de forme ( $L_t/D$ ) compris entre 20 et 200. Les points mis en évidence correspondent à la fin de la transition, le nombre de contacts associé est le « caging number »

de la compression. La différence avec la théorie du volume exclu est très probablement due aux réarrangements possibles des fibres au cours de la compression.

Tous les rapports de forme simulés reproduisent ce comportement, les différences se situent sur la fraction volumique à la transition et sur le nombre de contacts par fibre à la fin de la transition (« caging number »), quand les fibres se bloquent les unes les autres et commencent à se déformer. Les fibres de rapport de forme de 20 sont bloquées à partir de 8 contacts, il en est de même pour les fibres de rapport de forme de 50. Ce nombre diminue à environ 7 pour un rapport de forme de 100, et atteint 4 pour 200 comme le montre la figure 3.9.

### 3.2.5 Pression

La percolation mécanique correspond à l'apparition d'une pression dans le système. La valeur normalisée de la pression est reportée sur le graphe de la figure 3.10 en fonction de la fraction volumique. On retrouve des courbes non-linéaires qui décollent à partir de la fraction volumique de percolation mécanique. Ces évolutions sont bien décrites par une loi puissance du type  $P \propto (\phi - \phi_C)^3$  (lois reportées en pointillés). L'exposant de 3 s'explique par une déformation en flexion (voir §1.3). De manière similaire à [46], la pression varie en  $(\phi - \phi_C)^3$ , et non en  $\phi^3 - \phi_0^3$  comme prédit par le modèle de van Wyk (eqn 1.8). L'explication réside peut-être dans la gamme de rapport de forme simulé : l'exposant 3 sur la fraction volumique seule repose sur l'hypothèse d'une déformation exclusivement par flexion, les fibres devant avoir un très grand rapport de forme de façon à rendre  $\phi_C$  négligeable devant la fraction volumique de l'ensemble et/ou être très flexibles (limitation des réarrangements). Malheureusement, les limitations actuelles du code (temps de calculs) ne permettent pas de vérifier cette hypothèse.

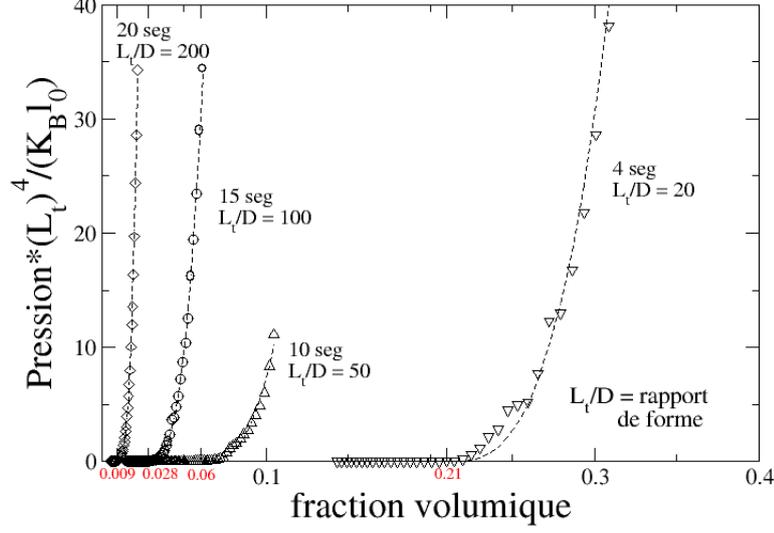


FIG. 3.10 – Pression normalisée en fonction de la fraction volumique pour des ensembles monodisperses de rapport de forme ( $L_t/D$ ) compris entre 20 et 200. Les courbes en pointillés correspondent à des régressions en  $P \propto (\phi - \phi_C)^3$

### 3.3 Effets du frottement sur les courbes de compression

Du frottement a également été introduit aux contacts entre fibres comme cela a été présenté dans la section 2.5. Toutes les simulations présentées dans cette partie ont été effectuées pour des fibres de rapport de forme de 20 discrétisées en 4 segments. Chacune de ces simulations a duré environ 1 mois. Les résultats présentés ici sont des résultats préliminaires effectués sur seulement un essai (une configuration initiale) et mériteraient de plus amples études.

Comme présenté au paragraphe 2.5, les deux modèles de frottement étudiés sont des frottements de type Coulomb ( $\vec{F}_F$  force de frottement,  $\vec{F}_I$  force de répulsion,  $\mu_s$  coefficient de frottement statique et  $\mu_k$  glissant)

$$\begin{aligned} \|\vec{F}_F\| &\leq \mu_s \|\vec{F}_I\| \quad \longrightarrow \quad \text{la force de frottement est appliquée} \\ &\geq \mu_s \|\vec{F}_I\| \quad \longrightarrow \quad \vec{F}_F = \mu_k \|\vec{F}_I\| \frac{\vec{\Delta}u}{\|\vec{\Delta}u\|} \quad \text{avec } \vec{\Delta}u \text{ déplacement relatif au contact} \end{aligned}$$

Le premier modèle (frottement de type ressort) est étudié pour trois valeurs de  $\mu_s$  : 0,3, 0,5 et 0,8 avec  $\mu_k = 0,0$ . L'autre modèle (frottement de type milieux granulaires) est également étudié pour trois valeurs de  $\mu_s$  : 0,1, 0,3 et 0,5 avec  $\mu_k = \mu_s$ . Pour tous les frottements étudiés, au minimum deux cycles de compression/décharge ont été simulés (figs 3.12 et 3.13). Le premier est effectué pour s'affranchir de la configuration initiale (voir §3.1.1). Des études expérimentales sur des fibres de polyamide-6 effectuent également une première compression pour effacer l'histoire de l'échantillon [47]. Cette méthode est également utilisée pour la modélisation d'ensembles de sphères [38,40,41] où une première compression sans frottement est effectuée avant d'introduire du frottement. Contrairement à ces études, nous avons choisi d'introduire du frottement dans le système dès le début de la première compression, afin de se rapprocher des systèmes réels et d'étudier la dépendance de la percolation mécanique (transition) par rapport au frottement. Les résultats présentés ici concernent tous le second cycle de chaque simulation.

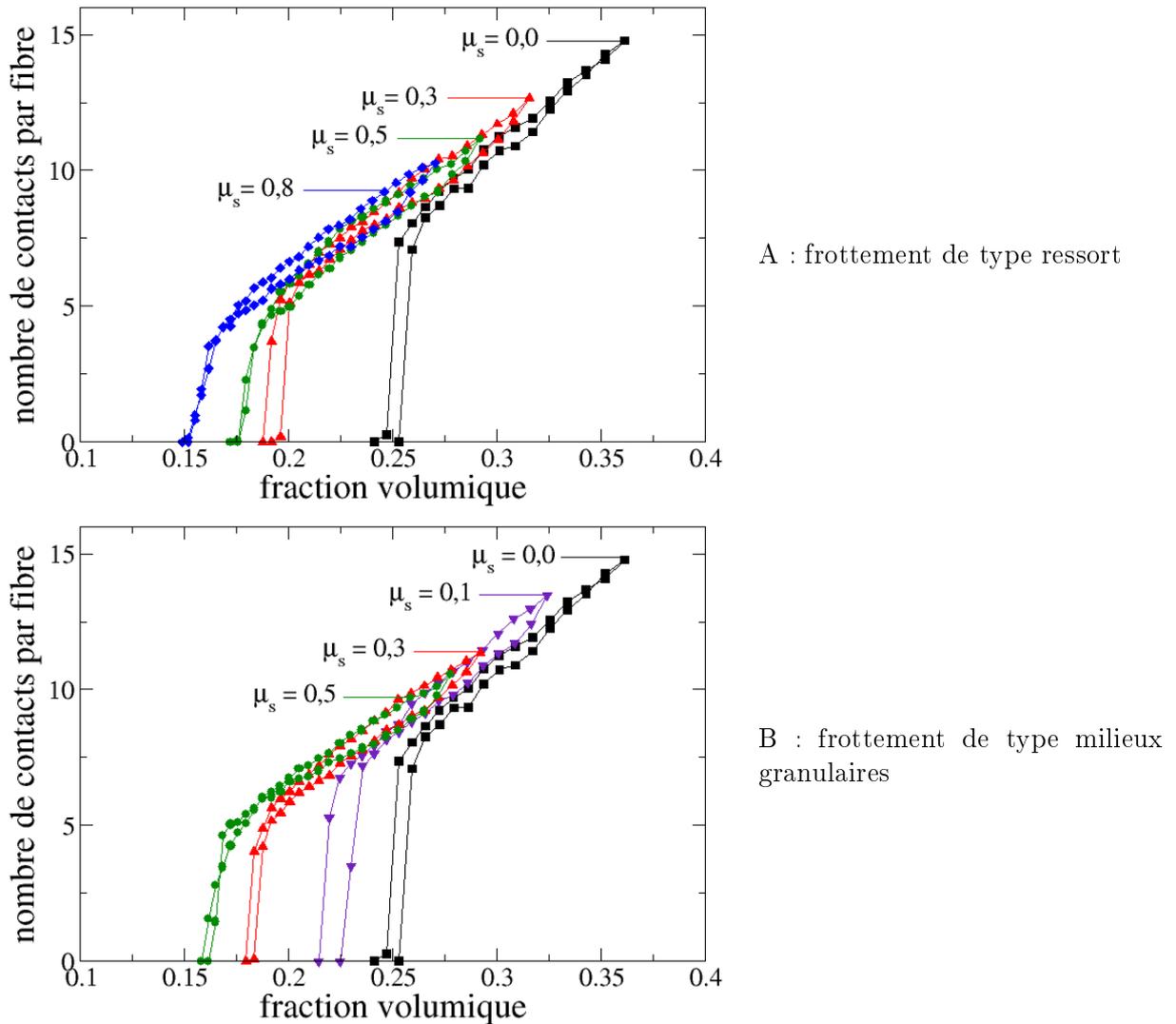


FIG. 3.11 – Nombre de contacts par fibre en fonction de la fraction volumique pour des ensembles de fibres de rapport de forme ( $L_t/D$ ) de 20 avec (A) un frottement de type ressort aux contacts pour différentes valeurs de  $\mu_s$  ( $\mu_k = 0,0$ ) et (B) un frottement de type milieux granulaires pour différentes valeurs de  $\mu_s$  ( $\mu_k = \mu_s$ ).

### 3.3.1 Sur la fraction volumique à la transition et le nombre de contacts

Sur la figure 3.11 sont reportés le nombre de contacts moyen par fibre en fonction de la fraction volumique pour les différents types de frottement étudiés : le modèle de frottement de type ressort (A) pour des valeur de  $\mu_s$  de 0,3 à 0,8 ( $\mu_k$  étant fixé à 0,0) et le modèle de frottement de type milieux granulaires (B) pour de valeur de  $\mu_s = \mu_k$  comprises entre 0,1 et 0,5. Une seule simulation sans frottement a été effectuée et est reportée pour les deux modèles.

La première observation est que les deux modèles de frottement conduisent aux mêmes évolutions, à savoir une diminution de la valeur de la fraction volumique de percolation mécanique quand le frottement augmente ainsi qu'une diminution du nombre de contacts à la fin de la transition et un élargissement de la zone de transition. En effet, pendant la compression, le frottement entraîne la persistance de contacts, qui, sans frottement, auraient glissé menant à des réarrangements

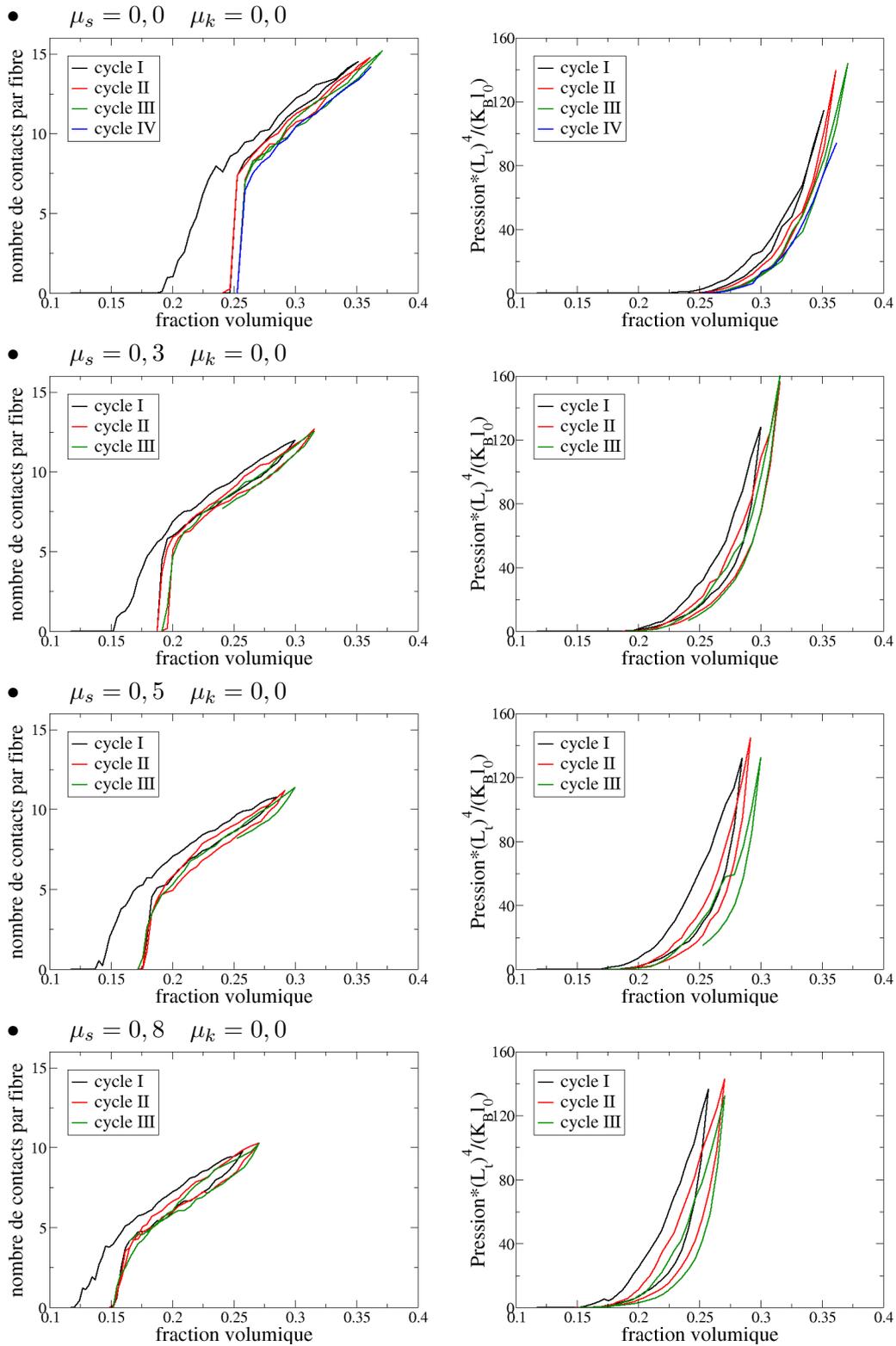


FIG. 3.12 – **Frottement de type ressort** : nombre de contacts par fibre et pression en fonction de la densité relative sur environ 3 cycles pour différents coefficients de frottement.

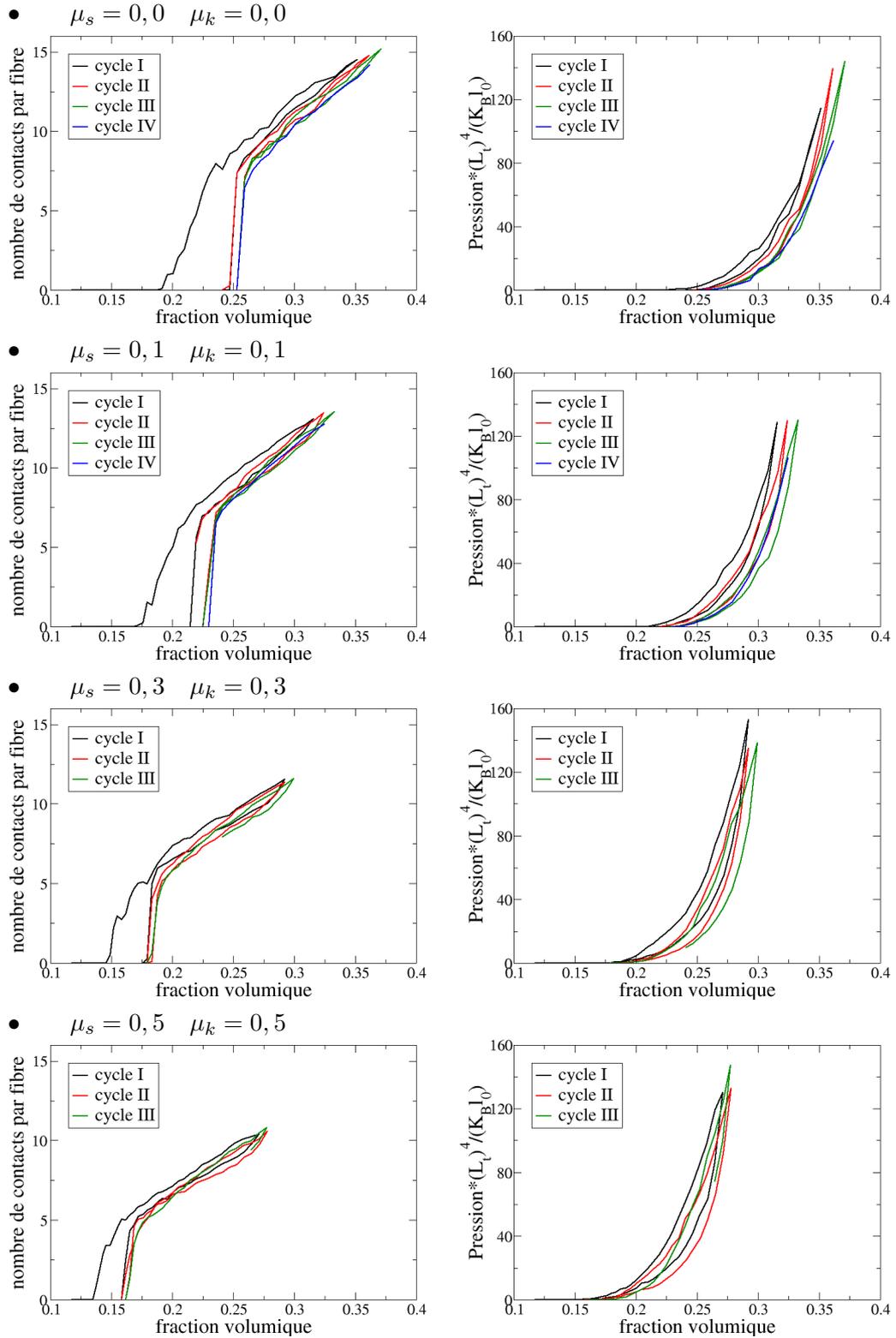


FIG. 3.13 – **Frottement de type milieu granulaire** : nombre de contacts par fibre et pression en fonction de la densité relative sur environ 3 cycles pour différents coefficients de frottement.

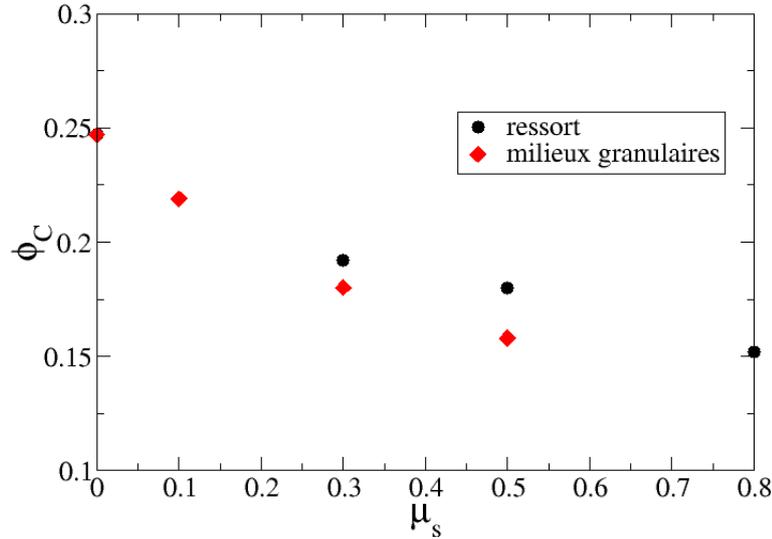


FIG. 3.14 – Fraction volumique de percolation mécanique en fonction de la valeur du coefficient de frottement statique pour le modèle de type ressort (●) et le modèle de type milieux granulaires (◆).

des fibres. Ainsi, pour une fraction volumique donnée, le nombre de contacts augmente avec le frottement. La figure 3.11 montre que ceci entraîne une diminution de la fraction volumique à percolation. Pour chaque valeur de  $\mu_s$ , la fraction volumique de percolation mécanique  $\phi_C$  (première fraction volumique du second cycle) est reportée sur la figure 3.14. Comme ce qui a été observé avec des ensembles de sphères (expérimentalement [37] ou numériquement [42]),  $\phi_C$  diminue quand  $\mu_s$  augmente (quand le frottement augmente). Aucune relation plus précise entre ces deux grandeurs ne peut être déterminée à cause du manque de points.

On a également tracé sur le graphe 3.15 les régressions en  $(\phi - \phi_C)^3$  des courbes de pression. Pour le frottement de type ressort (A), on voit que les régressions sont proches des points. De plus le préfacteur de la loi puissance est le même, ainsi l'effet principal du frottement est de décaler la courbe de pression vers les plus basses fractions volumiques. Pour le frottement de type milieux granulaire (B), l'accord est moins bon, en particulier pour les faibles pressions et les coefficients de frottement 0,1 et 0,5. L'accord est cependant bon pour les pressions plus importantes pour tous les coefficients de frottement.

### 3.3.2 Sur l'hystérésis

On observe une hystérésis aussi bien sur les courbes du nombre de contacts (fig 3.11) que sur celles de pression (fig 3.15). On voit aussi que l'hystérésis augmente avec le frottement. Il faut noter qu'elle n'est pas d'origine visqueuse car nous faisons ici des relaxations statiques et donc avec une viscosité infinie dans tous les cas. Les hystérésis visibles ici sont dues aux différents réarrangements provoqués par la variation de frottement statique. Pendant la compression, les contacts sont stabilisés par le frottement, peu de réarrangements (glissements) sont possibles, les fibres se courbent. Cependant, la stabilité de ces contacts dépend directement de la force normale au contact comme le montre la loi de Coulomb (eqn 3.1). La force normale est elle-même directement liée à la pression dans la cellule de simulation. Ainsi, lors de la compression, la pression augmente et un nombre croissant de contacts sont stabilisés. A la décharge par contre,

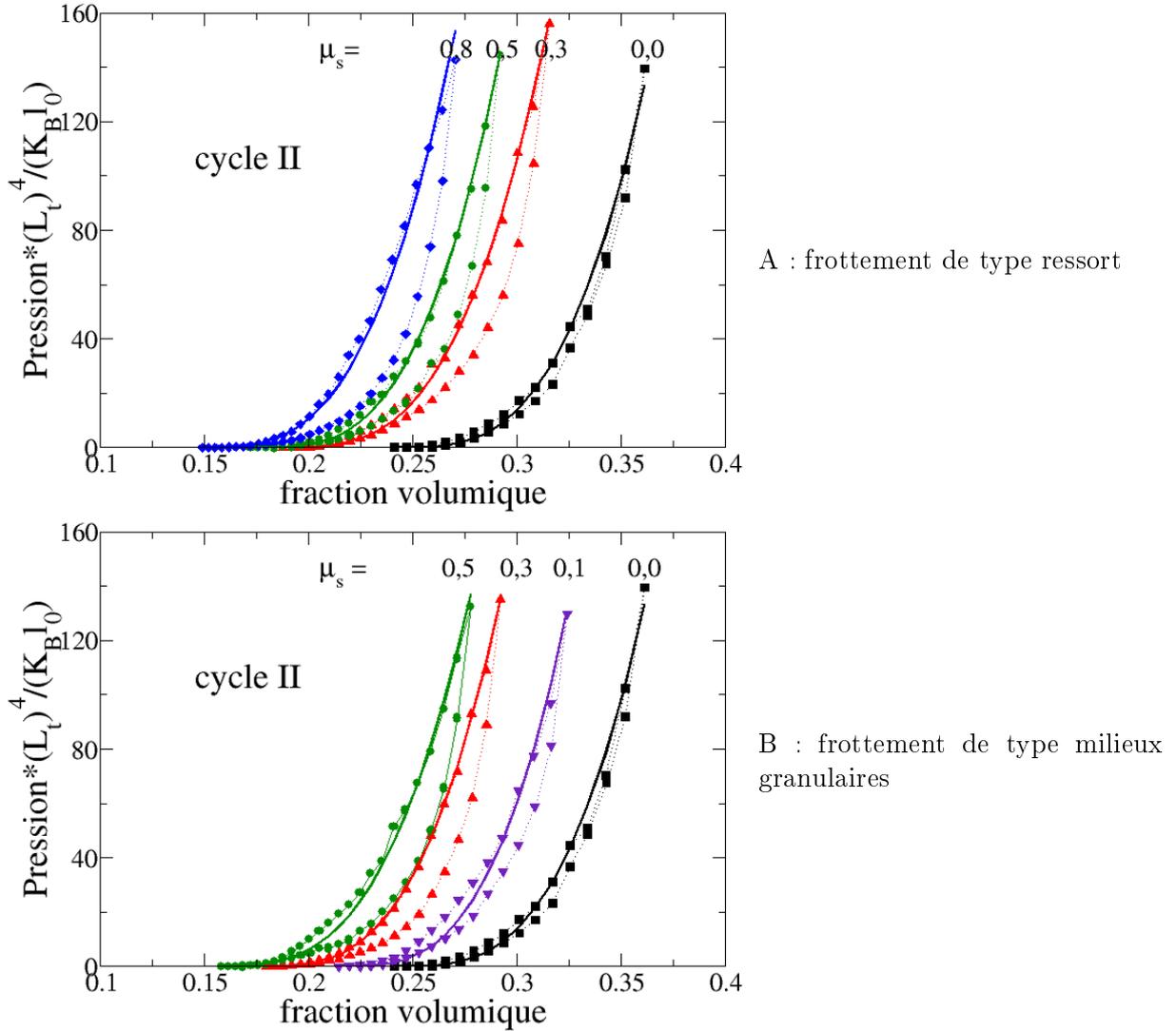


FIG. 3.15 – Pression normalisée en fonction de la fraction volumique pour des ensembles de fibres de rapport de forme ( $L_t/D$ ) de 20 avec (A) un frottement de type ressort aux contacts pour différentes valeurs de  $\mu_s$  ( $\mu_k = 0,0$ ) et (B) un frottement de type milieux granulaires pour différentes valeurs de  $\mu_s$  ( $\mu_k = \mu_s$ ). Les courbes en gras correspondent à des régressions en  $P \propto (\phi - \phi_C)^3$

la pression diminue, ce qui déstabilise un nombre important de contacts. On voit ainsi sur la figure 3.11 une chute rapide du nombre de contacts au début de la décharge sur les courbes avec frottement alors que ce nombre est pratiquement réversible sans frottement. Cette chute initiale est principalement responsable de l'hystérésis.

En traçant les énergies normalisées d'élongation et de flexion des fibres (fig 3.16), on observe que l'énergie en flexion est largement supérieure à l'énergie d'élongation. L'hypothèse d'une déformation majoritairement en flexion est validée. L'énergie de répulsion, qui n'est pas représentée ici, est environ moitié moins importante que l'énergie d'élongation. On remarque que l'hystérésis est plus marquée sur la courbe relative à l'élongation. En effet, le frottement stabilise les contacts en cisaillement local (forces tangentielles à la surface de la fibre et donc le long des segments)

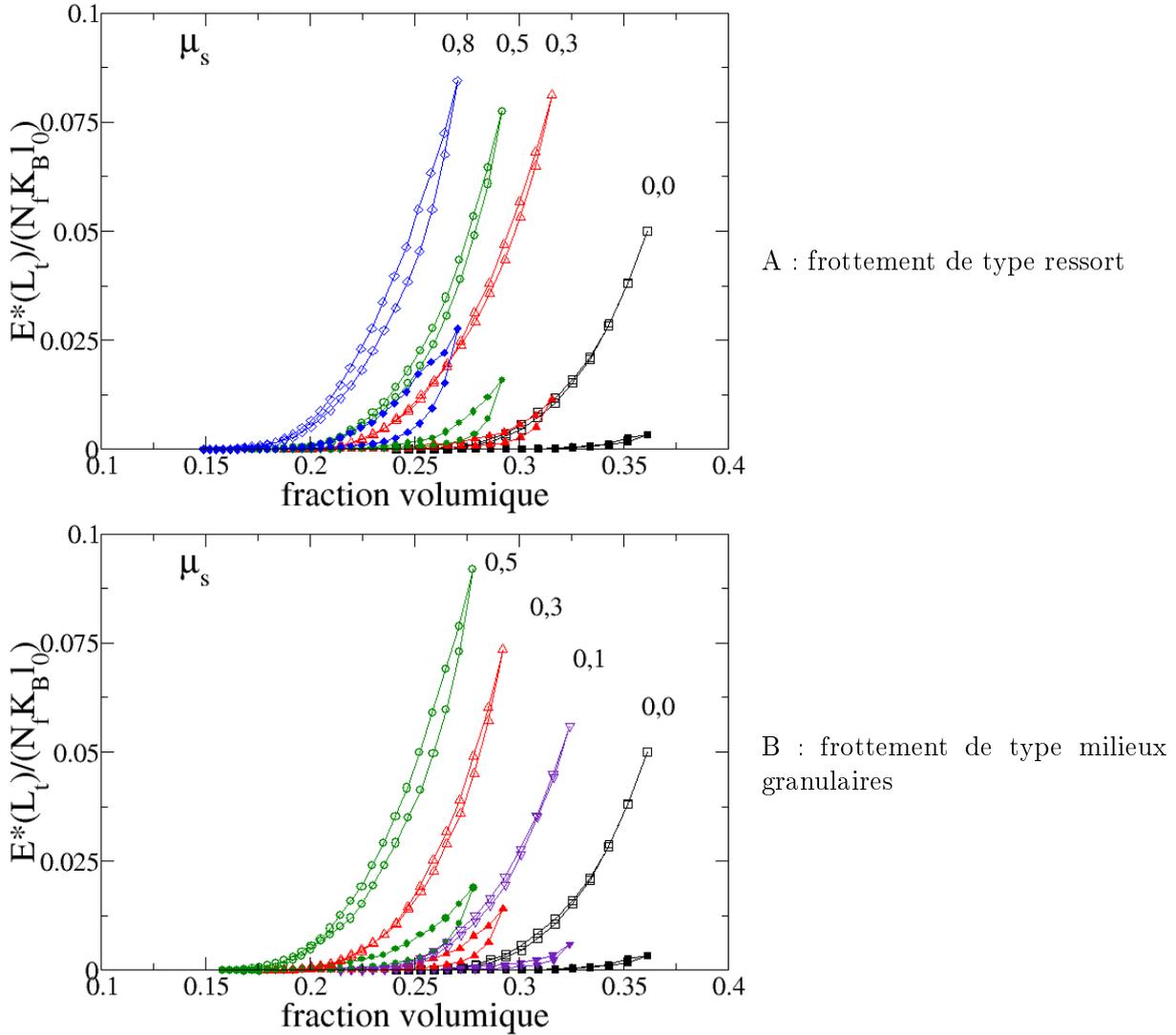


FIG. 3.16 – Energies normalisées en fonction de la fraction volumique pour des ensembles de fibres de rapport de forme ( $L_t/D$ ) de 20 avec (A) un frottement de type ressort aux contacts pour différentes valeurs de  $\mu_s$  ( $\mu_k = 0,0$ ) et (B) un frottement de type milieu granulaires pour différentes valeurs de  $\mu_s$  ( $\mu_k = \mu_s$ ). Symboles pleins : énergie d'élongation, symboles ouverts : énergie de flexion

et donc conduit à une déformation en élongation des fibres (allongement ou compression). Au début de la décharge, la chute rapide du nombre de contacts entraîne une disparition de ces forces tangentielles, d'où la diminution rapide de l'énergie d'élongation.

### 3.4 Effets du frottement sur les modules élastiques

Afin d'étudier les modules élastiques en fonction du frottement de milieux enchevêtrés, différentes configurations ont été sélectionnées au cours de la compression du second cycle (voir paragraphe précédent). Ces configurations ont subi de très faibles déformations ( $\sim 1\%$ ) en compression pour déterminer le module de compressibilité (noté B) ou en cisaillement pour le mo-

dule du même nom (noté  $G$ ). (Les détails des déformations sont présentés au paragraphe 2.4.2). Comme précédemment, les deux types de frottement semblent avoir une influence similaire sur les résultats. Il convient de préciser que la plus forte dispersion des valeurs obtenues avec le frottement de type milieux granulaires est vraisemblablement due à un jeu de paramètres numériques non optimisé, les mêmes valeurs (pas de temps, nombre de pas de relaxation, incrément de déformation...) ayant été gardées pour toutes les simulations.

### 3.4.1 Module de compressibilité

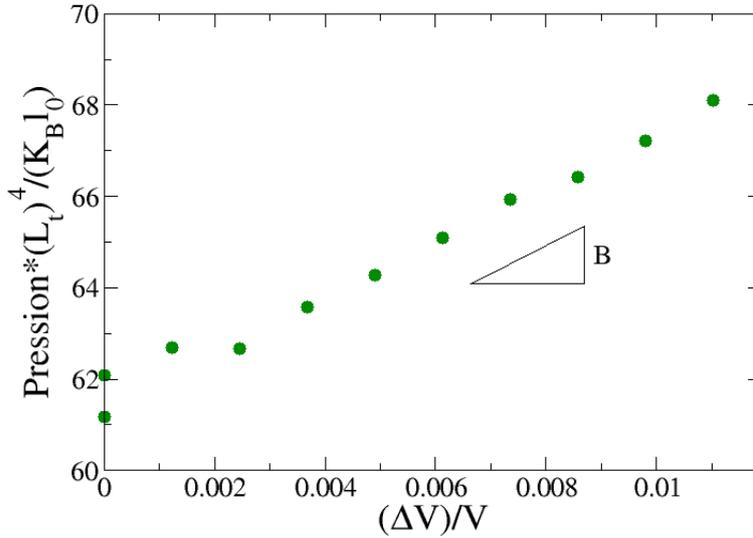


FIG. 3.17 – Exemple d’une courbe (Pression en fonction de  $\Delta V/V$ ) sur laquelle est mesuré le module de compressibilité

La figure 3.17 représente un exemple de résultat de simulation (frottement de type ressort  $\mu_s = 0,5$ ,  $\phi \approx 0,265$ ) effectuée pour mesurer  $B$  ( $B = -V \frac{\partial P}{\partial V}$ ). Les déformations appliquées sont suffisamment faibles pour que la pression varie linéairement en fonction de  $\Delta V/V$ . La valeur de  $B$  pour cet échantillon est égale à la pente de la droite. Les résultats (en log log) du module de compressibilité sont présentés en fonction de la pression sur la figure 3.18 pour les deux types de frottement. On remarque que, même si pour le frottement de type milieux granulaires les points sont plus dispersés, tous les points suivent une même droite correspondant à un exposant de  $2/3$ , ce qui est cohérent avec l’exposant 3 précédemment identifié pour l’évolution de la pression en fonction de  $\phi - \phi_C$ . En effet,

$$\begin{aligned}
 B = -V \frac{\partial P}{\partial V} &\propto V \frac{\partial (\phi - \phi_C)^3}{\partial V} && \text{où } V \text{ est le volume de la cellule} \\
 &\propto \phi (\phi - \phi_C)^2 && \text{or pour la gamme de fractions volumique étudiées} \\
 &&& \phi \gg (\phi - \phi_C) \text{ et peut donc être considéré constant} \\
 B &\propto (\phi - \phi_C)^2 \propto P^{2/3}
 \end{aligned}$$

On remarque, sur la figure 3.18, que le frottement n’a pas d’influence sur la constante de proportionnalité.

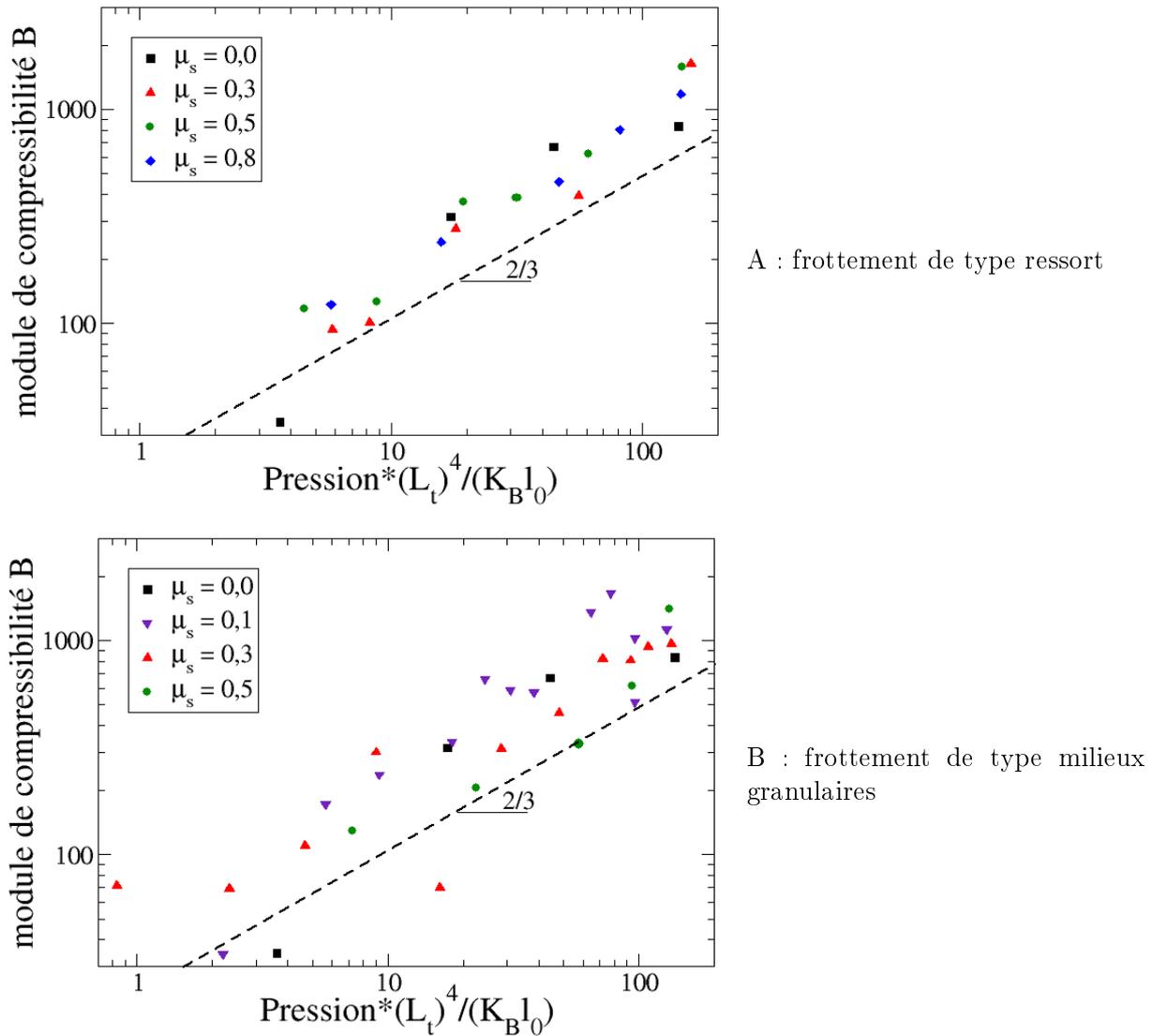


FIG. 3.18 – Module de compressibilité en fonction de la pression normalisée pour des ensembles de fibres de rapport de forme  $(L_t/D)$  de 20 avec (A) un frottement de type ressort aux contacts pour différentes valeurs de  $\mu_s$  ( $\mu_k = 0,0$ ) et (B) un frottement de type milieux granulaires pour différentes valeurs de  $\mu_s$  ( $\mu_k = \mu_s$ ).

### 3.4.2 Module de cisaillement

L'analyse des résultats obtenus pour les modules de cisaillement  $G$  est plus délicate. La figure 3.19 représente les résultats obtenus pour des déformations en cisaillement d'un même échantillon (frottement de type ressort  $\mu_s = 0,5$ ,  $\phi \approx 0,265$ ) selon les différentes directions notées sur la figure. Les points se situent sur des droites de pentes équivalentes et égales au module de cisaillement. L'échantillon est donc de taille suffisante pour être un volume élémentaire représentatif en cisaillement. La figure 3.20 présente les valeurs du module de cisaillement  $G$  en fonction de la fraction volumique. Pour les échantillons sans frottement, le module de cisaillement est nul, seul du bruit numérique est mesuré. Ceci vient du fait que les contacts sans frottement ne peuvent supporter de cisaillement et glissent sous l'effet d'un cisaillement appliqué. Ainsi les fibres se

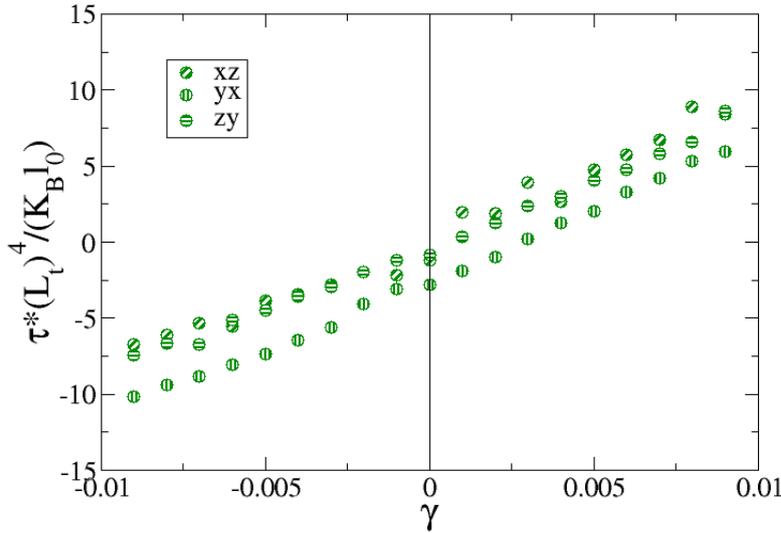
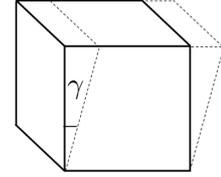


FIG. 3.19 – Exemple d’une courbe ( $\tau$  fonction de la déformation en cisaillement  $\gamma$ ) sur laquelle est mesuré le module de cisaillement



réorganisent et la contrainte reste constante. L’ensemble de fibres réagit donc comme un fluide qui peut supporter une pression mais pas un cisaillement. Ce n’est plus le cas avec le frottement qui induit une résistance au cisaillement des contacts et un module de cisaillement  $G$  non nul. Ce même résultat a déjà été démontré pour les milieux granulaires de sphères [38, 40, 41].

Les valeurs obtenues ont été représentées sur un graphe log log en fonction de la pression normalisée à la figure 3.21. On remarque que toutes les séries de points suivent une droite correspondant à un exposant compris entre  $2/3$  et  $1$  ( $3/3$ ). Ces résultats sont cohérents avec les différentes valeurs de la littérature, que ce soit une dépendance en  $\phi^2$  obtenue expérimentalement sur les filament d’actine [11–13], ou en  $\phi^3$  obtenue à partir de calculs analytiques [52, 54]. On pourrait croire, en regardant la figure 3.21A, que le module de cisaillement est fonction du coefficient de frottement  $\mu_s$  comme dans le cas des empilements de sphères [38, 40, 41]. Or les valeurs obtenues ne sont comparables que pour des configurations identiques, ce qui est vrai pour les études citées sur les sphères mais faux pour les configurations simulées ici. En effet, nous utilisons des échantillons de différentes fractions volumiques correspondant aux configurations obtenues durant la compression d’ensembles de fibres où le frottement est introduit dès le début, les microstructures ne sont donc pas égales. Ceci n’avait pas beaucoup d’influence sur la détermination de  $B$  car la déformation appliquée ne change pas la symétrie de l’environnement des fibres (aussi bien au niveau de l’ensemble des fibres qu’au niveau d’un contact). Si on applique un incrément de compression isostatique, la symétrie ne change pas et le nouvel environnement a de fortes chances d’être proche d’un équilibre et il y a peu de réarrangements. Le cisaillement est lui plus difficile à appréhender. La façon dont nous l’avons modélisé (rotation et déplacement des fibres, voir § 2.4.2) peut conduire à des réarrangements de fibres à cause de la modification de la symétrie de l’environnement (aux contacts). On peut supposer que, sans réarrangement, le module de cisaillement  $G$  aurait été lié à la pression avec un exposant de  $2/3$ . L’exposant que l’on obtient est plus élevé probablement à cause de ces réarrangements. En tout état de cause, les résultats sur le cisaillement sont à analyser avec prudence du fait de la difficulté de bien rendre compte de ce mode de déformation pour un empilement de fibres.

Nous avons utilisé deux types de frottement. Le frottement de type milieux granulaires est plus proche de la loi de Coulomb classique et a été largement employé pour les milieux granu-

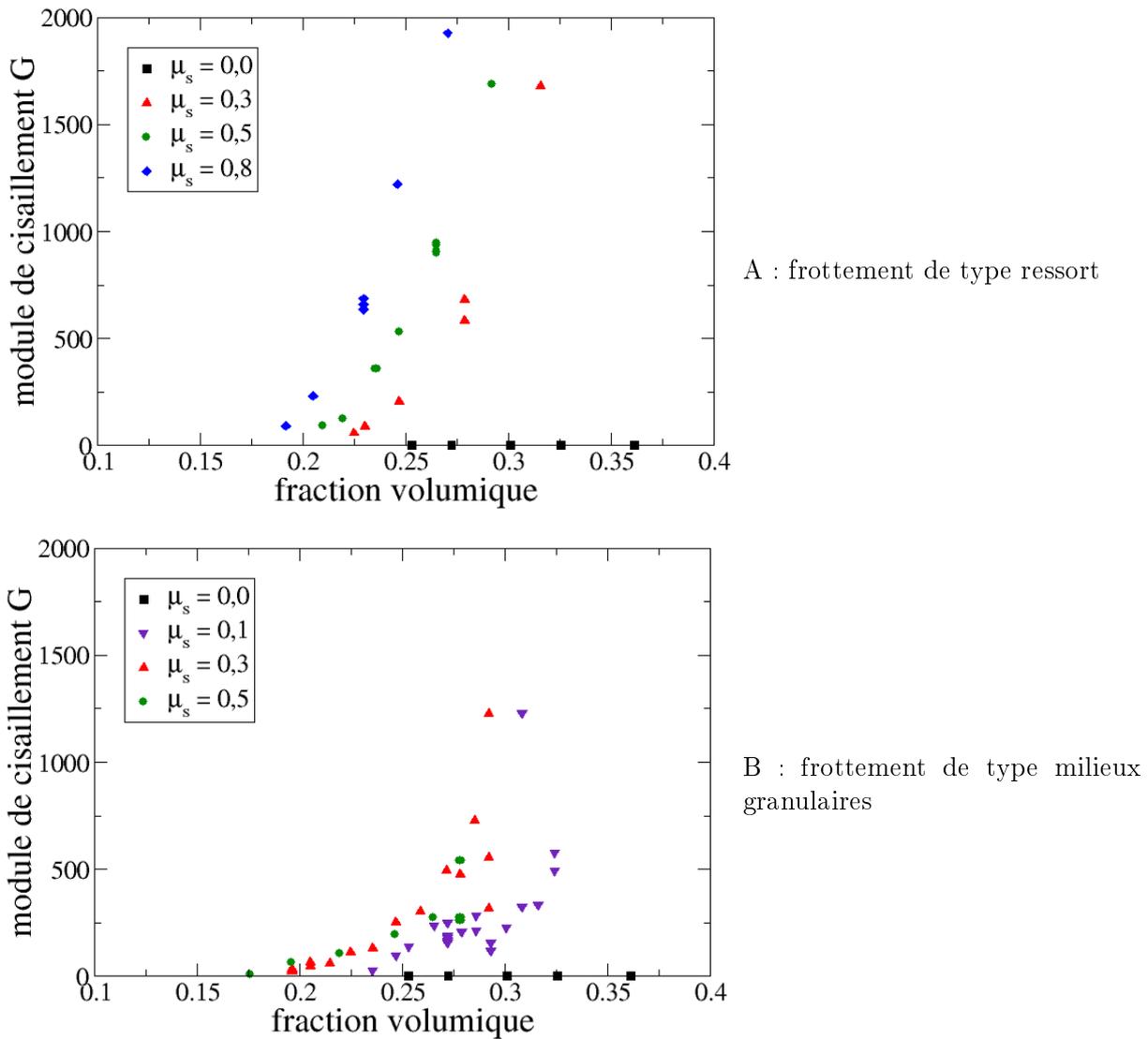


FIG. 3.20 – Module de cisaillement en fonction de la fraction volumique pour des ensembles de fibres de rapport de forme ( $L_t/D$ ) de 20 avec (A) un frottement de type ressort aux contacts pour différentes valeurs de  $\mu_s$  ( $\mu_k = 0,0$ ) et (B) un frottement de type milieux granulaires pour différentes valeurs de  $\mu_s$  ( $\mu_k = \mu_s$ ).

lares de sphères. Nous l'avons implémenté après le frottement de type ressort et, par faute de temps, n'avons pu effectuer une étude aussi précise. Cependant les résultats sur les deux types de frottement donnent des résultats comparables :  $G$  est nul sans frottement,  $G$  et  $B$  augmentent selon des lois puissances avec un exposant qui semble plus élevé pour  $G$  que pour  $B$ . Il serait intéressant de continuer l'étude avec le second type de frottement pour valider ces résultats.

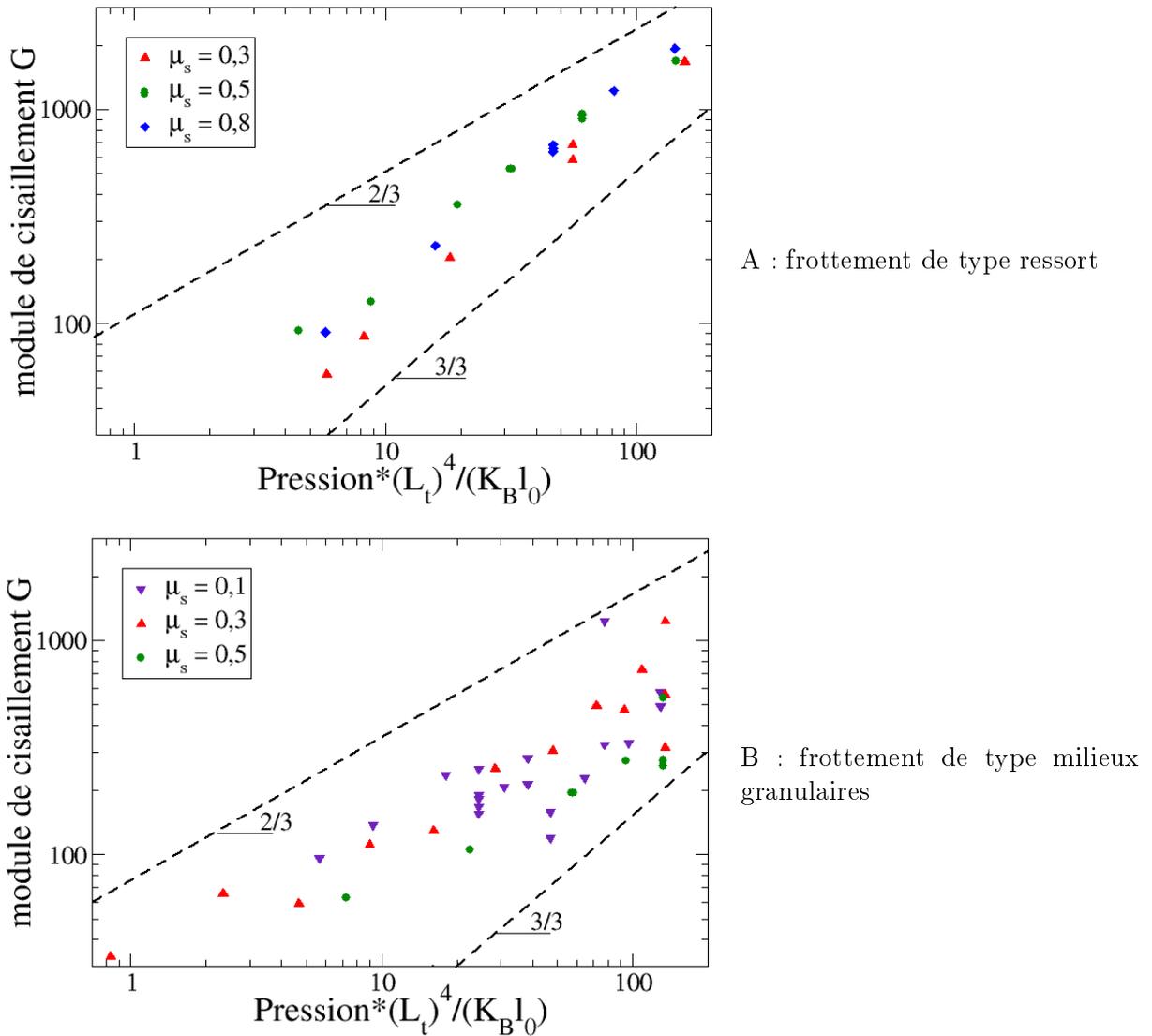


FIG. 3.21 – Module de cisaillement en fonction de la pression normalisée pour des ensembles de fibres de rapport de forme ( $L_t/D$ ) de 20 avec (A) un frottement de type ressort aux contacts pour différentes valeurs de  $\mu_s$  ( $\mu_k = 0, 0$ ) et (B) un frottement de type milieux granulaires pour différentes valeurs de  $\mu_s$  ( $\mu_k = \mu_s$ ). Les droites correspondant à des exposants de  $2/3$  et  $3/3$  sont représentées en tirets.

## Conclusion

Dans cette partie nous avons étudié le comportement en compression d'ensembles de fibres de différents rapports de forme. Des courbes typiques ont pu être dégagées. Pour les faibles fractions volumiques, les fibres se réarrangent, il n'y a pas de contact, la pression est nulle. Au seuil de percolation le nombre de contacts augmente brusquement, le système fournit une réponse mécanique, on détermine une fraction volumique critique  $\phi_C$  et un nombre critique de contacts par fibre (« caging number »). Après la percolation, le nombre de contacts augmente quasi-linéairement avec la fraction volumique, en accord avec le modèle de volume exclu (eqn

1.6) alors que la pression augmente avec  $(\phi - \phi_C)$  à un exposant proche de 3 en accord avec les théories de la littérature (basée sur la déformation en flexion des fibres). Les principaux effets du frottement sur ces courbes typiques sont les diminutions des valeurs critiques ( $\phi_C$  et « caging number ») et l'augmentation de l'hystérésis entre les courbes de compression et de décharge. L'étude du module de compressibilité  $B$  a montré une dépendance en  $(\phi - \phi_C)$  au carré. Celle du module de cisaillement  $G$  conduit à un exposant compris entre 2 et 3 en accord avec la littérature. On retrouve cependant, comme dans le cas des empilements de sphères, qu'en l'absence de frottement, les milieux fibreux se comportent comme des milieux marginalement fragiles, possédant un module de compressibilité mais pas de module de cisaillement ( $G=0$ ).

Une étude plus précise des différents paramètres, en particulier l'influence du frottement, est nécessaire pour confirmer les tendances qui se sont dégagées. Mais ce travail restera laborieux tant que les temps de calculs ne seront pas diminués.

## Chapitre 4

# Echantillons numériques pour l'analyse d'images

Un des paramètres caractéristiques du comportement d'un enchevêtrement est le nombre de contacts entre fibres et son évolution en fonction des sollicitations. On a vu précédemment que les modèles permettaient de retrouver l'allure des courbes expérimentales (exposant 3, hystérésis. . .). Une autre façon de valider ces modèles serait de comparer avec des observations expérimentales leurs prévisions correspondant aux contacts. Cette détermination expérimentale reste toutefois problématique ne serait-ce que par le manque de validation des outils d'analyse d'images. Grâce au modèle présenté dans le chapitre 2, des images d'échantillons idéaux ont pu être obtenues. Toutes les grandeurs sont connues : nombre de fibres, orientation des fibres et nombre de contacts sont celles qui nous seront les plus utiles pour la validation des outils d'analyse d'images. Ces outils seront ensuite appliqués à des images obtenues par tomographie aux rayons X de laines d'acier. Le travail présenté dans cette partie a été effectué en collaboration avec J.P. Masse et L. Salvo.

### 4.1 Obtention d'images 3D d'échantillons

#### 4.1.1 Echantillons réels (laines d'acier)

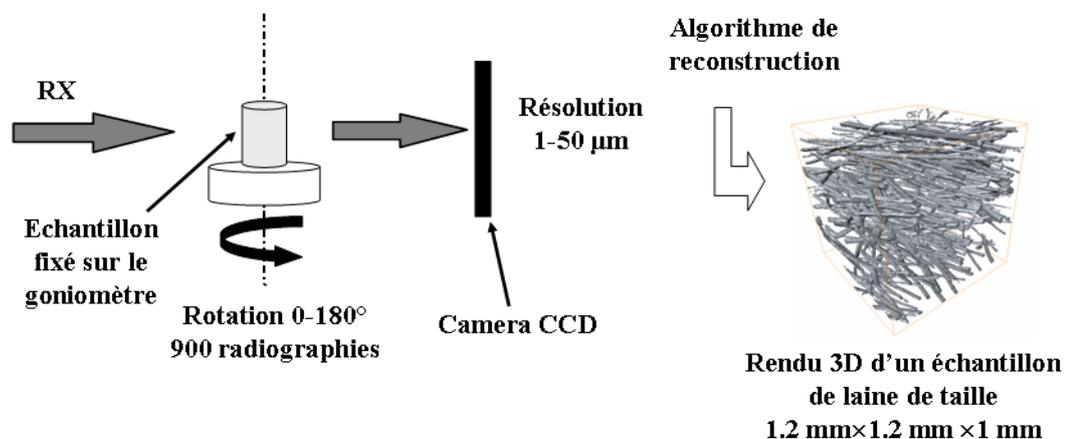


FIG. 4.1 – Principe et dispositif de la tomographie aux rayons X

Des images d'échantillons de laine d'acier lors d'une compression in situ ont été réalisées en tomographie aux rayons X. Elles ont été effectuées à l'ESRF (European Synchrotron Radiation Facility) de Grenoble sur la ligne ID 19. Le principe est décrit à la figure 4.1. Un échantillon est placé sur un goniomètre dans le faisceau de rayons X. Celui émis par le rayonnement synchrotron de l'ESRF est très brillant (flux très intense), homogène, parallèle, cohérent et monochromatique ( $\sim 1\text{\AA}$ ). L'échantillon est radiographié lors d'une rotation pas à pas (900 radiographies entre  $0^\circ$  et  $180^\circ$ ) autour de son axe vertical. Cette étape dure environ 30 minutes. L'image 3D de l'échantillon est ensuite reconstruite à partir des radiographies à l'aide d'un algorithme adéquat. Les images ainsi obtenues représentent un volume d'environ  $10\text{mm}\times 10\text{mm}\times 5,5\text{mm}$  avec

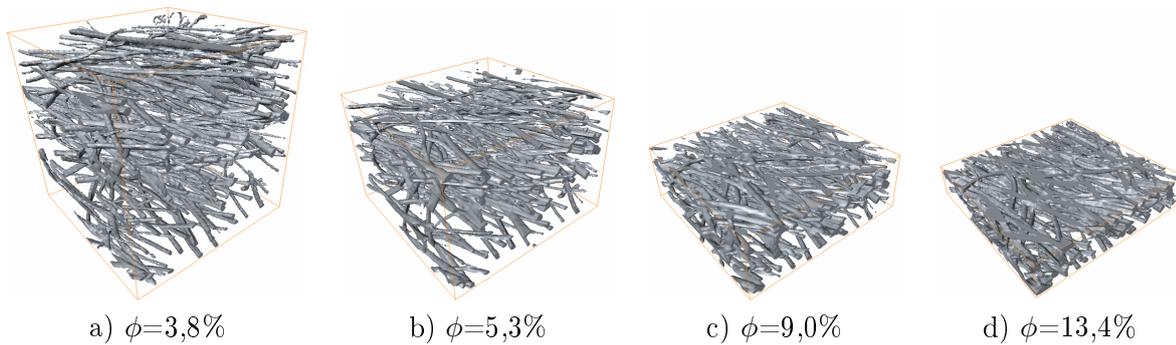


FIG. 4.2 – Visualisation de la structure d'un échantillon de laine d'acier pour quatre états de compression, lors d'un essai in situ (J.P. Masse)

une résolution d'environ  $7\mu\text{m}$ . Les fibres, dont la section moyenne est environ  $600\mu\text{m}^2$ , ont un diamètre moyen correspondant à environ 4 voxels. Des visualisations de morceaux d'images ( $1,2\text{mm}\times 1,2\text{mm}\times 1\text{mm}$ ) obtenues par J.P. Masse lors d'une compression sont présentées à la figure 4.2.

#### 4.1.2 Échantillons modèles

Pour vérifier la validité des méthodes d'analyse d'images qui seront appliquées aux images d'échantillons réels, différents échantillons sont fabriqués à l'aide du modèle décrit dans la partie 2. La fraction volumique initiale modélisée est équivalente à celle de l'échantillon réel, mais, pour des raisons de temps de calculs le rapport de forme des fibres simulées (20) est beaucoup plus faible que celui des fibres réelles (400). L'orientation de la configuration initiale est différente pour chaque échantillon modèle : aléatoire 3D, aléatoire 2D ou orienté dans un cône de  $\pm 15^\circ$  autour de la direction x. Les volumes sont ensuite comprimés dans les trois directions de l'espace. Un seul essai pour chaque orientation a été effectué. Les échantillons numériques ont été voxélisés. La taille de l'image a été choisie pour que le diamètre des fibres en voxels soit équivalent à celui des fibres réelles observées. Sur le tableau ci-dessous sont reportées, les fractions volumiques théoriques et mesurées en cours de la compression sur les images voxélisées ( $425^3$  voxels, longueur des fibres  $\sim 140$  voxels, diamètre  $\sim 7$  voxels en conditions périodiques).

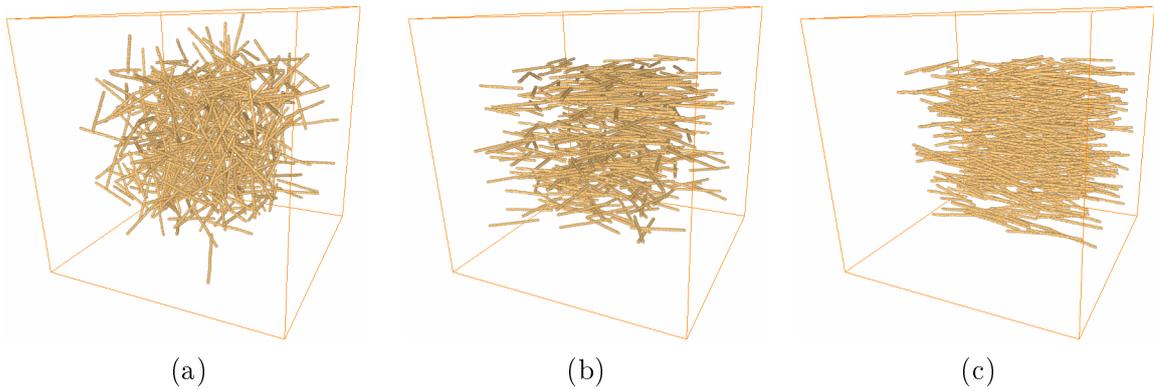


FIG. 4.3 – Visualisation non-périodique des échantillons simulés de différentes orientations : (a) 3D aléatoire, (b) 2D aléatoire et (c) orienté de  $\pm 15^\circ$  autour de l'axe x. Les fibres sont positionnées aléatoirement.

échantillon 3D aléatoire						
modèle	0,035755	0,043977	0,054926	0,069834	0,090664	0,120673
voxélisé	0,035648	0,044000	0,054850	0,069556	0,090763	0,120441
échantillon 2D aléatoire						
modèle	0,035755	0,043977	0,054926	0,069834	0,090664	0,120673
voxélisé	0,035853	0,044230	0,055049	0,069770	0,090921	0,120592
échantillon orienté						
modèle	0,035755	0,043977	0,054926	0,069834	0,090664	0,120673
voxélisé	0,035589	0,043950	0,054784	0,069466	0,090623	0,120158

On remarque que les fractions volumiques mesurées sont très proches, l'influence du passage d'une représentation « continue » à une représentation « voxélisée » est négligeable pour ce type d'images.

Comme il a été montré dans la partie précédente, les fractions volumiques simulées ici pour des rapports de forme de 20 sont inférieures au seuil de percolation. Les échantillons modèles présentés ici vont tout de même permettre de valider des outils d'analyse d'images pour mesurer les distributions d'orientation ainsi que pour dénombrer les contacts apparents entre fibres.

## 4.2 Détermination de l'orientation des fibres simulées

On vérifie que l'orientation des fibres varie très peu lors des compressions. Les résultats pour les échantillons modèles de différentes orientations initiales sont reportés sur les figures 4.4, 4.5 et 4.6 suivant la même présentation. Des échantillons sont visualisés avant (a) et après compression (b) en conditions périodiques. La distribution d'orientation des segments est tracée sur une projection stéréographique (sur X-Y par rapport au pôle sud) [95] (fig 4.7), avant (c) et après compression (d). La distribution des angles  $\theta$  (entre le segment et l'axe Z) est également tracée sous forme d'histogramme (e), les valeurs représentées en barres pleines correspondent à la configuration avant compression, celles en barres vides après, une distribution aléatoire 3D théorique est également reportée (courbe). Les valeurs représentées sont comprises entre  $0^\circ$  et  $90^\circ$  car on ne s'intéresse qu'à la valeur absolue de la composante en z du vecteur directeur. En (f) est représentée l'image d'autocorrélation seuillée typique de ces arrangements. L'obtention de ces images sera expliquée plus en détail au paragraphe suivant. Sur la figure 4.4, les graphes (c) et (d) présentent une répartition des points sur toute la surface, ce qui est typique d'une

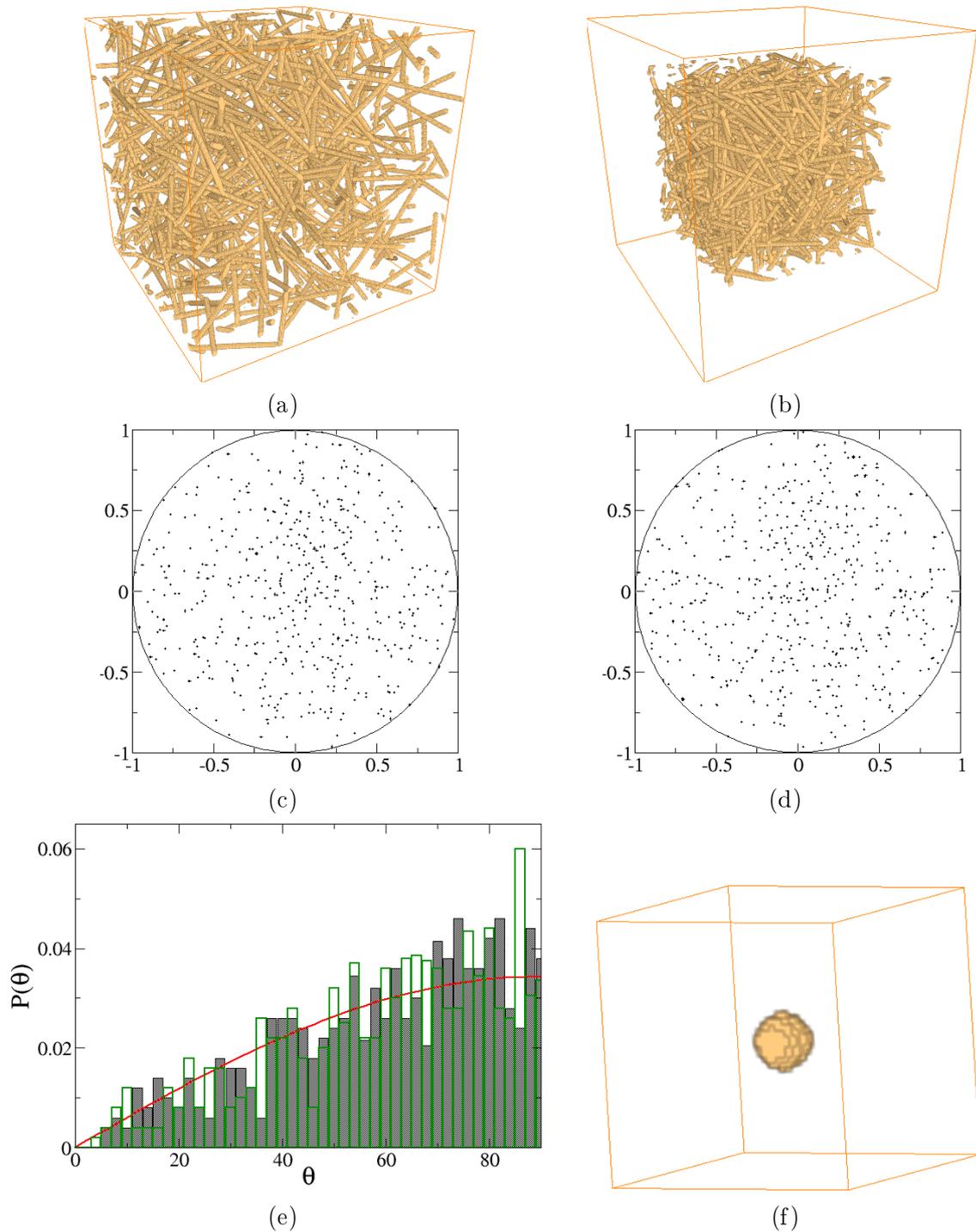


FIG. 4.4 – Echantillon aléatoire 3D avant et après compression. Les échantillons sont visualisés avant (a) et après compression (b) en conditions périodiques. La distribution d'orientation des segments est tracée sur une projection stéréographique avant (c) et après compression (d). Celle selon les angles  $\theta$  est tracée en (e), les valeurs représentées en barres pleines correspondent à la configuration avant compression, celles en barres vides après, la courbe correspond à une distribution aléatoire 3D théorique. En (f) est représenté le volume d'autocorrélation.

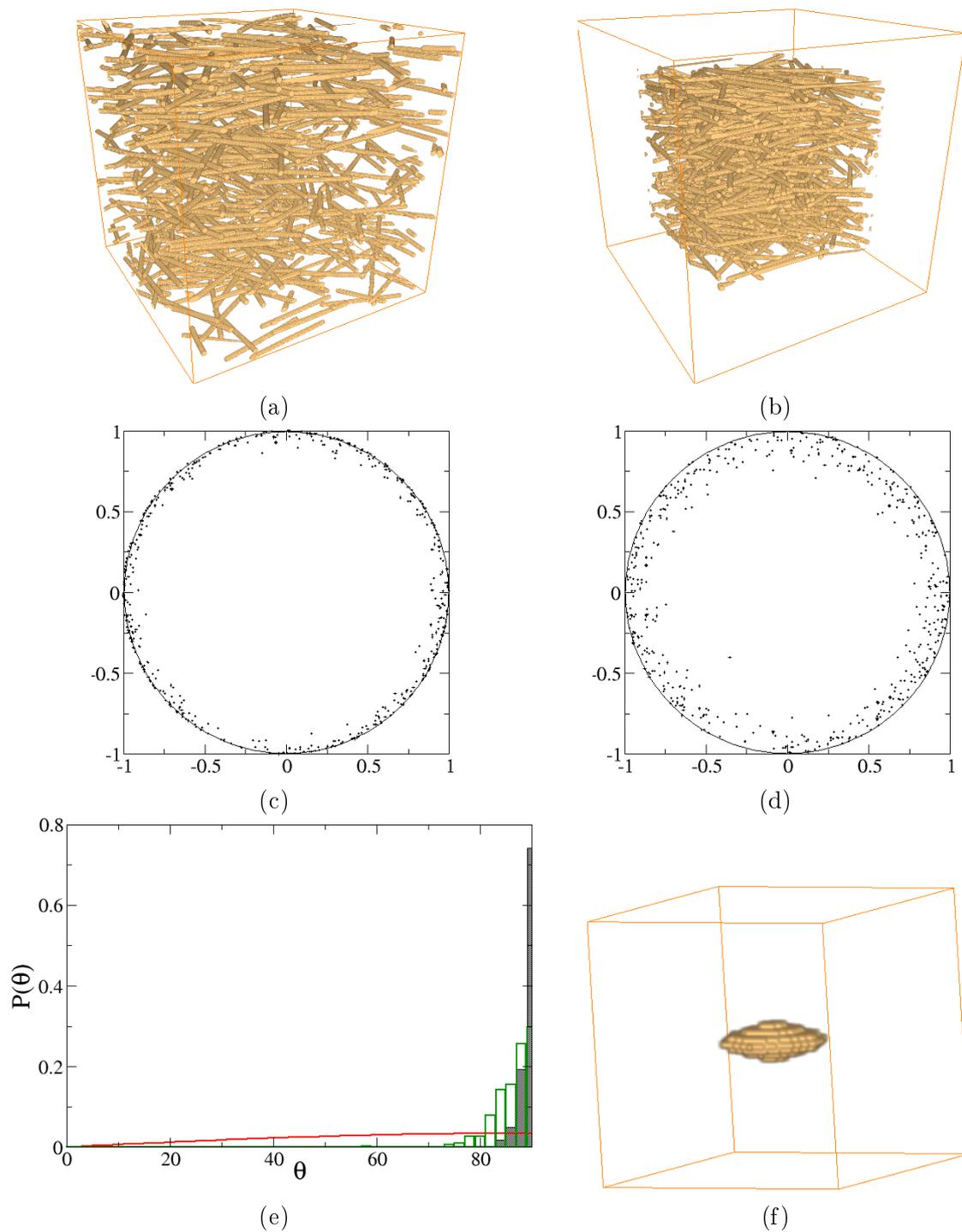


FIG. 4.5 – Echantillon aléatoire 2D avant et après compression (même présentation que la figure 4.4)

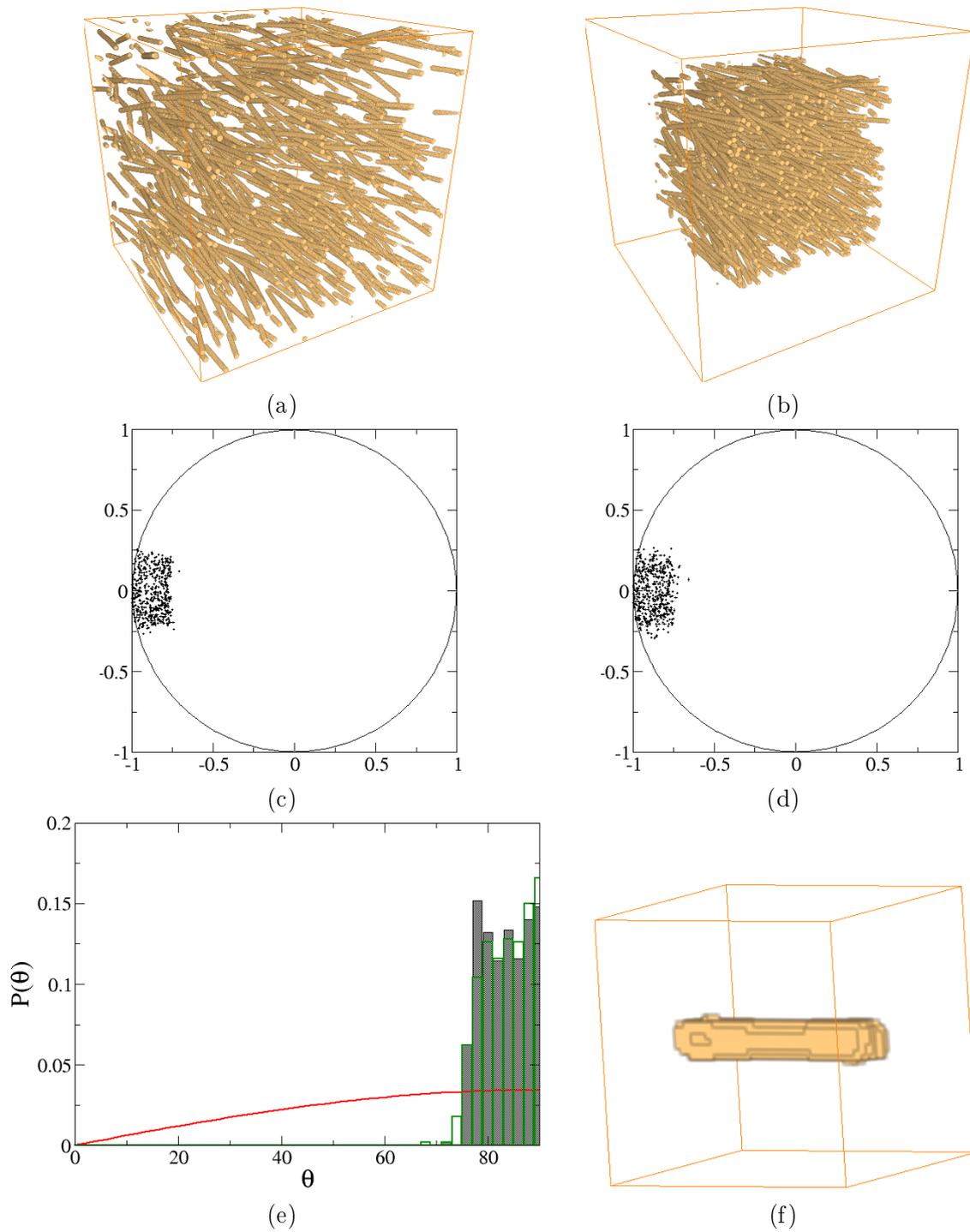


FIG. 4.6 – Echantillon orienté ( $\pm 15^\circ$ ) avant et après compression (même présentation que la figure 4.4)

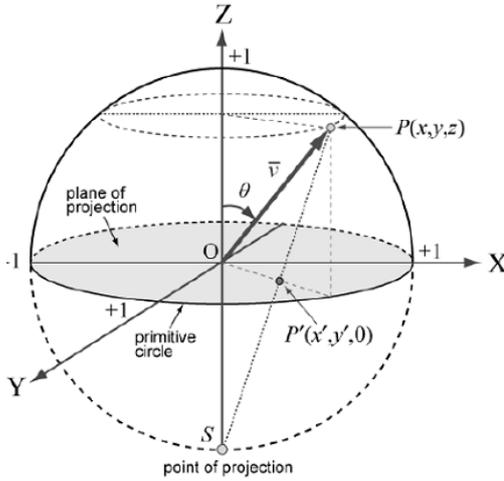


FIG. 4.7 – Illustration schématique de l'axe principal normalisé ( $\bar{v}$  vecteur unitaire) et projection stéréographique de son extrémité sur le plan X-Y en utilisant le pôle Sud (S) comme point de projection. Représentation utilisée par Tan et al. [95]

distribution aléatoire 3D. Les distributions de l'angle  $\theta$  avant et après déformation (e) sont également très proches d'une distribution parfaitement aléatoire indiquée par la courbe. Les graphes (c) et (d) de la figure 4.5 sont très différents. Les points sont concentrés sur le pourtour du cercle, correspondant à une configuration aléatoire 2D marquée. Le fait que les points ne soient pas strictement sur le cercle (configuration 2D aléatoire pure) et que la distribution des points s'étale légèrement lors de la compression est dû à la prise en compte du non-recouvrement des fibres. Quand la fraction volumique augmente, les fibres se gênent et se réarrangent. Cette légère désorientation s'observe aussi sur l'histogramme (e). Les distributions d'orientation pour les échantillons orienté de  $\pm 15^\circ$  autour de l'axe x sont présentées à la figure 4.6. On remarque, sur les graphes (c) et (d), que les fibres ne semblent être orientées que dans une seule direction. Ceci est dû à la façon dont sont décrites les fibres. Dans le modèle numérique, une fibre est définie par une suite de points, dont le premier est situé dans la cellule, et suivant une orientation donnée (ici les fractions volumiques sont faibles, les fibres ne sont pas déformées). L'orientation est choisie dans un cône autour de la direction x, ce qui apparaît sur les graphes (c) et (d). Grâce à la symétrie des fibres par rapport à leur centre, un cône selon x est équivalent à un cône dans la direction opposée, l'accumulation des points selon une direction n'étant due qu'à la définition des fibres. De plus, les conditions périodiques permettent de combler les irrégularités aux bords de la cellule unitaire. On retrouve sur l'histogramme (e), comme sur celui de la figure 4.5(e), la légère désorientation des fibres causées par les non-recouvrements.

On observe que l'orientation des segments dans les différents arrangements reste quasiment inchangée lors de la compression isostatique. Ces échantillons peuvent servir à la description de l'évolution d'une propriété (typiquement le nombre de contacts) en fonction de la fraction volumique pour des configurations équivalentes en terme d'orientation.

#### 4.2.1 Autocorrélation

La valeur des voxels (noté  $F(x, y, z)$ ) dans l'image d'autocorrélation est donnée par

$$F(x, y, z) = \frac{\sum_{i,j,k} I(x, y, z) \cdot I(x+i, y+j, z+k)}{\sum I^2(x, y, z)}$$

où  $I(x, y, z)$  est la valeur du voxel situé en  $(x, y, z)$  de l'image de l'échantillon. Ceci est illustré à la figure 4.8. Une image initiale (a) est translatée et la valeur de chaque voxel est multipliée

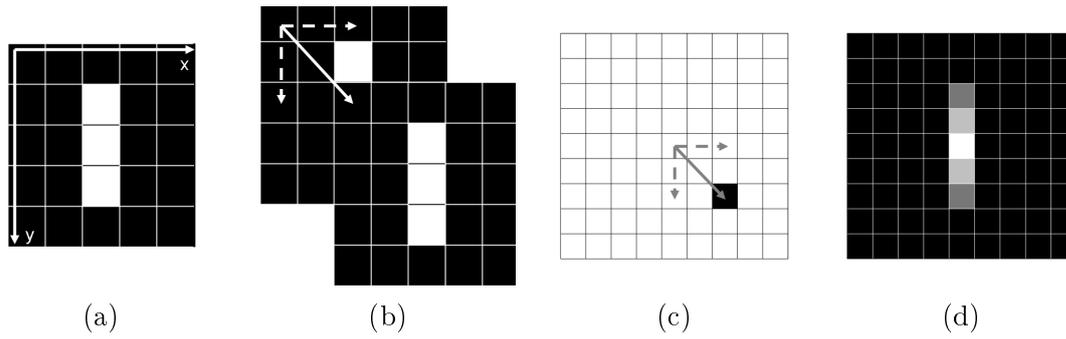


FIG. 4.8 – Représentation schématique de la méthode d'autocorrélation : (a) image considérée, (b) translation de l'image sur elle-même, (c) définition du pixel correspondant à la translation définie en (b), image d'autocorrélation de l'image définie en (a)

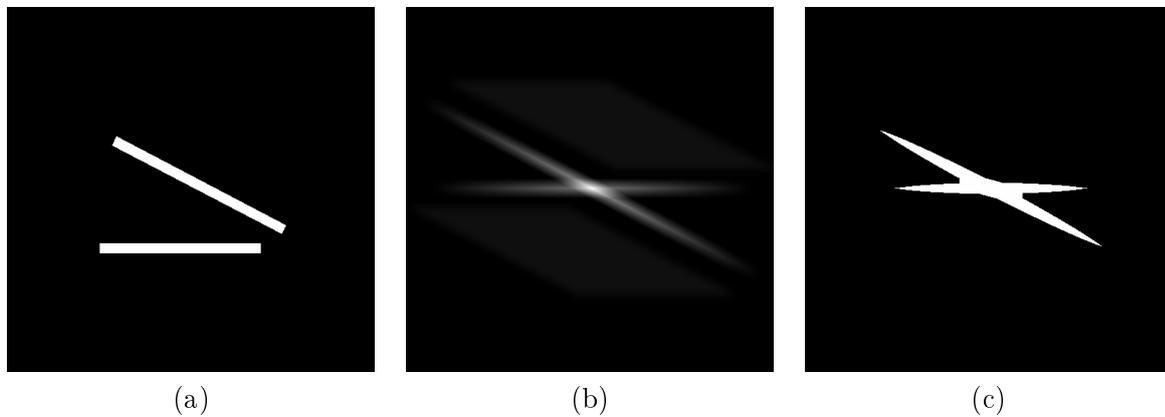


FIG. 4.9 – Illustration de l'utilisation de la méthode d'autocorrélation pour la visualisation de l'orientation des fibres.

par celle du voxel de l'image translaturée (b). La valeur ainsi obtenue est insérée dans l'image d'autocorrélation selon la translation (c). En général, et comme présenté ici, la translation nulle est située au centre de l'image d'autocorrélation. La somme de tous ces produits conduit à une image d'autocorrélation (d). Une image d'autocorrélation permet de déterminer les orientations privilégiées d'un échantillon. Comme présenté sur la figure 4.9, les directions privilégiées de l'image (a) apparaissent plus claires sur l'image (b); un seuillage de l'image d'autocorrélation (c) permet de faciliter la visualisation des orientations (volumes d'autocorrélation). Les volumes d'autocorrélation des échantillons modèles de différentes orientations sont présentés en (f) sur les figures 4.4, 4.5 et 4.6 respectivement pour des orientations aléatoire 3D, aléatoire 2D et orienté ( $\pm 15^\circ$  autour de l'axe x). Comme les orientations restent inchangées durant la compression, un seul volume par modèle a été représenté. On remarque que l'équiprobabilité des orientations d'un échantillon aléatoire 3D conduit à une sphère. Ce volume est plus proche d'un disque pour un échantillon aléatoire 2D. Il prend une forme allongée dans le cas de l'échantillon orienté.

#### 4.2.2 Squelettisation

De nombreux algorithmes (commerciaux ou non) existent, chacun étant adapté à un type d'échantillon suivant la forme (sphérique, allongée...) et nature (continue ou dispersée) des objets. Nous avons d'abord essayé l'algorithme d'Aphelion dont les résultats sont facilement ex-

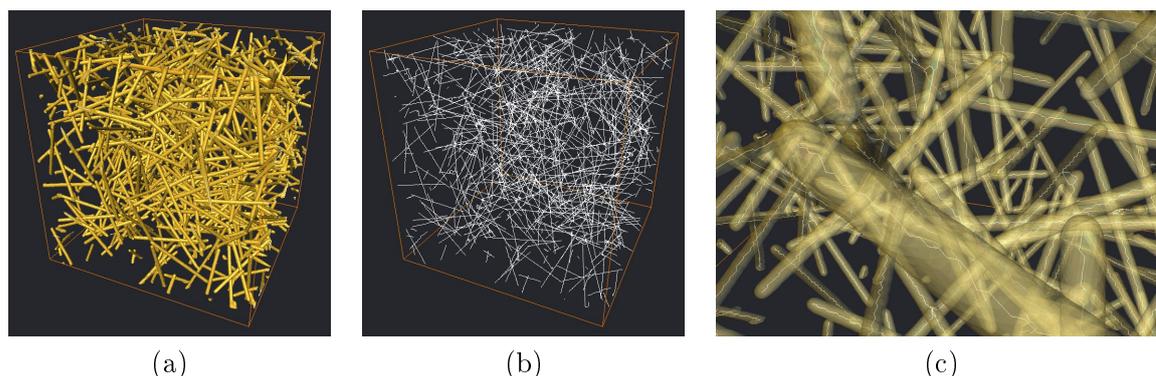


FIG. 4.10 – Représentation d’un ensemble de fibre 3D aléatoire (avant compression) (a) et du squelette obtenu avec le logiciel Avizo (b), en (c) un grossissement.

exploitables. Mais certains paramètres non réglables ne sont pas adaptés à nos objets de grands rapports de forme et conduisent à une mauvaise squelettisation des échantillons modèles. Nous avons donc, récemment, utilisé la fonction de squelettisation du logiciel commercial Avizo. Comme on peut le voir sur la figure 4.10, cet algorithme retrouve et squelettise les fibres des échantillons modèles ((a) un échantillon aléatoire 3D) de façon tout à fait convenable. Un inconvénient est la nécessité de développer une lecture des fichiers de sortie pour les rendre exploitables. A l’issue de la squelettisation, on distingue deux familles de segments : les plus long segments correspondent au squelette proprement dit des fibres, les plus courts correspondent aux contacts entre les fibres. Les orientations (entre extrémités) des segments composant le squelette ont été reportées sous forme de projections stéréographiques à la figure 4.11. Les segments de longueur inférieure au diamètre des fibres (correspondant donc aux contacts) n’ont pas été pris en compte. On remarque une bonne corrélation entre les distributions d’orientations issues du modèle et celles des segments du squelette présentées à la figure 4.11. On retrouve en (a) et (b) les distributions homogènes des volumes aléatoires 3D de la figure 4.4 (c) et (d) respectivement au début et en fin de compression. La représentation sur le pourtour ((c) et (d)) est également respectée pour les arrangements aléatoires 2D (fig 4.5 (c) et (d)). Dans le cas des échantillons orientés, le défaut d’orientation dû à la définition des fibres dans le modèle, que l’on pouvait voir à la figure 4.11 ((c) et (d)), est levé, les fibres sont majoritairement orientées de plus ou moins  $15^\circ$  autour de l’axe x et symétriquement par rapport à y. On observe également que des artéfacts apparaissent quand la fraction volumique augmente. Ils sont semblables à des observations cristallographiques (plans privilégiés). Ils correspondent à des segments de faible distance entre extrémités. Leur orientation est biaisée à cause du nombre limité de possibilité d’orientation autour d’un voxel, chaque voxel n’ayant que 26 voisins.

### 4.3 Détermination du nombre de contacts

Afin d’avoir une référence, nous commençons par déterminer le nombre de contacts sur les configurations issues du modèle numérique. Pour cela, nous devons définir un coefficient de coupure (la distance entre fibres en contact est au maximum « coefficient de coupure  $\times$  diamètre »). Le résultat est présenté à la figure 4.12(a). On remarque que le nombre de contacts calculé augmente rapidement pour des valeurs du coefficient de coupure légèrement supérieures à 1. La voxelisation des échantillons ne permet pas de distinguer de si faibles variations. Dans la suite, le nombre de contacts que l’on prendra comme référence correspond à un coefficient de coupure

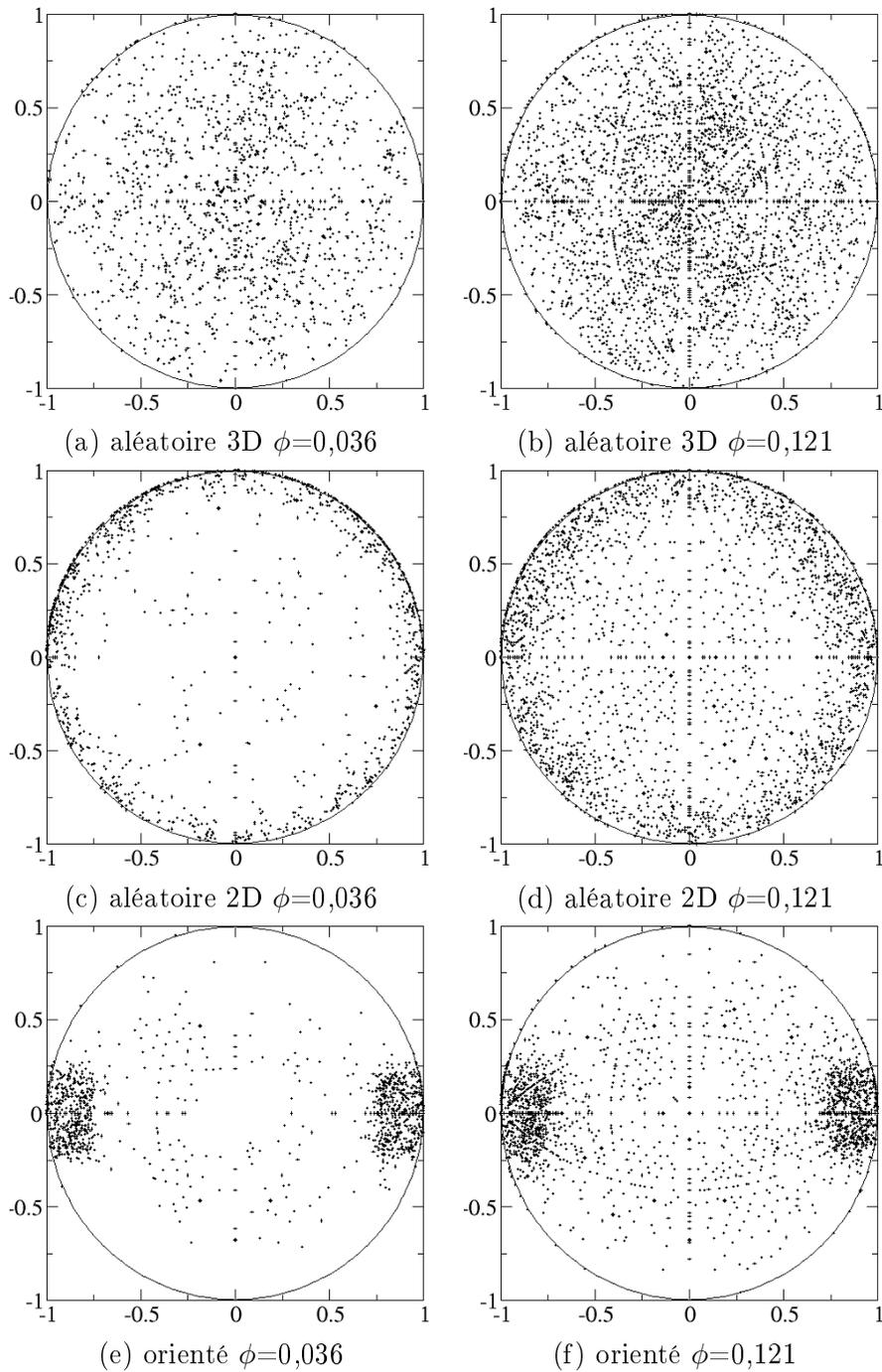


FIG. 4.11 – Projections stéréographiques des segments du squelette des différents échantillons modèles en début et fin de compression

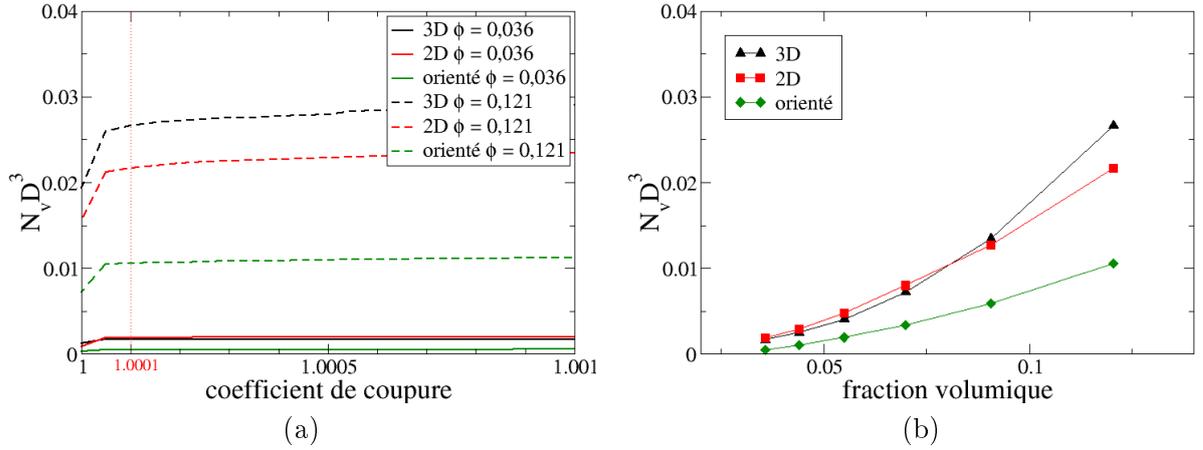


FIG. 4.12 – Nombre de contacts par unité de volume (normalisé) pour différentes orientation en fonction de la distance de coupe pour différentes configurations (a) et en fonction de la fraction volumique (b) pour les échantillons modèles.

de 1,0001. Ces valeurs du nombre total de contacts par unité de volume sont tracées en fonction de la fraction volumique à la figure 4.12(b). A la différence du chapitre précédent, ces nombres totaux de contacts ne sont pas rapportés au nombre de fibres. Leur variation est proche d'une loi quadratique en fraction volumique comme prédit par les modèles analytiques (eqn 1.6) :

$$N_v = \frac{\bar{n}_c N_f L}{V} = \frac{2DN_f^2 L^2}{V^2} I = \frac{32}{\pi} \frac{I}{D^3} \phi^2$$

#### 4.3.1 Par la longueur des segments du squelette

Une première méthode pour mesurer le nombre total de contacts est d'utiliser le squelette de l'échantillon. En effet, comme on peut le voir sur le grossissement de la figure 4.10(c), un

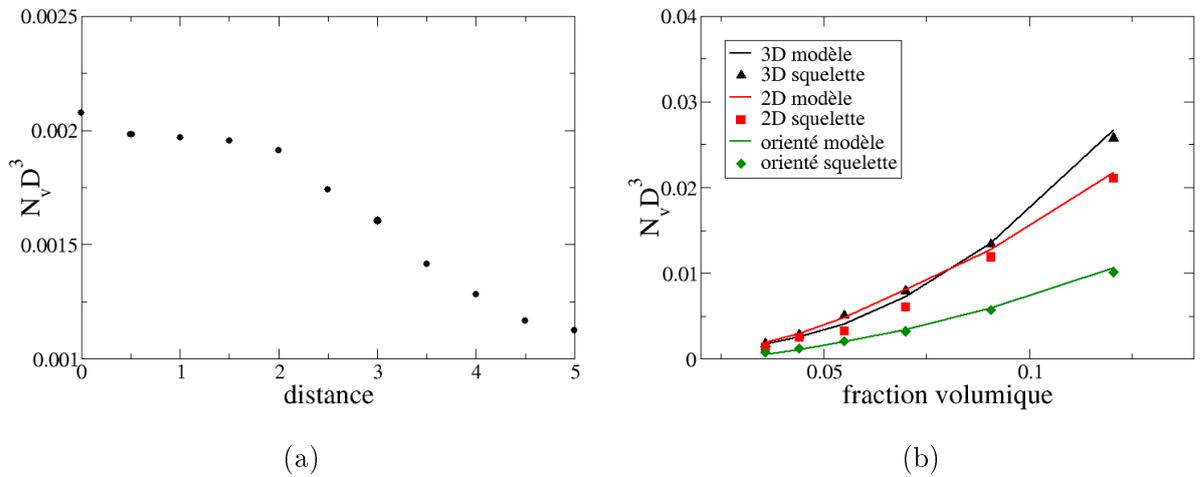


FIG. 4.13 – Nombre de contacts par unité de volume (normalisé) (a) en fonction de la distance minimum (en voxels) entre deux contacts et (b) en fonction de la fraction volumique selon le modèle numérique et par la squelettisation.

contact apparaît sur le squelette sous forme de petits barreaux entre deux fibres de la taille du diamètre des fibres. Parfois, à cause de la voxélisation des images (irrégularité de la surface des fibres...), les barreaux se dédoublent aux contacts. Un algorithme d'unification des contacts basé sur la distance (en voxels) entre barreaux a donc été développé par J.P. Masse. Dans l'état actuel de l'étude, cette distance reste un paramètre ajustable, qui varie selon la distribution d'orientation des fibres. Un exemple de variation du nombre de contacts par unité de volume en fonction de la distance entre barreaux est présenté à la figure 4.13 (a) pour l'arrangement aléatoire 3D avant compression. La figure 4.13 (b) représente le nombre total de contacts par unité de volume déterminé à partir des segments du squelette de longueur inférieure au diamètre des fibres, pour les différents échantillons modèles au cours de la compression. En comparant les figures 4.12(b) et 4.13(b), on voit que la squelettisation permet de retrouver le nombre de contacts dans un échantillon. La distance entre barreaux a été choisie plus grande dans le cas de l'échantillon orienté. Dans ce dernier, les fibres sont d'orientation très proches, la surface de contact est importante et l'algorithme de squelettisation identifie plusieurs barreaux par contacts qui doivent être éliminés sur une plus grande distance.

### 4.3.2 Par la mesure de la courbure du contour des fibres (J.P. Masse)

Cette méthode consiste à évaluer la courbure locale du contour des fibres. Elle repose sur la forme convexe du contour des fibres, qui devient concave aux contacts. Sur la figure 4.14(a) est illustrée la coupe d'un contact entre deux fibres. Pour mesurer la courbure, on définit d'abord la taille de la sous-boîte dans laquelle la mesure sera effectuée. Nous avons choisi un cube faisant 5 voxels de côté. L'exemple de la figure 4.14(b) à 2D montre un carré de 5 pixels de côté. Pour chaque pixel de contour (ici pixel noir ayant un voisin blanc), on détermine le nombre de pixels appartenant à la sous-boîte (centrée sur le pixel considéré) et ne représentant pas des fibres (ici le nombre de pixels blancs) et on assigne ce nombre au pixel du centre de la sous-boîte. On obtient ensuite une image du contour des fibres dont la valeur dépend de la courbure locale (c). Cette image est ensuite seuillée en fonction de la concavité critique à partir de laquelle on considère qu'il y a un contact. Pour l'analyse d'images des échantillons modèles, on a estimé que, à 3D, au-delà de 23 voxels hors fibres dans une sous-boîte de 125, il n'y avait pas de contact. Sur l'illustration à 2D de la figure 4.14(d), la limite a été fixée à 5 pixels. Les pixels ainsi seuillés sont représentés en noir. On remarque qu'ils sont disjoints. Une dilatation est donc effectuée pour les rassembler. Les contacts peuvent ainsi être isolés et dénombrés dans l'échantillon.

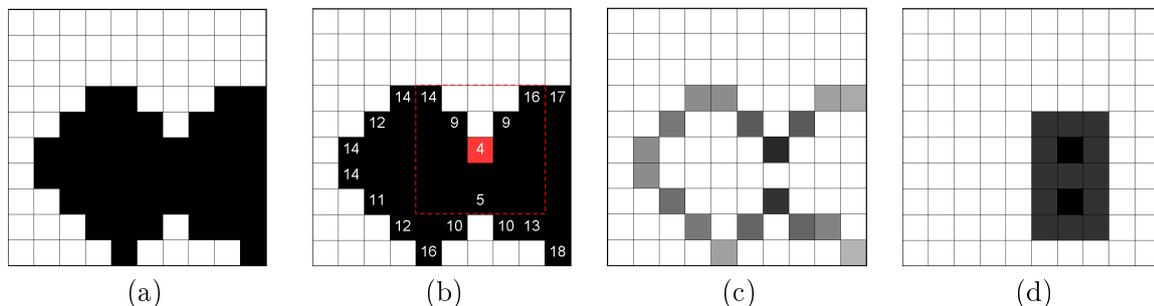
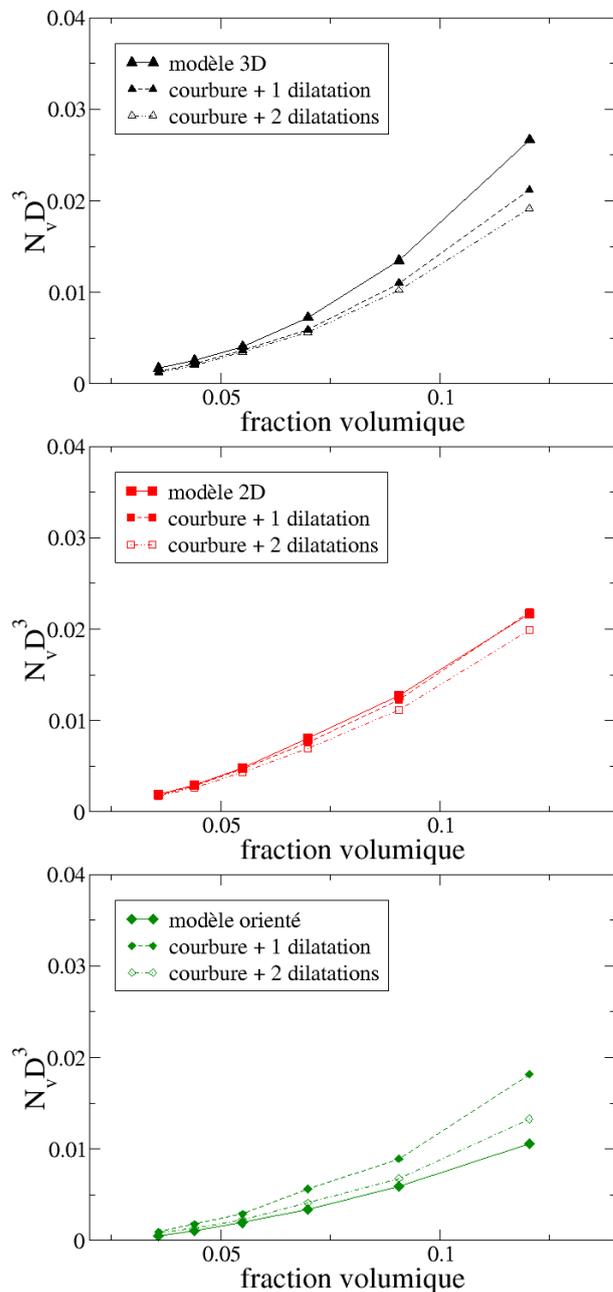


FIG. 4.14 – Illustration de la méthode de la mesure de la courbure locale sur les contours des fibres : (a) image initiale des contours, (b) détail de la mesure avec, pour exemple, un pixel de contour en rouge centré dans la sous-boîte en pointillés, (c) image des contours, le niveau de gris est fonction de la courbure locale, (d) après seuillage et dilatation, isolation du contact.



(a) échantillon modèle 3D aléatoire

(b) échantillon modèle 2D aléatoire

(c) échantillon modèle orienté

FIG. 4.15 – Comparaison du nombre de contacts par unité de volume (normalisé) en fonction de la fraction volumique obtenu par la mesure de la courbure locale suivie d'une ou deux dilatations avec le calcul pour les échantillons modèles.

La figure 4.15 représente le nombre de contacts par unité de volume  $N_v$  (normalisé) obtenu par cette méthode, suivie d'une ou deux dilatations en fonction de la fraction volumique pour les échantillons aléatoire 3D (a), aléatoire 2D (b) et orienté (c). Les valeurs obtenues par le calcul sont également reportées. On remarque que les valeurs mesurées sont très proches des valeurs calculées, en particulier pour les échantillons aléatoires 2D. Il semble cependant que l'optimisation des critères (taille de la sous-boîte, critère de contact et nombre de dilatations) dépend de l'orientation des fibres.

## 4.4 Application des outils d'analyse aux images d'échantillons réels

Des outils d'analyse d'images permettant de vérifier les distributions d'orientation et de dénombrer les contacts dans un échantillon de fibres enchevêtrées ont été validés sur des échantillons modèles de différentes orientations. Ces outils sont maintenant appliqués à des images de matériau réel (laine d'acier).

### 4.4.1 Orientation des fibres

#### Autocorrélation

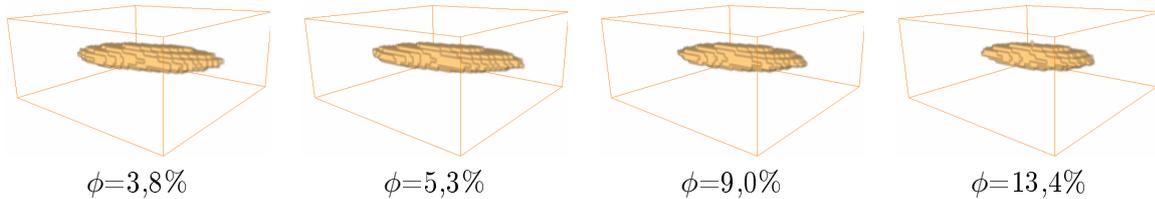


FIG. 4.16 – Visualisation des volumes d'autocorrélation d'échantillons de laine d'acier en cours de compression

Les volumes d'autocorrélation sont représentés sur la figure 4.16. Une direction privilégiée est clairement visible, les volumes présentant une forme allongée. On observe également que, qualitativement, l'orientation de l'ensemble évolue peu au cours de la compression.

#### Squelettisation

Les images des échantillons réels ont été squelettisées. Les orientations des segments (dont la longueur est supérieure à 4 voxels, le diamètre moyen d'une fibre) ont été représentées sur des projections stéréographiques à la figure 4.17. En accord avec les observations faites sur les volumes d'autocorrélation, les segments ont une distribution plus marquée suivant une direction (orientée d'environ  $15^\circ$  par rapport à l'axe x) qui reste inchangée au cours de la compression. Cette orientation privilégiée semble plus visible pour les fractions volumiques plus faibles. On peut expliquer ceci par l'augmentation du nombre de segments de faible distance entre extrémités quand la fraction volumique augmente. Les fibres forment plus de contacts, les distances entre contacts sont plus faibles, et comme nous l'avons vu précédemment, les segments de faibles distances entre extrémités ont une orientation biaisée par la voxélisation.

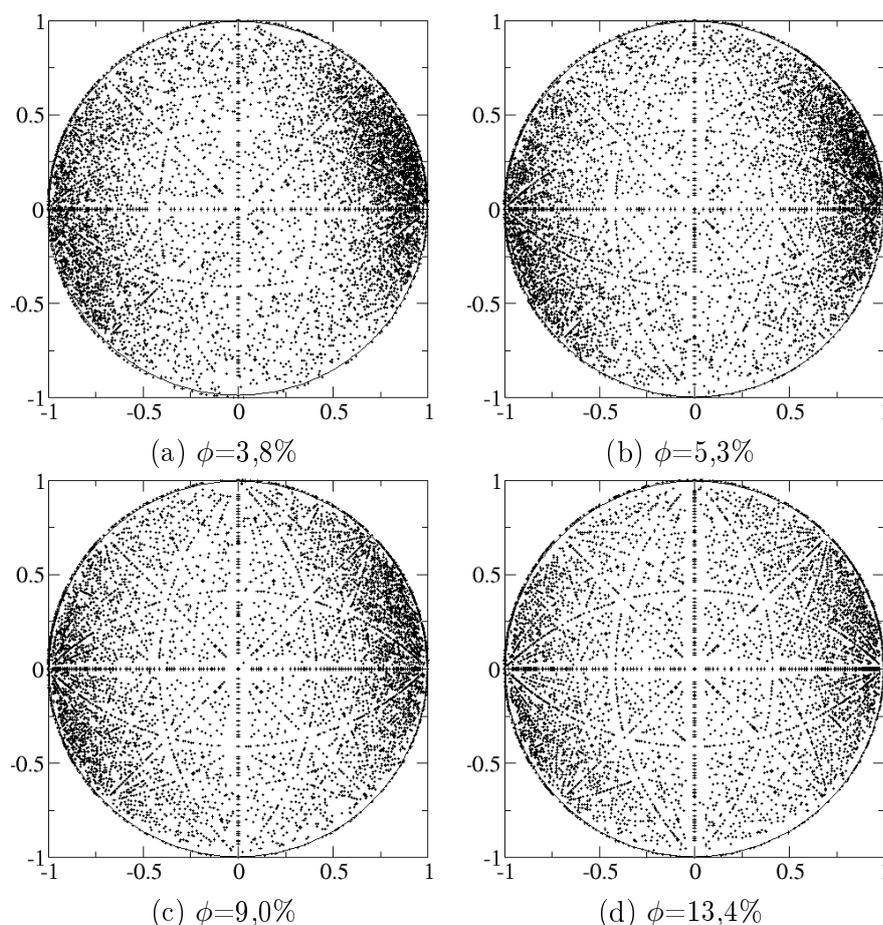


FIG. 4.17 – Projections stéréographiques des segments du squelette de différents échantillons de laine d'acier au cours de la compression.

#### 4.4.2 Nombre de contacts

##### Mesure de la courbure locale

Cette méthode a été appliquée aux images d'échantillons réels avec un jeu de paramètres très proche de celui utilisé sur les échantillons modèles. La sous-boîte dans laquelle sera effectuée la mesure compte 125 voxels. Par contre pour tenir compte de la section irrégulière des fibres (les fibres réelles ne sont pas circulaires) le nombre maximum de voxels hors fibres pour mesurer un contact passe de 23 à 25. Deux dilatations sont également effectuées pour rassembler les morceaux de contacts. Les valeurs obtenues sont reportées sur la figure 4.18, de même que les valeurs calculées pour les échantillons modèles. On remarque que le nombre de contacts très proche des orientations aléatoires pour les plus faibles fractions volumiques semble augmenter moins vite avec la fraction volumique pour se rapprocher des valeurs d'un échantillon orienté. Il semble donc qu'une légère variation d'orientation, quasiment invisible sur les mesures d'orientation, ait une influence remarquable sur le nombre de contacts.

## Squelettisation

Nous nous sommes également intéressés au nombre de contacts déduit du squelette des images d'échantillons réels. Les valeurs obtenues sont également reportées sur la figure 4.18. On remarque que pour les faibles fractions volumiques les deux méthodes (mesure de la courbure locale et squelettisation) prédisent le même nombre de contacts par unité de volume. Par contre, pour les plus fortes fractions volumiques, ce nombre estimé par le squelette est plus faible. Il semblerait que, pour des fractions volumiques élevées, l'algorithme de squelettisation ne retrouve pas correctement toutes les fibres ni tous les contacts, probablement à cause des sections irrégulières des fibres.

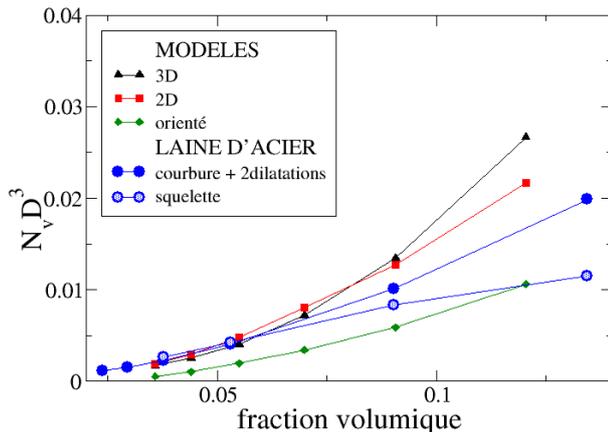


FIG. 4.18 – Nombre de contacts (normalisé) par unité de volume en fonction de la fraction volumique obtenu sur un échantillon de laine d'acier par la mesure de la courbure locale suivie de deux dilatations et par squelettisation. Sont également reportés les nombres de contacts obtenus par le calcul pour les échantillons modèles.

## Conclusions

Dans cette partie ont été testées différentes méthodes utilisées pour l'analyse d'images d'ensembles de fibres enchevêtrées. Ces méthodes ont d'abord été appliquées à des échantillons modèles parfaitement connus (longueur et orientations de fibres, nombres de contacts...) issus du modèle numérique présenté au chapitre 2. Ceci a permis d'obtenir des résultats en fonction de la fraction volumique de l'échantillon et de l'orientation des fibres. Ces méthodes ont ensuite été appliquées à des échantillons de matériau réel (laine d'acier) durant une compression.

Nous nous sommes d'abord intéressés à l'orientation des fibres, par images d'autocorrélation et par squelettisation. La première méthode, l'autocorrélation, est facile à mettre en oeuvre, mais, dans le cadre de ce travail, n'a fourni que des résultats qualitatifs, des tendances sur les orientations et leurs (non-)évolution au cours d'une compression (compression isostatique simulée ou compression de matériau réel). L'autre méthode, la squelettisation, permet d'évaluer quantitativement l'orientation de chaque fibre. Cette méthode donne de très bons résultats, mais il est difficile de trouver un algorithme commercial adapté au type d'échantillon.

Nous avons également essayé de dénombrer par analyse d'images le nombre de fibres en contact dans un échantillon, car la plupart des modèles prédisant le comportement mécanique d'un ensemble de fibres au cours d'une compression sont basés sur le nombre de contacts (et la flexion des fibres entre contacts). L'utilisation d'échantillons modèles simulés a mis en évidence la différence entre des contacts « mécaniques » qui supportent la déformation (selon la simulation) et des contacts « apparents » (où les forces d'interaction sont nulles). L'analyse d'images ne permet pas de distinguer ces deux catégories. Deux méthodes d'analyse d'images ont cependant été employées. La première méthode est la squelettisation, où des barreaux de faible taille entre fibres représentent des contacts. La seconde est basée sur la courbure locale du contour des fibres.

Au point de contact, la courbure est convexe alors que le contour d'une fibre est concave. Ces méthodes employées pour déterminer le nombre de contacts (apparents dans les échantillons modèles) fournissent des résultats très proches des valeurs calculées (simulées).

L'analyse d'images d'un échantillon réel en cours de compression a permis d'observer que le nombre de contacts semble très sensible à une légère modification de l'orientation des fibres.



# Conclusion et perspectives

## Conclusion

Le travail de cette thèse a principalement été de développer un modèle numérique qui, par la discrétisation de fibres en un nombre variable de segments (cylindriques), permet de diminuer le nombre de degrés de liberté d'un ensemble de fibres par rapport à un modèle « collier de perles ». Le comportement en compression isostatique d'ensembles de fibres a été étudié. Des évolutions typiques ont pu être dégagées. Pour les faibles fractions volumiques, les fibres se réarrangent, il n'y a pas de contact, la pression est nulle. Au seuil de percolation le nombre de contacts augmente brusquement, le système fournit une réponse mécanique, on détermine une fraction volumique critique  $\phi_C$  et un nombre critique de contacts par fibre (« caging number »). Après la percolation, le nombre de contacts augmente quasi-linéairement avec la fraction volumique, en accord avec le modèle du volume exclu (eqn 1.6) alors que la pression est proportionnelle à  $(\phi - \phi_C)^n$  avec un exposant  $n$  proche de 3 en accord avec la théorie de van Wyk [2] (basée sur la déformation en flexion des fibres). Les principaux effets du frottement sur ces courbes typiques sont les diminutions des valeurs critiques ( $\phi_C$  et « caging number ») et l'augmentation de l'hystérésis entre les courbes de compression et de décharge. L'étude du module de compressibilité  $B$  a montré une dépendance en  $(\phi - \phi_C)$  au carré. Celle, plus délicate, du module de cisaillement  $G$  conduit à un exposant compris entre 2 et 3 en accord avec la littérature. On retrouve, comme dans le cas des empilements de sphères, qu'en l'absence de frottement, les milieux fibreux se comportent comme des fluides, possédant un module de compressibilité mais pas de module de cisaillement ( $G=0$ ).

Des échantillons modèles pour l'analyse d'images ont aussi été construits par simulation. Ils ont servi à valider les différentes méthodes utilisées (principalement squelettisation et mesure de la courbure locale du contour des fibres) pour ensuite les appliquer à des images d'échantillons réels (laine d'acier) au cours d'une compression. Il a été mis en évidence l'efficacité de ces méthodes pour dénombrer les contacts apparents entre fibres (le dénombrement des seuls contacts mécaniquement actifs est inaccessible à partir de ces méthodes). On remarque cependant que le nombre de contacts apparents d'un échantillon suit des lois très proches de celles proposées par la théorie du volume exclu et dépendant fortement de l'orientation des fibres.

Le modèle numérique développé au cours de cette thèse est robuste et peut se prêter à différentes applications. Mais il présente quelques inconvénients. Les principaux sont la dépendance des propriétés mécaniques d'une fibre (en particulier la flexibilité) avec le nombre de segments de discrétisation et la lourdeur des calculs, comme par exemple la recherche de croisements de segments lors des phases de relaxation. Une diminution des temps de calculs, par parallélisation et optimisation du code, semble plus que nécessaire pour la poursuite de ce travail.

## Perspectives

Une autre conséquence de la longueur des calculs est la restriction à une très grande rigidité des fibres simulées. Lorsque la flexibilité des fibres augmente, ceci nécessite un nombre de pas de relaxation plus important entre deux incréments de compression. En réduisant les temps de calculs, des simulations de fibres plus flexibles pourraient être effectuées. Il serait également possible de modéliser des fibres de plus grand rapport de forme et donc plus proches de fibres réelles. On pourrait aussi étudier l'effet de la tortuosité des fibres sur le seuil de percolation ou sur le nombre de contacts.

Evidemment, l'influence du frottement conjointement à ces divers paramètres serait en soi une autre perspective. Au-delà de la notion de frottement, on pourrait également envisager de modifier la nature des interactions entre fibres en introduisant par exemple des interactions fortes. On pourrait ainsi simuler le comportement de matériaux métalliques (laines d'acier en l'occurrence) partiellement frittés ; les conditions du procédé de frittage, sa durée, seraient traduits par une distribution spatiale de liens plus ou moins « forts » dans l'enchevêtrement. On pourrait, de cette manière, reproduire toute la gamme de comportements entre matériaux purement enchevêtrés et matériaux cellulaires.

L'orientation des fibres est également un paramètre important dans le comportement d'un ensemble. Les matériaux réels ne sont jamais parfaitement aléatoires comme ceux simulés dans cette thèse. Une modification de l'orientation des fibres, soit par modification de la configuration initiale soit par modification de la déformation (compression uniaxiale par exemple) permettrait d'étudier l'anisotropie de ces ensembles de fibres modèles, leur configuration devenant plus proche de celle des matériaux réels.

Après avoir modélisé le comportement mécanique de matériaux réalistes par la nature des fibres, leurs orientations et la nature des contacts, il serait intéressant d'introduire les configurations obtenues dans d'autres modélisations afin de coupler l'étude des propriétés mécaniques avec celle, par exemple, de conduction thermique ou de conductivité électrique. En effet, dans le cadre d'une optimisation multifonctionnelle, on peut imaginer optimiser des structures enchevêtrées devant répondre à des requêtes contradictoires, par exemple tenue mécanique et isolation thermique. Un premier pas serait de coupler le modèle mécanique avec des approches discrètes développées pour la simulation des propriétés de conduction de ces ensembles (voir la thèse de F. Dalmas par exemple), et de retrouver les résultats expérimentaux présentés dans la thèse de J.P. Masse sur la laine d'acier.

D'autres comportements pourraient être envisagés. Un exemple est le fluage des laines sous leur propre poids, conduisant à des évolutions dans le temps des propriétés d'isolation thermique par modification du nombre de contacts dans le milieu. . . C'est typiquement une problématique industrielle qui pourrait tirer bénéfice de l'usage de la modélisation développée dans cette thèse.

# Bibliographie

- [1] J. Schofield. Researches on Wool Felting. *J. Textile Inst.*, 29 :T239–T252, 1938.
- [2] C.M. van Wyk. Note on the Compressibility of Wool. *J. Textile Inst.*, 37 :T285–T292, 1946.
- [3] M. Baudequin, G. Ryschenkow, and S. Roux. Non-linear elastic behavior of light fibrous materials. *Eur. Phys. J. B*, 12 :157–162, 1999.
- [4] J.P. Masse, L. Salvo, D. Rodney, Y. Bréchet, and O. Bouaziz. Influence of relative density on the architecture and mechanical behaviour of a steel metallic wool. *Scripta Mater.*, 54 :1379–1393, 2006.
- [5] D. Poquillon, B. Viguiier, and E. Andrieu. Compression de fibres enchevêtrées calibrées en nylon at aluminium. Expériences et modélisation. *18<sup>e</sup> Congrès Français de Mécanique, Grenoble, 27-31 août, 2007*.
- [6] D Poquillon, B. Viguiier, and E. Andrieu. Experimental data about mechanical behaviour during compression tests for various matted fibres. *J. Mater. Sci.*, 40 :5963–5970, 2005.
- [7] J.I. Dunlop. Characterizing the Compression Properties of Fibre Masses. *J. Textile Inst.*, 65 :532–536, 1974.
- [8] J.I. Dunlop. Acoustic Emission from Wool during Compression. *J. Textile Inst.*, 70 :364–366, 1979.
- [9] J.I. Dunlop. The Dynamic Bulk Modulus of Fibre Masses. *J. Textile Inst.*, 72 :154–161, 1981.
- [10] J.I. Dunlop. On the Compression Characteristics of Fibre Masses. *J. Textile Inst.*, 74 :92–97, 1983.
- [11] F.C. MacKintosh, J. Käs, and P.A. Janmey. Elasticity of Semiflexible Biopolymer Networks. *Phys. Rev. Lett.*, 75 :4425–4428, 1995.
- [12] B. Hinner, M. Tempel, E. Sackmann, K. Kroy, and E. Frey. Entanglement, Elasticity, and Viscous Relaxation of Actin Solutions. *Phys. Rev. Lett.*, 81 :2614–2617, 1998.
- [13] M.L. Gardel, M.T. Valentine, J.C. Crocker, A.R. Brausch, and D.A. Weitz. Microrheology of Entangled F-Actin Solutions. *Phys. Rev. Lett.*, 91 :158302, 2003.
- [14] K. Kroy. Elasticity, dynamics and relaxation in biopolymer networks. *Curr. Opin. in Colloid and Interface Sci.*, 11 :56–64, 2006.
- [15] I. Balberg, C.H. Anderson, Alexander S., and N. Wagner. Excluded volume and its relation to the onset of percolation. *Phys. Rev. B*, 30 :3933–3943, 1984.
- [16] I. Balberg, N. Binenbaum, and N. Wagner. Percolation Thresholds in the Three-Dimensional Sticks System. *Phys. Rev. Lett.*, 52 :1465–1468, 1984.

- [17] F. Dalmas, R. Dendievel, L. Chazeau, J.Y. Cavallé, and C. Gauthier. Carbon nanotube-filled polymer composites. Numerical simulation of electrical conductivity in three-dimensional entangled fibrous networks. *Acta Mater.*, 54 :2923–2931, 2006.
- [18] L. Berhan and A.M. Sastry. Modeling percolation in high-aspect-ratio fiber systems. I. Soft-core versus hard-core models. *Phys. Rev. E*, 75 :041120, 2007.
- [19] L. Berhan and A.M. Sastry. Modeling percolation in high-aspect-ratio fiber systems. II. The effect of waviness on the percolation onset. *Phys. Rev. E*, 75 :041121, 2007.
- [20] Z. Nédá, R. Florian, and Y. Brechet. Reconsideration of continuum percolation of isotropically oriented sticks in three dimensions. *Phys. Rev. E*, 59 :3717–3719, 1999.
- [21] A.L.R. Bug, S.A. Safran, and I. Webman. Continuum Percolation of Rods. *Phys. Rev. Lett.*, 54 :1412–1415, 1985.
- [22] E.J. Garboczi, K.A. Snyder, J.F. Douglas, and M.F. Thorpe. Geometrical percolation threshold of overlapping ellipsoids. *Phys. Rev. E*, 52 :819–828, 1995.
- [23] V. Favier. *Etude de nouveaux matériaux composites obtenus à partir de latex filmogènes et de whiskers de cellulose : effets de la percolation mécanique*. PhD thesis, INP Grenoble, 1995.
- [24] D.M. Bigg. Mechanical, Thermal, and Electrical p.
- [25] J.Y. Yi and G.M. Choi. Percolation Behavior of Conductor-Insulator Composites with Varying Aspect Ratio of Conductive Fiber. *J. Electroceramics*, 3 :361–369, 1999.
- [26] A.P. Philise. The Random Contact Equation and Its Implications for (Colloidal) Rods in Packings, Suspensions, and Anisotropic Powders. *Langmuir*, 12 :1127–1133, 1996.
- [27] K. Desmond and S.V. Franklin. Jamming of three-dimensional prolate granular materials. *Phys. Rev. E*, 73 :031306, 2006.
- [28] T. Komori and K. Makishima. Numbers of Fiber-to-Fiber Contacts in General Fiber Assemblies. *Textile Res. J.*, 47 :13–17, 1977.
- [29] K.E. Duckett and C.C. Cheng. A Discussion of the Cross-Point Theories of van Wyk. *J. Textile Inst.*, 69 :55–59, 1978.
- [30] A.E. Stearn. The Effect of Anisotropy in the Randomness of Fibre Orientation on Fibre-to-Fibre Contacts. *J. Textile Inst.*, 62 :353–360, 1971.
- [31] S. Ranganathan and S.G. Advani. Fiber-fiber interactions in homogeneous flows of nondilute suspensions. *J. Rheol.*, 35 :1499–1522, 1991.
- [32] S. Toll. Note : On the tube model for fiber suspensions. *J. Rheol.*, 37 :123–125, 1993.
- [33] S. Toll. Packing Mechanics of Fiber Reinforcements. *Polym. Eng. Sci.*, 38 :1337–1350, 1998.
- [34] N. Pan. A Modified Analysis of the Microstructural Characteristics of General Fiber Assemblies. *Textile Res. J.*, 63 :336–345, 1993.
- [35] T. Komori and M. Itoh. A Modified Theory of the Fiber Contact in General Fiber Assemblies. *Textile Res. J.*, 64 :519–528, 1994.
- [36] M Nardin, E Papirer, and J. Schultz. Contribution à l'Etude des Empilements au Hasard de Fibres et/ou de Particules Sphériques. *Powder Technol.*, 44 :131–140, 1985.
- [37] G.D. Scott and D.M. Kilgour. The density of random close packing of spheres. *Brit. Appl. Phys. (J. Phys. D)*, 2 :863–866, 1969.

- [38] H.A. Makse, N. Gland, D.L. Johnson, and L.M. Schwartz. Why Effective Medium Theory Fails in Granular Materials. *Phys. Rev. Lett.*, 83 :5070–5073, 1999.
- [39] G. Lumay and N. Vandewalle. Compaction of anisotropic granular materials : Experiments and simulations. *Phys. Rev. E*, 70 :051314, 2004.
- [40] H.A. Makse, D.L. Johnson, and L.M. Schwartz. Packing of Compressible Granular Materials. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :4160–4163, 2000.
- [41] H.A. Makse, N. Gland, D.L. Johnson, and L. Schwartz. Granular packings : Nonlinear elasticity, sound propagation, and collective relaxation dynamics. *Phys. Rev. E*, 70 :061302, 2004.
- [42] L.E. Silbert, D ; Ertas, G.S. Grest, T. Halsey, and Levine D. Geometry of frictionless and frictional sphere packings. *Phys. Rev. E*, 65 :032304, 2002.
- [43] C.S. O’Hern, S.A. Langer, A.J. Liu, and S.R. Nagel. Random Packing of Frictionless Particles. *Phys. Rev. Lett.*, 88 :075507, 2002.
- [44] C.S. O’Hern and L.E. Silbert. Jamming at zero temperature and zero applied stress : The epitome of disorder. *Phys. Rev. E*, 68 :011306, 2003.
- [45] S.R. Williams and A.P. Philipse. Random packing of spheres and spherocylinders simulated by mechanical contraction. *Phys. Rev. E*, 67 :051301, 2003.
- [46] D. Rodney, M. Fivel, and R. Dendievel. Discrete Modeling of the Mechanics of Entangled Materials. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :108004, 2005.
- [47] M. Alkhagen and S. Toll. Micromechanics of a Compressed Fiber Mass. *J. Appl. Mech.*, 74 :723–731, 2007.
- [48] B. Neckář. Compression and Packing Density of Fibrous Assemblies. *Textile Res. J.*, 67 :123–130, 1997.
- [49] J.J. Pawlak and D.S. Keller. The compressive response of a stratified fibrous structure. *Mech. Mater.*, 37 :1132–1142, 2005.
- [50] D.H. Lee and J.K. Lee. Initial Compressional Behaviour of Fibre Assambly. In S. Kawabata, R. Postle, and M. Niwa, editors, *Objective Measurement : Applications to Product Design and Process Control*, pages 613–622. The Textile Machinery Society of Japan, Osaka, 1985.
- [51] G.A. Carnaby and N. Pan. Theory of the Compression Hysteresis of Fibrous Assemblies. *Textile Res. J.*, 59 :275–284, 1989.
- [52] N. Pan and G.A. Carnaby. Theory of the Shear Deformation of Fibrous Assemblies. *Textile Res. J.*, 59 :285–292, 1989.
- [53] T. Komori and M. Itoh. A New Approach to the Theory of the Compression of Fiber Assemblies. *Textile Res. J.*, 61 :420–428, 1991.
- [54] T. Komori and M. Itoh. Theory of the General Deformation of Fiber Assemblies. *Textile Res. J.*, 61 :588–594, 1991.
- [55] T. Komori, M. Itoh, and A. Takaku. A Model Analysis of the Compressibility of Fiber Assemblies. *Textile Res. J.*, 62 :567–574, 1992.
- [56] T. Komori and M. Itoh. Analyzing the Compressibility of a Random Fiber Mass Based on the Modified Theory of Fiber Contact. *Textile Res. J.*, 67 :204–210, 1997.
- [57] D.H. Lee and G.A. Carnaby. Compressional Energy of the Random Fiber Assembly, part I : Theory. *Textile Res. J.*, 62 :185–191, 1992.

- [58] D.H. Lee, G.A. Carnaby, and S.K. Tandon. Compressional Energy of the Random Fiber Assembly, part II : Evaluation. *Textile Res. J.*, 62 :258–265, 1992.
- [59] D. Durville. Numerical simulation of entangled materials mechanical properties. *J. Mat. Sci.*, 40 :5941–5948, 2005.
- [60] W.W. Roberts Jr. and N.B. Beil. Fibrous Assemblies : Modeling/Computer Simulation of Compressional Behavior. *Int. J. Cloth. Sci. Technol.*, 16 :108–118, 2004.
- [61] N.B. Beil and W.W. Roberts Jr. Modeling and Computer Simulation of the Compressional Behavior of Fiber Assemblies, part I : Comparison to van Wyk’s Theory. *Textile Res. J.*, 72 :341–351, 2002.
- [62] N.B. Beil and W.W. Roberts Jr. Modeling and Computer Simulation of the Compressional Behavior of Fiber Assemblies, part II : Hysteresis, Crimp, and Orientation Effects. *Textile Res. J.*, 72 :375–382, 2002.
- [63] B. Ben Boubaker, B. Haussy, and J.F. Ganghoffer. Un modèle discret du couplage entre les fils dans une structure tissée. *C. R. Mécanique*, 331 :295–302, 2003.
- [64] B. Ben Boubaker, B. Haussy, and J.F. Ganghoffer. Discrete woven structure model : yarn-on-yarn friction. *C. R. Mécanique*, 335 :150–158, 2007.
- [65] B. Ben Boubaker, B. Haussy, and J.F. Ganghoffer. Modèles discrets de structure tissées : effet des interactions entre fils. *18<sup>e</sup> Congrès Français de Mécanique, Grenoble, 27-31 août, 2007*.
- [66] J. Wilhelm and E. Frey. Elasticity of Stiff Polymer Networks. *Phys. Rev. Lett.*, 91 :108103, 2003.
- [67] D.A Head, A.J. Levine, and F.C. MacKintosh. Deformation of Cross-Linked Semiflexible Polymer Networks. *Phys. Rev. Lett.*, 91 :108102, 2003.
- [68] P.R. Onck, T. Koeman, T. van Dillen, and E. van der Giessen. Alternative Explanation of Stiffening in Cross-Linked Semiflexible Networks. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :178102, 2005.
- [69] C. Heussinger and E. Frey. Stiff Polymers, Foams and Fiber Networks. *Phys. Rev. Lett.*, 96 :017802, 2006.
- [70] C. Heussinger and E. Frey. The Role of Architecture in the Elastic Response of Semi-flexible Polymer and Fiber Networks. *Phys. Rev. E*, 75 :011917, 2007.
- [71] E.M. Huisman, T. van Dillen, P.R. Onck, and E. Van der Giessen. Three-Dimensional Cross-Linked F-Actin Networks : Relation between Network Architecture and Mechanical Behavior. *Phys. Rev. Lett.*, 99 :208103, 2007.
- [72] B. Mlekusch, E.A. Lehner, and W. Geymayer. Fibre orientation in short-fibre-reinforced thermoplastics I. contrast enhancement for image analysis. *Compos. Sci. Technol.*, 59 :543–545, 1999.
- [73] N.C. Davidson and A.R. Clarke. Extending the dynamic range of fibre length and fibre aspect ratios by automated image analysis. *J. Microsc.*, 296 :266–272, 1999.
- [74] C. Eberhardt, A. Clarke, M. Vincent, T. Giroud, and S. Flouret. Fibre-orientation measurements in short-glass-fibre composites. Part II : a quantitative error estimate of the 2D image analysis technique. *Compos. Sci. Technol.*, 61 :1961–1974, 2001.
- [75] B. Mlekusch, E.A. Lehner, and W. Geymayer. Fibre orientation in short-fibre-reinforced thermoplastics II. quantitative measurements by images analysis. *Compos. Sci. Technol.*, 59 :547–560, 1999.

- [76] R. Blanc, Ch. Germain, P. Baylou, and M. Cataldi. Fiber orientation measurement in composite materials. *Compos. A*, 37 :197–206, 2006.
- [77] B. Xu and L. Yu. Determining Fiber Orientation Distribution in Nonwovens with Hough Transform Techniques. *Textile Res. J.*, 67 :563–571, 1997.
- [78] S. Teyssier, S. Bres, B. Ohl, and G. Merle. Global Analysis of Orientation in BMC and Relation with Mechanical Properties. *International Conference on Composites Materials : ICCM-14, San Diego*, 2003.
- [79] R.H. Gong and A. Newton. Image-analysis Techniques Part II : The Measurement of Fibre Orientation in Nonwoven Fabrics. *J. Textile Inst.*, 87 :371–388, 1996.
- [80] B. Pourdeyhimi, R. Dent, A. Jerbi, S. Tanaka, and A. Deshpande. Measuring Fiber Orientation in Nonwovens Part V : Real Webs. *Textile Res. J.*, 69 :185–192, 1990.
- [81] H. Talbot, T. Lee, D. Jeulin, D. Hantons, and L.W. Hobbs. Image analysis of insulation mineral fibres. *J. Microsc.*, 200 :251–268, 2000.
- [82] J.J. McGrath and J.M. Wille. Determination of 3D Fiber Orientation Distribution in Thermoplastic Injection Molding. *Compos. Sci. Technol.*, 53 :133–143, 1995.
- [83] J.J. McGrath and J.M. Wille. System for Automated Analysis of 3D Fiber Orientation in Short Fiber Composites. *U.S. Pat.*, 5841892, 1998.
- [84] A.R. Clarke, G. Archenhold, and N.C. Davidson. A Novel Technique for Determining the 3D Spatial Distribution of Glass Fibers in Polymer Composites. *Compos. Sci. Technol.*, 55 :75–91, 1995.
- [85] A.R. Clarke and C. Eberhardt. The representation of reinforcing fibres in composites as 3D space curves. *Compos. Sci. Technol.*, 59 :1227–1237, 1999.
- [86] C. Eberhardt and A. Clarke. Fibre-orientation measurements in short-glass-fibre composites. Part I : automated, high-angular-resolution measurement by confocal microscopy. *Compos. Sci. Technol.*, 61 :1389–1400, 2001.
- [87] M. Faessel, C. Délisée, F. Bos, and P. Casténa. 3D Modelling of random cellulosic fibrous networks based on X-ray tomography and image analysis. *Compos. Sci. Technol.*, 65 :1931–1940, 2005.
- [88] J. Lux, A. Ahmadi, C. Gobbé, and C. Delisée. Macroscopic thermal properties of real fibrous materials : Volume averaging method and 3D image analysis. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 49 :1958–1973, 2006.
- [89] J.A. Åström, J. Timonen, M. Myllys, J. Fellman, and J. LeBell. Random networks of fibres display maximal heterogeneity in the distribution of elastic energy. *Eur. Phys. J. E*, 22 :61–67, 2007.
- [90] S. Rolland du Roscoat. *Contribution à la quantification 3D de réseaux fibreux par microtomographie au rayonnement synchrotron. Application au papiers*. PhD thesis, INP Grenoble, 2007.
- [91] H. Yang and B.W. Lindquist. Three-dimensional Image Analysis of Fibrous Materials. *Appl. Digit. Image Process. XXIII, Proc. SPIE*, 4115 :275–282, 2000.
- [92] C.N. Eberhardt and A.R. Clarke. Automated reconstruction of curvilinear fibres from 3D datasets acquired by X-ray microtomography. *J. Microsc.*, 206 :41–53, 2001.
- [93] J. Lux, C. Delisée, and X. Thibault. 3D Characterization of Wood Based Fibrous Materials : an Application. *Image Anal. Stereol.*, 25 :25–35, 2006.

- [94] T.W. Clyne, A.E. Markaki, and J.C. Tan. Mechanical and magnetic properties of metal fibre networks, with and without a polymeric matrix. *Compos. Sci. Technol.*, 65 :2492–2499, 2005.
- [95] J.C. Tan, J.A. Elliott, and T.W. Clyne. Analysis of Tomography Images of Bonded Fibre Networks to Measure Distributions of Fiber Segment Length and Fibre Orientation. *Adv. Eng. Mater.*, 8 :495–500, 2006.
- [96] K.L. Johnson. *Contact Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge, England, 1985.
- [97] S. Kumar and R.G. Larson. Brownian dynamics simulations of flexible polymers with spring-spring repulsion. *J. Chem. Phys.*, 114 :6937–6941, 2001.
- [98] M.P. Allen and D.J. Tildsley. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, New York, 1987.
- [99] A.W. Lees and S.F. Edwards. The computer study of transport processes under extreme conditions. *J. Phys. C : Solid State Phys.*, 5 :1921–1929, 1972.
- [100] C.F. Schmid, L.S. Switzer, and D.J. Klingenberg. Simulations of fiber flocculation : Effects of fiber properties and interfiber friction. *J. Rheol.*, 44 :781–809, 2000.
- [101] L.H. Switzer and D.J. Klingenberg. Flocculation in simulations of sheared fiber suspensions. *Int. J. Multiph. Flow*, 30 :67–87, 2004.



## **Modélisation numérique du comportement mécanique de systèmes enchevêtrés**

Résumé :

Un **modèle numérique** basé sur des techniques de **dynamique moléculaire** a été développé pour étudier le **comportement mécanique d'ensembles de fibres enchevêtrées**. Pour limiter le nombre de degrés de liberté, les fibres sont discrétisées en une suite de segments. Le modèle permet de prendre en compte des paramètres géométriques (fraction volumique, facteur de forme, distribution d'orientation...) et des paramètres « matériaux » (flexibilité, frottement aux contacts...). Les comportements macroscopiques d'ensembles de fibres orientées aléatoirement ont été identifiés en fonction de ces paramètres, enrichissant ainsi les lois d'échelles simples de la littérature. Des informations microscopiques telles que l'évolution du nombre de contacts en fonction des sollicitations (compression isostatique, cisaillement) ont également pu être obtenues numériquement. Ceci a notamment permis de valider des techniques d'analyse d'image, ensuite appliquées à des **images de tomographie aux rayons X** de laines d'acier.

Mots clés :

comportement mécanique, systèmes enchevêtrés, modélisation discrète

---

## **Numerical Modeling of the Mechanical Behavior of Entangled Materials**

Abstract:

We employ a **discrete simulation** adapted from **molecular dynamics techniques** in order to study the **mechanics of entangled semiflexible fibers**. Each fiber is discretized by a small number of segments allowed to stretch and bend. A few hundred fibers, initially straight and placed and oriented at random are simulated during incremental compressions in the three directions of space or incremental shear. This model can take into account geometrical parameters (volume fraction, aspect ratio, orientation distribution...) as well as “material” parameters (flexibility, nature of contacts...). This model is also employed to generate samples used to validate **image analysis techniques**.

Key words:

mechanical behavior, entangled materials, discrete modeling