



HAL
open science

Modélisation par la méthode Lattice Boltzmann de la diffusion de chaleur et d'humidité dans des matériaux biosourcés à partir de leur morphologie 3D

Mathilde Louërat

► **To cite this version:**

Mathilde Louërat. Modélisation par la méthode Lattice Boltzmann de la diffusion de chaleur et d'humidité dans des matériaux biosourcés à partir de leur morphologie 3D. Autre. Université Paris Saclay (COMUE), 2017. Français. NNT: 2017SACLC006 . tel-01503024

HAL Id: tel-01503024

<https://theses.hal.science/tel-01503024v1>

Submitted on 6 Apr 2017

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.

NNT : 2017SACLC006

THÈSE DE DOCTORAT
DE L'UNIVERSITÉ PARIS-SACLAY
PRÉPARÉE À CENTRALESUPÉLEC

École doctorale n°579

Sciences mécaniques et énergétiques, matériaux et géosciences
Spécialité de doctorat : Science des matériaux

par

MME MATHILDE LOUËRAT

Modélisation par la méthode Lattice Boltzmann de la diffusion de
chaleur et d'humidité dans des matériaux biosourcés à partir de
leur morphologie 3D

Thèse présentée et soutenue à Châtenay-Malabry, le 19 janvier 2017.

Composition du Jury :

Mme	SABINE CARÉ	Directeur de recherche Ifsttar	(Présidente du jury)
Mme	DOMINIQUE BAILLIS-DOERMANN	Professeur INSA Lyon	(Rapporteur)
M.	ROMAIN RÉMOND	Maître de conférences Université de Lorraine	(Rapporteur)
M.	RACHID BENNACER	Professeur ENS Paris-Saclay	(Examineur)
M.	PATRICK PERRÉ	Professeur CentraleSupélec	(Directeur de thèse)
M.	MEHDI AYOZ	Maître de conférences CentraleSupélec	(Co-encadrant de thèse)

Remerciements

Pour commencer ce manuscrit, quelques remerciements aux personnes qui, de près ou de loin, humainement ou scientifiquement, m'ont permis de mener à bien ce travail.

Je remercie tout d'abord Patrick PERRÉ, mon directeur de thèse, de m'avoir accueillie dans son laboratoire et de m'avoir guidée pendant ces trois années grâce à ses remarques et ses conseils avisés. Merci aussi pour la confiance que vous m'avez accordée lors de la rédaction du manuscrit et pour la promptitude de vos corrections !

Je remercie également Mehdi AYOZ, mon encadrant de thèse, pour sa grande disponibilité pendant ces trois années et particulièrement lors de la préparation de la soutenance.

Je tiens à adresser mes sincères remerciements à l'ensemble des membres du jury : Sabine CARÉ pour avoir présidé ce jury (et pour l'organisation des GDR Bois auxquels j'ai participé avec beaucoup d'intérêt et de plaisir), Dominique BAILLIS-DOERMANN et Romain RÉMOND pour avoir accepté d'être les rapporteurs de ce manuscrit et pour le temps consacré à son examen et Rachid BENNACER pour son implication en qualité d'examineur et pour sa bienveillance.

Je remercie chaleureusement les membres du LGPM qui ont participé au bon déroulement de cette thèse et avec lesquels j'ai passé d'excellents moments de convivialité. Merci à Nathalie pour les premiers tests d'images avec le MEB, à Cyril pour les images faites au microscope confocal, à Joel et Jean pour la préparation des échantillons, à Pin pour la gestion des images 3D et à Floran et Julien pour m'avoir apporté leur expérience en tant qu'anciens doctorants de Patrick et pour leur aide sur le bois et les panneaux de fibres. Je remercie également Erika JEAN-BART du Laboratoire EM2C pour son aide précieuse pour la découpe laser. Merci aussi à Jamila pour les mots fléchés, à Carole pour les « Bonjour Marie ! », à Quentin pour les ravitaillements en fromages et à Catherine pour les pauses déjeuner du vendredi ! Un grand merci aux doctorants pour les bons moments passés ensemble autour des déjeuners de 11h30 et des pauses café de 16h, et en particulier à Aude pour nos discussions et nos engagements complémentaires auprès des doctorants, à Huan pour nos échanges complices et remotivants, à Marietta pour les apéros et la musique et à Arnaud pour les rencontres inattendues en soirée fanfare !

Je ne remercierai jamais assez Magali qui a été d'une grande aide tout au long de la thèse et sur des sujets très variés : coaching, assistance sur pingouin, mercure, catwoman et joker (!), développement asymptotique, répétition de soutenance...

Un grand merci à Julien et François qui ont rendu ma mission complémentaire très (trop?!) intéressante. L'enseignement et le montage de l'option ont été des expériences très formatrices et stimulantes. J'ai adoré travailler avec vous et ai énormément appris à vos côtés!

Je remercie du fond du cœur Catherine LHOPITAL et Benoît GOYEAU qui font de l'ED SMEMAG une ED où il fait très bon être doctorant! Catherine, merci pour ton soutien administratif et ta gentillesse. Benoît, merci pour la confiance que vous portez aux doctorants, pour votre aide et pour nos agréables conversations.

Merci à ceux qui m'ont permis de décompresser en dehors du labo par leur bonne humeur et leur enthousiasme. Je pense évidemment à mes fidèles amis du 15ème (rencontrés au fil des ans, de la maternelle au master), aux fanfarons de la Brass de Pneu et à mes chers coloc Baladoo et Hébinvoilà. Un merci particulier à Raphaël pour sa présence, sa correction (critique bien sûr!) du chapitre 4 et ses qualités de cuistot.

Un immense merci à ma famille pour leur soutien sans faille, leurs conseils éclairés, leur aide logistique et pour nos conversations animées, autour d'un bon repas naturellement!

Table des matières

Liste des symboles	7
1 Introduction	11
2 Contexte et problématique	15
2.1 Le secteur du bâtiment et les matériaux biosourcés	16
2.2 Le bois et les panneaux de fibres	20
2.2.1 L’anatomie du bois	20
2.2.2 Le bois, un matériau hygroscopique	22
2.2.3 Les panneaux de fibres	24
2.3 Propriétés équivalentes de matériaux biosourcés	24
2.4 Le changement d’échelle	26
2.5 La micro-tomographie et ses usages	31
2.5.1 Principe de la micro-tomographie aux rayons X	31
2.5.2 La micro-tomographie pour les matériaux biosourcés	35
2.6 Calcul de propriétés équivalentes par la méthode LB	37
2.7 Conclusion du chapitre	39
3 Imagerie par micro-tomographie et traitement d’images	41
3.1 Préparation des échantillons	42
3.2 Micro-tomographie aux rayons X	45
3.3 Traitement d’images	46
3.4 Volumes sélectionnés	48
3.5 Conclusion du chapitre	55
4 Théorie : la méthode Lattice Boltzmann	57
4.1 Les différentes échelles de description d’un système	58
4.2 Principe général de la méthode	59
4.2.1 Origine de la méthode	59
4.2.2 Description discrète du milieu et schémas de vitesse	59
4.2.3 Équation de Boltzmann discrète et approximation BGK	61
4.3 Modélisation de l’équation de la diffusion par la LBM	62
4.4 Relation entre échelles macroscopique et mésoscopique	63

4.5	Conditions aux limites	64
4.5.1	Fonctions de distribution inconnues aux limites	65
4.5.2	Conditions aux limites de Dirichlet	65
4.5.3	Conditions aux limites de Neumann	67
4.5.4	Cas des coins	69
4.6	Conclusion du chapitre	69
5	Développement d'un code Lattice Boltzmann optimisé	71
5.1	Développement d'un code LB hétérogène	73
5.1.1	Implémentation d'un milieu hétérogène	73
5.1.2	Implémentation des étapes de collision et de propagation	74
5.2	Conditions aux limites implémentées dans le code	75
5.2.1	Conditions aux limites de Dirichlet	75
5.2.2	Conditions aux limites de Neumann	77
5.2.3	Cas des coins	80
5.3	Calcul de propriétés équivalentes et validation du code	82
5.3.1	Homogénéisation : calcul de propriétés équivalentes	82
5.3.2	Validation du code sur des milieux série et parallèle	82
5.3.3	Comparaison des schémas D_2Q_5 et D_2Q_9	83
5.4	Influence de la résolution du réseau et du facteur de relaxation	84
5.4.1	Détermination d'une valeur de référence avec <i>Comsol</i>	84
5.4.2	Résultats obtenus avec la méthode LB	86
5.4.3	Comparaison des schémas D_2Q_5 et D_2Q_9	88
5.5	Critère de convergence	90
5.6	Réduction du temps de calcul	92
5.6.1	Parallélisation du code en <i>OpenMP</i>	92
5.6.2	Utilisation de facteurs de relaxation successifs	95
5.7	Conclusion du chapitre	96
6	Calcul de propriétés équivalentes de matériaux biosourcés	99
6.1	Développement du code 3D	100
6.1.1	Conditions aux limites	100
6.1.2	Propriétés des phases du milieu hétérogène	102
6.2	Étude sur la représentativité des volumes sélectionnés	103
6.3	Propriétés équivalentes d'épicéa	104
6.4	Propriétés équivalentes de panneaux de fibres	106
6.5	Analyse des résultats	110
6.5.1	Diffusion thermique	110
6.5.2	Diffusion massique	113
6.5.3	Familles de morphologies	116
6.6	Conclusion du chapitre	118

7 Conclusion	119
Bibliographie	123
Table des Figures	133
Table des Tableaux	139
A Développement de Chapman-Enskog	141
A.0.1 Le modèle Lattice Boltzmann pour la diffusion	141
A.0.2 Analyse de Chapman-Enskog	141
A.0.3 Utilisation du schéma D_2Q_5	144

Liste des symboles

Lettres grecques

$\delta\vec{x}$	vecteur déplacement
α	coefficient de diffusion
Γ	propriété λ ou D^*
$\Delta F/F$	critère de convergence
δt	pas de temps
δx	pas d'espace dans la direction x
δy	pas d'espace dans la direction y
δz	pas d'espace dans la direction z
ϵ_Γ	erreur sur le calcul de la propriété équivalente
ϵ_s	fraction solide
θ	température
λ	conductivité thermique
μ	facteur de la loi de mélange
ρ	masse volumique
τ	temps de relaxation
Φ	flux dimensionné associé au scalaire Ψ
ϕ	flux adimensionné associé au scalaire Ψ
Ψ	scalaire normalisé représenté par les fonctions de distribution
Ψ_0	scalaire imposé à la frontière $x = 0$
Ψ_L	scalaire imposé à la frontière $x = L_x$
Ψ_{init}	scalaire imposé initialement
Ω	opérateur de collision

- ω facteur de relaxation
 ω_{max} ω associé au plus petit α
 ω_{min} ω associé au plus grand α

Lettres latines

- \vec{e}_k vecteur unitaire dans la direction k
 \vec{n} vecteur normal au plan considéré
 \vec{x} vecteur position
 a facteur dépendant du schéma de vitesse
 c vitesse des particules sur le réseau
 c_p chaleur spécifique massique
 D^* diffusivité massique adimensionnée
 f fonction de distribution
 L taille du domaine
 M nombre de vitesses du schéma
 m nombre de nœuds dans la direction x
 N dimension du problème
 n nombre de nœuds dans la direction y
 p nombre de nœuds dans la direction z
 t temps
 w_k pondération de la fonction d'équilibre dans la direction k
 X teneur en eau
 x variable d'espace (1D, 2D, 3D)
 y variable d'espace (2D, 3D)
 z variable d'espace (3D)

Indices

- ∞ relatif au régime permanent
 μ relatif au facteur de la loi de mélange
 \parallel relatif au modèle parallèle
 \perp relatif au modèle série

eq	relatif à une propriété équivalente
g	relatif à la phase gazeuse
k	relatif à la direction de propagation
L	relatif à la direction longitudinale
p	relatif à la moyenne des deux directions dans le plan du panneau
p_1	relatif à l'une des directions dans le plan du panneau
p_2	relatif à l'autre direction dans le plan du panneau
R	relatif à la direction radiale
s	relatif à la phase solide
T	relatif à la direction tangentielle
t	relatif à la direction transversale au panneau
x	relatif à la direction x
y	relatif à la direction y
z	relatif à la direction z

Exposants

eq	relatif à l'équilibre
------	-----------------------

Chapitre 1

Introduction

Pour améliorer la performance thermique des bâtiments et réduire leur impact environnemental, des codes de simulation thermique dynamique sont utilisés pendant la phase de conception d'un bâtiment. Les incertitudes sur les paramètres d'entrée de ces simulations, tels que les propriétés des matériaux de construction, entraînent inévitablement des incertitudes sur leurs résultats [Spitz *et al.*, 2012]. Le poids relatif de ces incertitudes augmente puisque les réglementations thermiques sont de plus en plus exigeantes, diminuant au fur et à mesure la consommation énergétique maximale d'un bâtiment. La fiabilité des consommations prédites est donc un enjeu important pour le secteur de la construction et nécessite une meilleure connaissance des matériaux employés.

En outre, l'utilisation de matériaux biosourcés augmente dans le bâtiment car ils sont d'origine renouvelable et possèdent généralement de bonnes propriétés d'isolation. Comme ce sont des matériaux hygroscopiques (ce qui signifie que leur teneur en eau s'équilibre avec l'air humide ambiant), comprendre leur comportement hygrothermique est nécessaire pour une conception de bâtiment satisfaisante. Durant la dernière décennie, il est ainsi devenu évident que les codes de thermique du bâtiment devaient prendre en compte les transferts couplés de chaleur et de masse pour à la fois améliorer leur fiabilité et intégrer les matériaux biosourcés [Woloszyn et Rode, 2008, Delgado *et al.*, 2010].

Par conséquent, une caractérisation précise des matériaux de construction quant aux transferts de chaleur et de masse est cruciale, particulièrement pour les matériaux biosourcés [Glass, 2007, Lelievre *et al.*, 2014]. La conductivité thermique et la diffusivité massique équivalentes des matériaux sont parmi les propriétés que les ingénieurs ont besoin de connaître pour prédire la consommation d'énergie des bâtiments. Cela passe généralement par la caractérisation expérimentale, longue et coûteuse. La microstructure est pourtant capable d'expliquer le comportement macroscopique, avec une précision qui augmente grâce aux progrès des outils d'imagerie 3D et de calcul intensif.

Dans ce travail de thèse, on cherche donc à développer une méthode pré-

dictive pour connaître les propriétés macroscopiques de diffusion de matériaux biosourcés (bois et panneaux de fibres) à partir leur morphologie. La tomographie permet une description non destructive de la structure interne d'un matériau. Cette technique étant également sans contact, elle permet de ne pas modifier la microstructure de réseaux fibreux par la découpe. Plus particulièrement, la microtomographie synchrotron aux rayons X apparaît comme un outil très performant pour la caractérisation micro-structurale des matériaux à base de fibres végétales [Perré, 2011, Malmberg *et al.*, 2011]. Cependant, utiliser une telle description 3D à haute résolution implique une grande quantité d'information et des formes géométriques complexes. Des méthodes numériques adéquates sont alors nécessaires pour prédire des propriétés macroscopiques équivalentes.

Pour les écoulements ou les transferts diffusifs, la méthode Lattice Boltzmann (méthode LB ou LBM) [Succi, 2001] présente une grande flexibilité en matière de représentation de morphologies complexes. Elle repose sur une description discrète du milieu (le réseau, *lattice* en anglais) et un ensemble de vitesses, également discrètes, permettant de représenter les transferts. L'algorithme est explicite, chaque pas de temps comportant une phase de propagation et une phase de collision, le tout permettant de retrouver le comportement macroscopique souhaité. Cette méthode est bien établie et la modélisation des transferts diffusifs est éprouvée [Mohammad, 2007]. Sa capacité à prédire les propriétés physiques équivalentes de matériaux hétérogènes ayant des structures complexes et variées a également été démontrée [Wang et Pan, 2008]. La LBM appartient à la famille des méthodes sans maillage [Belytschko *et al.*, 1996, Frank et Perré, 2010] et présente une formulation locale. Vu ces caractéristiques, la méthode LB présente plusieurs avantages : un développement numérique simple, une adaptabilité au calcul parallèle et une gestion des morphologies complexes facilitée.

Ce travail de thèse propose de coupler la méthode Lattice Boltzmann à la micro-tomographie afin de prédire les propriétés macroscopiques de matériaux biosourcés à partir de leur morphologie réelle 3D. Les matériaux étudiés sont l'épicéa (bois initial et bois final) et des panneaux de fibres de bois de densités faible (LDF) et moyenne (MDF). Comme ils sont hétérogènes et anisotropes, leurs conductivités thermiques et diffusivités massiques équivalentes sont calculées dans trois directions orthogonales.

Les principales contributions de ce travail de thèse sont résumées ci-dessous.

Imagerie par micro-tomographie et traitement d'images

Nous développons une méthodologie pour définir des morphologies 3D numériques pouvant être couplées à un code Lattice Boltzmann. Pour cela, nous préparons des échantillons par usinage au tour à métaux et découpe laser et obtenons la morphologie réelle 3D des matériaux étudiés par micro-tomographie aux rayons X. Un traitement d'images permet de segmenter la phase solide et la phase gazeuse.

Développement d'un code Lattice Boltzmann 3D parallèle et optimisé

Nous implémentons un code Lattice Boltzmann 3D parallélisé en *OpenMP*. Différents paramètres de la méthode sont étudiés pour obtenir un bon compromis entre précision des résultats et temps de calcul. En plus de la parallélisation, nous développons une méthode originale pour diminuer le temps de calcul en utilisant des facteurs de relaxation successifs ainsi qu'un test objectif d'arrêt du calcul.

Détermination de conductivités thermiques et diffusivités massiques équivalentes de bois et de panneaux de fibres

Les diffusions de chaleur et de masse sont simulées dans trois directions orthogonales pour chaque matériau. Les conductivités thermiques et diffusivités massiques équivalentes peuvent alors être calculées par homogénéisation. Les résultats mettent en évidence l'influence de la structure interne et la forte anisotropie des matériaux étudiés. En outre, les morphologies de panneaux de fibres sont caractérisées par une variable synthétique.

Le manuscrit est organisé en cinq chapitres principaux comme décrit ci-dessous.

Dans le chapitre 2, on présente en détail le contexte dans lequel s'inscrit ce travail de thèse et les motivations de l'étude. La problématique est définie : caractériser les propriétés macroscopiques de matériaux biosourcés utilisés dans le bâtiment à partir de leur morphologie réelle. On donne alors un aperçu de l'état de l'art relatif à cette problématique en détaillant le principe et les usages de la tomographie aux rayons X et en montrant que la méthode LB est un outil adéquat pour le calcul de propriétés de diffusion équivalentes.

Dans le chapitre 3, on décrit la préparation des échantillons d'épicéa et de panneaux de fibres et on expose les images obtenues par micro-tomographie. On explique ensuite le traitement d'images réalisé. Enfin, on présente les volumes sélectionnés qui serviront à calculer les propriétés équivalentes dans le chapitre 6.

Dans le chapitre 4, on expose les aspects théoriques de la méthode Lattice Boltzmann. Pour cela, on présente les différentes échelles de description d'un système pour situer la LBM parmi les autres méthodes numériques. On explique ensuite son principe général et son utilisation pour modéliser la diffusion. Enfin, on examine différentes façons d'implémenter des conditions aux limites.

Dans le chapitre 5, on explique comment on a implémenté notre code : choix des conditions aux limites, calcul de propriétés équivalentes, définition d'un critère de convergence et méthodologie pour réduire le temps de calcul par la parallélisation et le recours à des facteurs de relaxation successifs. Nous validons le

code et étudions également l'influence de la résolution du réseau et du facteur de relaxation sur la précision des résultats.

Dans le chapitre 6, on présente les résultats de diffusion thermique et massique obtenus avec la méthode LB sur les morphologies d'épicéa et de panneaux de fibres définies au chapitre 3. Les conductivités thermiques et diffusivités massiques équivalentes sont calculées dans trois directions orthogonales pour chaque morphologie. Pour un même matériau, on compare les résultats selon les directions et selon le type de diffusion (thermique ou massique). On analyse également les résultats entre les différents matériaux pour mettre en évidence le lien entre la structure d'un matériau et ses propriétés de diffusion. Enfin, on identifie des familles de morphologies, décrites par un unique paramètre.

Chapitre 2

Contexte et problématique

Dans ce chapitre, nous présentons le contexte du travail de thèse ce qui conduit à définir une problématique et à examiner la littérature relative à notre étude. Dans la partie 2.1, nous exposons d’abord le contexte, à savoir la diminution des consommations d’énergie dans le bâtiment qui s’appuie sur des logiciels de simulation. L’augmentation de l’utilisation des matériaux biosourcés est également abordée. Ensuite, dans la partie 2.2, nous présentons les caractéristiques des matériaux étudiés (bois et panneaux de fibres). Nous exposons alors, dans la partie 2.3, plusieurs études réalisées pour calculer ou mesurer des propriétés macroscopiques de tels matériaux. Pour les méthodes numériques, le changement d’échelle permet de déterminer des propriétés équivalentes de matériaux hétérogènes. Son principe est examiné dans la partie 2.4. Dans la partie 2.5, nous expliquons le principe de la micro-tomographie aux rayons X et montrons que c’est une technique d’imagerie éprouvée pour caractériser des matériaux à base de bois. Enfin, la partie 2.6 détaille différents usages de la méthode Lattice Boltzmann pour calculer des propriétés équivalentes de matériaux hétérogènes.

Sommaire

2.1	Le secteur du bâtiment et les matériaux biosourcés .	16
2.2	Le bois et les panneaux de fibres	20
2.2.1	L’anatomie du bois	20
2.2.2	Le bois, un matériau hygroscopique	22
2.2.3	Les panneaux de fibres	24
2.3	Propriétés équivalentes de matériaux biosourcés . . .	24
2.4	Le changement d’échelle	26
2.5	La micro-tomographie et ses usages	31
2.5.1	Principe de la micro-tomographie aux rayons X	31
2.5.2	La micro-tomographie pour les matériaux biosourcés .	35
2.6	Calcul de propriétés équivalentes par la méthode LB	37
2.7	Conclusion du chapitre	39

2.1 Le secteur du bâtiment et les matériaux biosourcés

Avec 45 % des consommations d'énergie, le bâtiment est le secteur le plus énergivore en France comme le montre la figure 2.1. Il émet aussi 22 % des émissions nationales de CO₂ [Ademe, 2013]. Ces chiffres concernent seulement les consommations dues à l'exploitation des bâtiments (immeubles, maisons, bureaux...). L'énergie consommée lors des phases de chantier et de démolition n'est pas comptabilisée. Les dépenses énergétiques dues à la fabrication des matériaux sont par exemple attribuées au secteur de l'industrie. Le poste le plus consommateur d'énergie est le chauffage, il représente 61 % des consommations d'énergie dans le secteur résidentiel [Ademe, 2013]. Les consommations peuvent être réduites en agissant sur différents aspects : double vitrage, isolation, ventilation performante, systèmes de chauffage à haut rendement, apports solaires favorisés, etc.

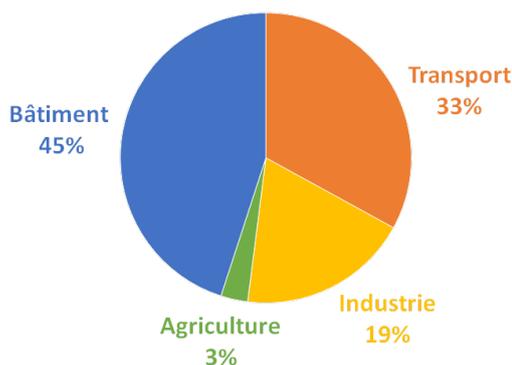


FIGURE 2.1 – Consommation d'énergie en France par secteur d'activité en 2014. Figure tracée d'après [SOeS, 2016].

Pour construire des bâtiments économes en énergie, la phase de conception est désormais primordiale. Les bureaux d'étude thermique estiment, lors de la conception d'un bâtiment, ses consommations d'énergie, elles doivent être inférieures à la norme fixée par la réglementation thermique en vigueur. Ces réglementations thermiques sont de plus en plus ambitieuses et la consommation maximale à respecter (pour le chauffage, la ventilation, la climatisation, la production d'eau chaude sanitaire et l'éclairage) est donc de plus en plus faible [EDF, 2015, CSTB, 2016]. À la suite du premier choc pétrolier de 1973, une réglementation thermique est adoptée en 1974 (RT 1974), elle impose une isolation des parois et une régulation des systèmes de chauffage pour les bâtiments neufs d'habitation uniquement. On estime la consommation de chauffage à 300 kWhEP/(m².an) jusqu'en 1974,

l'objectif de la première RT est d'atteindre 225 kWhEP/(m².an). Avec le second choc pétrolier de 1979, la RT 1982 fixe un nouvel objectif de 20 % de réduction de la consommation énergétique par rapport à la RT 1974, soit 170 kWhEP/(m².an). La RT 1988 impose ensuite des réductions d'énergie aux bâtiments neufs résidentiels et non-résidentiels. Une nouvelle ambition de réduction de la consommation de 20 % pour les logements (130 kWhEP/(m².an)) et de 40 % pour les bâtiments tertiaires est fixée par la RT 2000. Puis la RT 2005 introduit une limite supérieure de consommation pour les bâtiments qui dépend notamment du type de chauffage et du climat. L'objectif est une amélioration de 15 % de la performance par rapport à la réglementation précédente. Depuis 2007 la réglementation thermique française fixe également des normes pour la rénovation des bâtiments. La RT 2012 a pour objectif de limiter la consommation d'énergie primaire des bâtiments neufs à un maximum de 50 kWhEP/(m².an) en moyenne. Pour chaque bâtiment, cette valeur est modulée selon plusieurs critères tels que la localisation géographique ou l'altitude. Enfin, la RT 2020 introduira le concept de bâtiment à énergie positive (bâtiment qui produit plus d'énergie qu'il n'en consomme pour son fonctionnement sur une période lissée d'un an).

Les estimations de consommation sont réalisées à partir de logiciels de simulation thermique dynamique qui intègrent notamment des données sur les matériaux de construction : masse volumique, conductivité thermique, épaisseur, etc. Les résultats des simulations dépendent évidemment énormément de ces données [Spitz *et al.*, 2012]. Il est donc important de fournir aux ingénieurs les données les plus précises possibles, et cela d'autant plus que le poids relatif des erreurs augmente puisque les consommations maximales fixées par la réglementation sont en perpétuelle décroissance.

Le comportement hygrothermique de l'enveloppe d'un bâtiment a également un effet important sur l'ensemble de ses performances. Ainsi Kunzel *et al.* [Künzel *et al.*, 2005] ont couplé des outils de simulation de transferts de chaleur et d'humidité dans l'enveloppe du bâtiment et des outils de simulation du comportement global du bâtiment pour calculer les consommations d'énergie. Ils mettent l'accent sur la nécessité de paramètres hygrothermiques appropriés pour les matériaux de construction. La figure 2.2 montre une différence significative entre l'humidité relative intérieure mesurée et simulée dans une pièce recouverte de panneaux de bois. Ce résultat signifie que les propriétés hygrothermiques du bois utilisées pour les simulations (déterminées par des tests en laboratoire en régime permanent) ne représentent pas la diffusion transitoire et les caractéristiques d'absorption des panneaux.

Par ailleurs, pour réduire l'impact environnemental d'un bâtiment tout en limitant ses besoins en énergie, le recours à des matériaux biosourcés – notamment le bois – apparaît nécessaire comme le montrent plusieurs études. Celles-ci se basent souvent sur l'analyse de cycle de vie (ACV), outil permettant d'analyser les impacts environnementaux d'un produit depuis sa production jusqu'à sa fin

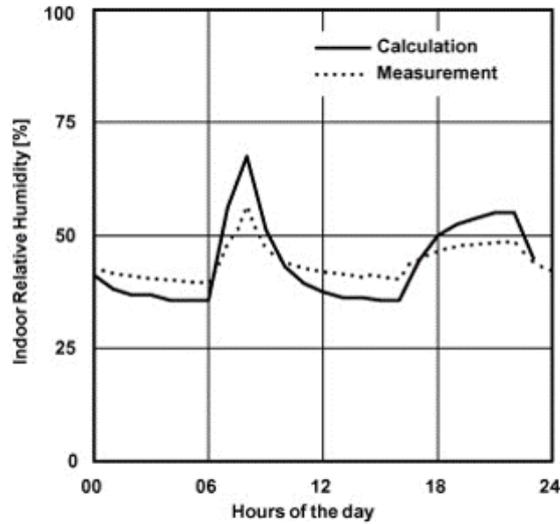


FIGURE 2.2 – Évolution de l’humidité de l’air intérieur simulée et mesurée lors d’un cycle diurne dans une pièce test dont les murs et le plafond sont recouverts de panneaux de bois [Künzel *et al.*, 2005].

de vie en passant par les phases de transport et d’utilisation. Buchanan et Levine [Buchanan et Levine, 1999] ont montré que les bâtiments en bois requéraient moins d’énergie à la fabrication et impliquaient de plus faibles émissions de dioxyde de carbone que les bâtiments construits avec d’autres matériaux (brique, aluminium, acier et béton). Une partie de ces résultats est donnée dans le tableau 2.1 où les deux premières colonnes indiquent l’énergie nécessaire à la fabrication des matériaux pour chaque type de bâtiment. Les quantités de carbone émis et stocké sont renseignées dans les colonnes 3 et 4. En outre, malgré la plus grande inertie thermique du béton, l’ACV d’un bâtiment en bois est meilleure que celle en béton car l’énergie utilisée lors de la production des matériaux est plus faible et que la valorisation en bioénergie en fin de vie est meilleure [Dodoo *et al.*, 2012]. Les résultats de cette étude sont présentés dans le tableau 2.2. Selon Lawrence [Lawrence, 2014], l’utilisation de matériaux de construction biosourcés peut réduire significativement l’impact environnemental de la construction (matériaux renouvelables, stockage de CO_2 , meilleure ACV, ...). Les matériaux de construction d’origine végétale sont en effet considérés comme des « puits » de CO_2 : pendant leur croissance, ils stockent du CO_2 par photosynthèse et ne le libéreront qu’en fin de vie, plusieurs décennies plus tard.

Concernant l’isolation des bâtiments, deux catégories de matériaux peuvent être utilisées : les isolants issus de la pétrochimie ou minéraux (laine de verre, laine de roche, polystyrène, etc.) et les isolants biosourcés, d’origine végétale ou animale (laine de bois, paille, chanvre, laine de mouton, plumes, etc.). Les propriétés d’isolation de ces deux familles de matériaux sont équivalentes (conductivité thermique d’environ $0,04 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ [Cripps, 2004]) et permettent d’obtenir des

Material	Energy		Carbon		Wood Transfer ratio (m ³ /m ²)	Displacement factor
	(1983) GJ/m ²	(1996) GJ/m ²	Released (kgC/m ²)	Stored (kgC/m ²)		
Hostel						
Concrete	3.7	3.2	64	10	0.04	Concrete to wood 1.05
Wood	2.7	2.1	42	31	0.12	
Office						
Concrete	5.6	4.7	94	5	0.02	Concrete to wood 1.1
Steel	6.6	4.8	96	5	0.02	
Wood	3.7	3.0	60	35	0.14	
Industry						
Steel	3.2	2.1	42	2	0.008	Steel to wood 1.6
Wood	1.8	1.4	28	11	0.04	
House						
(a) High energy	5.9	4.7	94	9	0.04	(a) to (c)
(b) Low cost	4.2	3.4	68	19	0.08	2.1
(c) Low energy	2.5	1.7	34	37	0.15	(d) to (c)
(d) Typical	5.1	3.9	78	34	0.14	15
Column	1	2	3	4	5	6

TABLE 2.1 – Énergie nécessaire à la fabrication, carbone émis et stocké et part de bois de bâtiments fabriqués avec différents matériaux [Buchanan et Levine, 1999].

Description	Reference		Current code		Passive standard	
	Concrete frame	Wood frame	Concrete frame	Wood frame	Concrete frame	Wood frame
<i>Production energy use</i>						
Material production	757	579	803	644	806	656
On-site construction	100	50	106	57	107	58
Total	857	629	909	701	913	714
<i>Operation energy use</i>						
Space heating	2268	2290	794	808	489	501
Ventilation electricity	605	605	1272	1272	1272	1272
Tap water heating	829	829	497	497	497	497
Household electricity	6684	6684	6684	6684	6684	6684
Total	10,386	10,407	9247	9261	8942	8954
<i>End-of-life energy use</i>						
Demolition	10	5	11	6	11	6
Total energy use over life cycle	11,253	11,041	10,167	9968	9866	9674
Production biomass residues	-208	-345	-211	-389	-211	-400
<i>End-of-life recycling and recovery</i>						
Concrete recycling	-19	-3	-19	-3	-19	-3
Steel recycling	-96	-60	-96	-60	-96	-60
Wood recovery for bioenergy	-214	-305	-214	-333	-214	-340
Total	-537	-713	-540	-785	-540	-803
Total energy balance over life cycle	10,716	10,328	9627	9183	9326	8871

TABLE 2.2 – Analyse de cycle de vie de bâtiments situés à Växjö (Suède), la durée de vie supposée des bâtiments est de 50 ans [Dodoo *et al.*, 2012].

Isolant	Énergie grise (kWh/m ³)
Laine de verre	250
Laine de roche	150
Polyuréthane	974
Polystyrène extrudé	795
Laine de chanvre	48
Laine de bois	161
Laine de mouton	51

TABLE 2.3 – Énergie grise de différents isolants [Conseils Thermiques, 2016].

bâtiment qui consomment peu. Cependant leur énergie grise (énergie nécessaire à produire un matériau) est très différente comme le montre le tableau 2.3. À cela s'ajoute le fait que les matières premières sont renouvelables pour les matériaux biosourcés à l'inverse des autres.

Le bois est utilisé pour diverses applications dans le bâtiment [CSTB, 2006] : structure (ossature, charpente, plancher, plafond, fondations) ; parements et finition (couverture, bardage, escalier, plinthe) ; menuiseries (portes et fenêtres) ; isolation avec des panneaux de fibres de faible densité ; ameublement avec du bois massif ou des panneaux de fibres de densité moyenne. Ces usages variés et nombreux du bois s'expliquent par ses propriétés structurelles et thermiques :

- résistance en traction et compression ;
- rigidité spécifique dans la direction longitudinale équivalente à celle de l'acier ;
- conductivité thermique la plus faible des matériaux structurels (béton, acier, brique, pierre) ;
- bonne résistance au feu ;
- faible effusivité thermique (ce qui améliore le confort thermique de l'occupant).

Avec la performance thermique croissante des bâtiments et le recours à des matériaux biosourcés, les propriétés de ces matériaux doivent être connues précisément pour que les simulations de consommation d'énergie soient fiables. Cependant, les modélisations réalisées sur des bâtiments à ossature bois laissent encore apparaître des différences significatives avec l'expérience [Osanyintola et Simonson, 2006, Piot *et al.*, 2011]. Une meilleure modélisation des transferts dans les matériaux à base de bois permettrait au concepteur de l'habitat d'en exploiter toutes les potentialités. Ce travail de thèse consiste ainsi à étudier plusieurs matériaux biosourcés : l'épicéa (*Picea abies*) et des panneaux de fibres de différentes densités (le LDF, *Low Density Fibreboard*, et le MDF, *Medium Density Fibreboard*). On présente dans la partie suivante les caractéristiques de ces matériaux.

2.2 Le bois et les panneaux de fibres

2.2.1 L'anatomie du bois

Le bois est un tissu végétal que l'on trouve dans toutes les structures rigides des arbres (racines, tronc et branches). Il est constitué d'une superposition de couches coaxiales de cellules formées par croissance secondaire. Chaque année, à la reprise de l'activité de végétation, une nouvelle couche de cellules distincte de la précédente est mise en place. Ces couches successives sont appelées « cernes annuels d'accroissement ». Au cours la même année, la croissance secondaire de l'arbre est influencée par la saison de telle sorte qu'il est possible de distinguer le

bois formé au printemps (bois initial) de celui formé en été (bois final) sur la plupart des espèces tempérées. Cette distinction est très nette chez les résineux, avec du bois de printemps, peu dense, qui apparaît jaune sur une coupe transversale et du bois d'été très dense, qui est brun.

Afin d'étudier les propriétés physiques du bois, il est primordial d'y associer un repère tridimensionnel. Le bois étant un matériau orthotrope, ses propriétés sont étudiées selon trois plans perpendiculaires les uns aux autres, appelés plans ligneux. Ils correspondent aux trois directions d'anisotropie et sont représentés sur la figure 2.3 :

- la direction longitudinale (L) parallèle au sens des fibres ;
- la direction radiale (R) orientée de la moelle à l'écorce et qui suit le sens des rayons ligneux ;
- la directions tangentielle (T) perpendiculaire aux deux autres, tangente aux cernes.

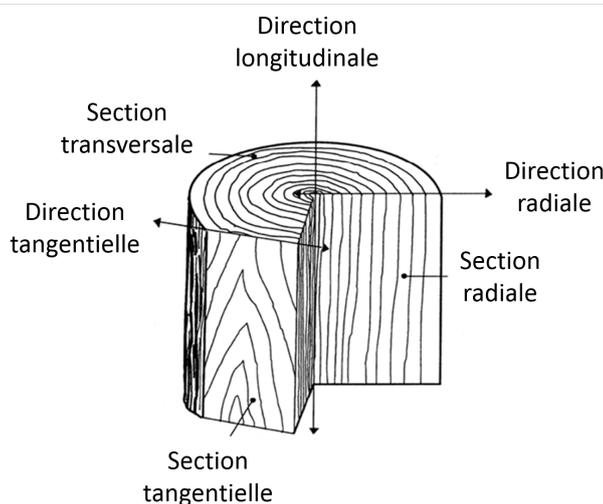


FIGURE 2.3 – Directions d'anisotropie et plans d'étude du bois [Guitard, 1987].

L'épicéa (*Picea abies*) est un conifère, classe d'arbres dont l'organisation anatomique est simple, uniforme et régulière. La figure 2.4 fait apparaître les arrangements cellulaires dans les trois directions d'étude.

Les trachéides axiales sont des cellules alignées dans le sens longitudinal et constituent environ 90 % du bois [APT, 2016]. Elles ont un rôle de conduction mais également de soutien de l'arbre. Ce sont des cellules longues et fines de section carrée ou rectangulaire. Elles possèdent des ponctuations aréolées permettant de faire circuler la sève d'une trachéide à une autre et des ponctuations semi-aréolées mettant en contact une trachéide à un rayon ligneux. Au printemps, les trachéides du bois initial présentent une grande cavité (lumen) et des parois minces alors qu'en fin de saison de végétation, les trachéides du bois final ont

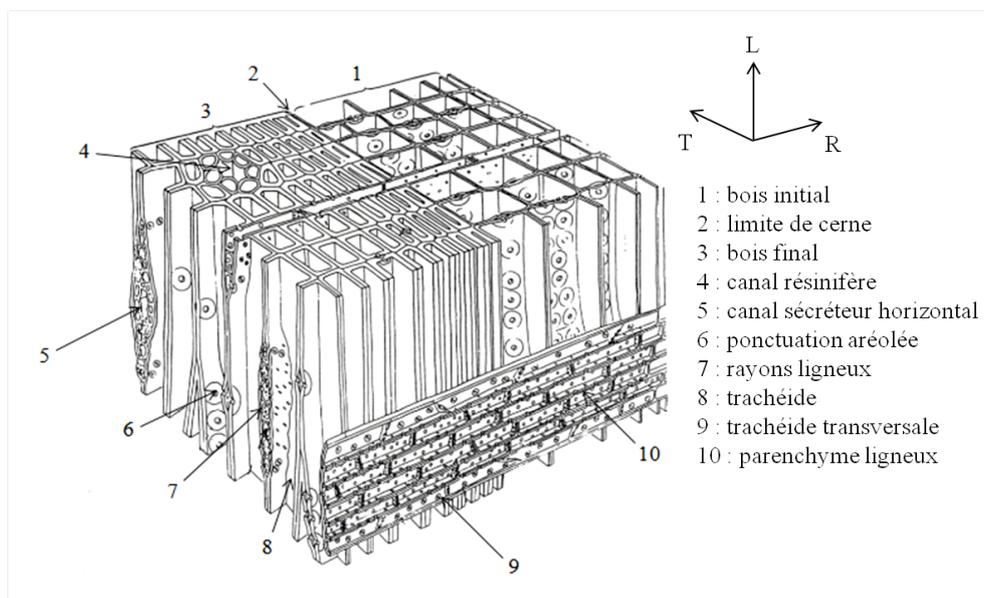


FIGURE 2.4 – Organisation cellulaire d'un bois de conifère [Grosser, 1977].

une section plus petite et des parois plus épaisses. Le bois des conifères présente une limite de cerne nette. La présence de lumens au centre des cellules confère un caractère poreux au bois.

Les rayons ligneux sont toujours orientés dans le sens radial et ont un rôle de conduction de la sève et de stockage des nutriments. Ils peuvent être accompagnés ou non de trachéides radiales et de canaux résinifères selon les essences.

Les canaux résinifères ne sont présents que dans certaines essences. Ils sont constitués de cellules sécrétrices et sont organisés en cercle. La résine produite s'écoule dans le canal ainsi formé.

La masse volumique varie selon les essences du bois qui possèdent des porosités différentes. Elle peut également varier sensiblement au sein d'une même essence. En revanche, la masse volumique de la matière ligneuse ne dépend pas des essences : la valeur communément admise est d'environ 1500 kg m^{-3} [Stamm et Hansen, 1937].

L'épicéa est donc un matériau poreux et anisotrope. Il est également hétérogène à différentes échelles (ex : bois initial/bois final). Nous nous intéressons uniquement à l'échelle de la structure cellulaire où le bois est formé de parois cellulaires et de pores remplis d'air, les lumens.

2.2.2 Le bois, un matériau hygroscopique

On distingue différents états de l'eau dans le bois :

- l'eau libre ou eau capillaire qui se trouve dans les cavités cellulaires (lumens). Ses propriétés thermodynamiques sont proches de l'eau liquide ;
- l'eau hygroscopique également appelée eau liée qui est l'eau contenue dans les parois cellulaires (via l'hydrophilie de la matière cellulosique). L'eau liée présente une enthalpie de vaporisation supérieure à celle de l'eau libre.

La teneur en eau du bois X est le rapport entre la masse d'eau contenue dans le bois et la masse du bois anhydre (*i.e.* dépourvu d'eau) :

$$X = \frac{m_{\text{bois humide}} - m_{\text{bois anhydre}}}{m_{\text{bois anhydre}}} \quad (2.1)$$

La masse anhydre est obtenue en séchant le bois à 103 °C jusqu'à la stabilisation de la masse (Norme NF B51-004, 1985).

Compte tenu de la différence d'enthalpie entre l'eau libre et l'eau liée, l'eau libre s'évapore avant l'eau liée. Lorsqu'un morceau de bois vert est exposé aux conditions atmosphériques, c'est d'abord l'eau libre contenue dans les cavités cellulaires qui s'évapore, les parois cellulaires restant en revanche saturées d'eau liée. La teneur en eau correspondant simultanément à la disparition de la dernière goutte d'eau libre et au début de l'évaporation de l'eau liée est connue sous le nom de point de saturation des fibres. Sa valeur se situe à environ 30 % de teneur en eau et varie sensiblement avec la température [Siau, 1984]. La plage de teneur en eau inférieure à ce point de saturation correspond au domaine hygroscopique du bois. Ce domaine se caractérise par un équilibre entre la teneur en eau du bois et l'humidité de l'air ambiant. Une relation existe donc entre ces deux grandeurs, elle dépend de la température et est représentée par des courbes appelées « isothermes de sorption ». Un exemple est donné sur la figure 2.5 où la teneur en eau X est tracée en fonction de l'humidité relative de l'air H_r pour différentes températures.

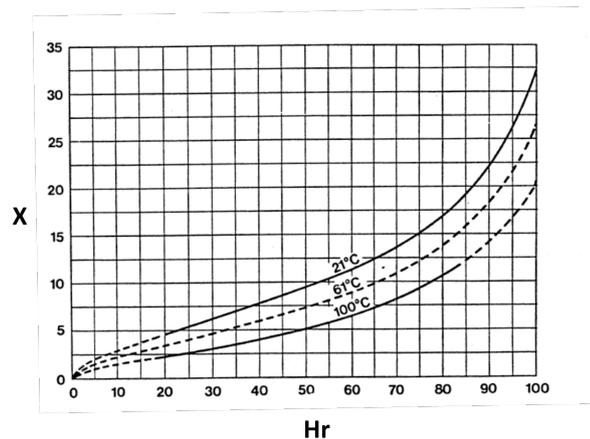


FIGURE 2.5 – Exemple d'isothermes de sorption [Siau, 1984].

2.2.3 Les panneaux de fibres

En plus de l'épicéa, on étudie des panneaux de fibres de bois de différentes densités : le LDF (*Low Density Fibreboard*) de densité faible et le MDF (*Medium Density Fibreboard*) de densité moyenne.

Deux procédés permettent de fabriquer des panneaux de fibres :

- un procédé humide qui permet d'obtenir une cohésion des panneaux grâce aux forces de liaison du bois avec l'eau. Il n'est pas nécessaire d'ajouter de liant sauf si l'on souhaite certaines propriétés spécifiques. Les principales étapes de fabrication sont : formation de fibres par défibrage de morceaux de bois, humidification des fibres, moulage, séchage et pressage pour former des panneaux ;
- un procédé sec qui nécessite un liant (souvent une résine). Les principales étapes de fabrication sont : défibrage ; encollage des fibres par le liant ; pressage à chaud ; refroidissement et stabilisation.

Le LDF est utilisé pour l'isolation thermique et acoustique des bâtiments. Ses propriétés isolantes proviennent d'une faible masse volumique, celle-ci est comprise entre 50 kg m^{-3} et 400 kg m^{-3} .

Le MDF est un panneau polyvalent, utilisé principalement dans l'aménagement et la décoration intérieure. Sa masse volumique est comprise entre 600 kg m^{-3} et 800 kg m^{-3} .

Ces panneaux sont constitués de fibres de bois et sont donc eux aussi hygroscopiques. Comme les fibres sont placées préférentiellement dans le plan du panneau lors de la mise en œuvre, ce sont également des matériaux anisotropes.

L'épicéa et les panneaux de fibres étant des matériaux hygroscopiques, comprendre leur comportement hygrothermique est nécessaire pour une conception de bâtiment satisfaisante. On étudie ainsi dans ce travail de thèse la conductivité thermique et la diffusivité massique de ces matériaux. Dans la partie suivante, on présente différentes méthodes fournies par la littérature pour évaluer ces propriétés.

2.3 Propriétés équivalentes de matériaux biosourcés

La connaissance des propriétés des matériaux de construction est nécessaire pour la conception des bâtiments. Le comportement hygrothermique des matériaux biosourcés est ainsi souvent étudié, par des méthodes expérimentales ou numériques.

Les méthodes expérimentales pour caractériser les propriétés physiques de matériaux sont nombreuses.

Concernant la diffusion d'eau dans le bois, les travaux pionniers se sont intéressés à la force de liaison des matériaux cellulosiques avec l'eau [Stamm et Hansen, 1937], à l'augmentation de la perméabilité avec la diminution de l'humidité dans le bois [Comstock, 1968] et à la diffusion de l'humidité en régimes permanent et transitoire et sous des conditions non-isothermes [Siau, 1984].

Le coefficient de diffusion d'eau liée dans le bois peut en effet être mesuré expérimentalement en régime transitoire ou en régime permanent. En régime transitoire, un échantillon de matériau est soumis à un échelon d'humidité à l'aide de deux enceintes climatiques. En mesurant l'évolution de la masse de l'échantillon, on peut déterminer le coefficient de diffusion par méthode inverse. Les résultats d'Agoua *et al.* [Agoua *et al.*, 2001] mettent en évidence l'effet de la direction (longitudinale, radiale ou tangentielle) et de l'essence (hêtre ou pin sylvestre) sur le coefficient de diffusion. De la même façon, Olek *et al.* [Olek *et al.*, 2005] ont montré que les coefficients de diffusion d'eau liée dépendent de la teneur en eau des échantillons. À l'inverse, Tarmian *et al.* [Tarmian *et al.*, 2012] ont étudié le régime permanent en utilisant la méthode classique de la coupelle sur des bois de réaction. Cette méthode consiste à appliquer un gradient d'humidité à un échantillon, puis à évaluer le flux de vapeur par suivi de masse et enfin à déterminer la diffusivité en régime permanent en utilisant la première loi de Fick.

Pour déterminer les propriétés thermiques de matériaux biosourcés, la méthode « flash » proposée par Parker *et al.* [Parker *et al.*, 1961] a été largement employée. Son principe consiste à appliquer à la face avant d'un échantillon cylindrique un bref flux de chaleur (fourni par un laser par exemple) et à suivre l'évolution de la température sur sa face arrière. Plusieurs variantes de la méthode ont été étudiées. Degiovanni et Laurent [Degiovanni et Laurent, 1986] ont notamment proposé une technique d'identification de la diffusivité thermique. Le domaine de validité de la méthode « flash » est très étendu aussi bien en température qu'en type de matériaux : isolants, conducteurs, solides, liquides, granulaires, etc. Elle a ainsi été employée par Harada *et al.* pour mesurer la diffusivité thermique, la chaleur spécifique et la conductivité thermique de treize espèces de bois afin d'étudier les propriétés du bois pendant le traitement thermique [Harada *et al.*, 1998].

Aujourd'hui, la méthode de la source plane transitoire (technique du disque chaud ou du ruban chaud) est très utilisée. Initialement employée pour mesurer les propriétés thermique de matériaux isotropes, il a été montré qu'elle permettait également de mesurer les propriétés de matériaux très poreux, notamment les composites de bois [Bouguerra *et al.*, 2001]. Suleiman *et al.* [Suleiman *et al.*, 1999] ont ainsi calculé la conductivité et la diffusivité thermiques de bois en étudiant l'influence de la température, de la densité, de la porosité et de l'anisotropie sur les résultats. D'autres résultats ont été déterminés par Pierre *et al.* [Pierre *et al.*, 2014] qui ont évalué la conductivité et la diffusivité thermiques de béton de chanvre et

ont mis en évidence l'influence de la température et de l'humidité relative sur la conductivité. Enfin, Laguela *et al.* [Lagüela *et al.*, 2015] ont eu recours à cette technique pour calculer les conductivités et diffusivités thermiques du chêne, de l'épicéa et du mélèze.

La caractérisation expérimentale n'étant pas toujours possible ou adaptée, des méthodes numériques sont également utilisées. Lux *et al.* [Lux *et al.*, 2006a] ont déterminé la conductivité thermique équivalente de matériaux à base de fibres de bois destinés à l'isolation des bâtiments. Leur méthode combine la prise de moyenne volumique (technique mathématique de changement d'échelle très utilisée dans l'étude des milieux poreux) et l'analyse d'images obtenues par microtomographie aux rayons X (taille de pixel : 4,91 μm). En plus de la conductivité thermique, Thoemen *et al.* [Thoemen *et al.*, 2008] ont calculé la perméabilité macroscopique de panneaux de fibres de bois. Ils ont également utilisé la microtomographie pour obtenir les microstructures des matériaux (résolution de 2,28 μm) et ont segmenté les voxels en trois groupes : paroi cellulaire, lumens et vides inter-fibres. Ils ont ensuite couplé ces images numériques à des simulations par la méthode des différences finies. La densité des panneaux étudiés variait de 500 kg m^{-3} à 1360 kg m^{-3} .

En outre, concernant le comportement hygrothermique de matériaux biosourcés, Lelievre *et al.* [Lelievre *et al.*, 2014] ont examiné les transferts de chaleur et d'humidité au sein de béton de chanvre en prenant en compte les phénomènes d'hystérésis et de changement de phase. Les équations de conservation sont résolues à l'aide du logiciel commercial de calcul par éléments finis *Comsol*. Deux modèles pour l'hystérésis sont testés (le modèle empirique de Pedersen [Pedersen, 1990] et le modèle phénoménologique de Mualem [Carmeliet *et al.*, 2005]) et les propriétés du matériau nécessaires à la résolution du problème sont mesurées expérimentalement (mesure calorimétrique, fil chaud transitoire, etc.).

Les méthodes numériques utilisées pour calculer des propriétés équivalentes de matériaux font généralement appel au principe du changement d'échelle qui est présenté dans la partie suivante.

2.4 Le changement d'échelle

Un matériau hétérogène est constitué de plusieurs domaines qui correspondent soit à différents matériaux, soit à différents états d'un même matériau. On dit qu'un matériau hétérogène est formé de plusieurs phases.

Si la taille moyenne des domaines (*i.e.* l'échelle « microscopique ») est beaucoup plus grande que les dimensions moléculaires, on peut considérer que les domaines possèdent des propriétés de matériau continu. Si, de plus, cette échelle

est plus petite que la longueur caractéristique de l'échantillon (*i.e.* l'échelle macroscopique), alors le matériau hétérogène peut être vu comme un matériau continu virtuel à l'échelle microscopique et des propriétés macroscopiques ou « équivalentes » peuvent lui être attribuées [Torquato, 2000]. Cela revient à déterminer le comportement du matériau homogène équivalent.

Ces propriétés équivalentes sont généralement difficiles et/ou coûteuses à mesurer donc des modèles numériques et mathématiques ont été développés pour retrouver les propriétés des matériaux homogénéisés [Kanouté *et al.*, 2009].

L'homogénéisation est l'un des outils mathématiques qui permet de prédire les propriétés macroscopiques à partir de la description d'un milieu hétérogène. Dans le cas d'un milieu supposé périodique, pour lequel les échelles microscopique et macroscopique n'interfèrent pas, l'homogénéisation revient à résoudre le problème physique sur une cellule unitaire [Suquet, 1987, Sánchez-Hubert et Sánchez-Palencia, 1992]. Des conditions aux limites particulières sont associées à ce problème (cf. remarque à la fin de la partie). Pour un problème diffusif, par exemple, une relation linéaire existe entre le flux \vec{q} et le gradient de la force motrice $\vec{\nabla}u$:

$$q_i = a_{ij}u_{,j} \quad (2.2)$$

où le tenseur d'ordre deux a_{ij} représente la propriété du milieu. Dans le cas d'un milieu périodique, le tenseur homogénéisé A_{ij} est défini par :

$$A_{ij} = \langle a_{ij} \rangle + \langle a_{ip}\xi_{,p}^j \rangle. \quad (2.3)$$

Cette équation indique que la valeur macroscopique est la somme de deux termes :

- le premier terme qui est la moyenne, sur la cellule unitaire, des valeurs microscopiques. Dans le cas d'un problème de diffusion, ce terme représente un milieu fictif pour lequel tous les composants agissent en parallèle ;
- le second terme qui est un terme correctif et qui prend en compte la morphologie des composants à l'intérieur de la cellule unitaire.

L'évaluation de ce terme nécessite de calculer les fonctions ξ^j . Il s'agit de problèmes à résoudre sur la cellule unitaire avec des conditions aux limites périodiques :

$$\begin{cases} \xi^j \\ (a_{ip}\xi_{,p}^j)_{,i} = -a_{ij,i} \end{cases} \begin{array}{l} \text{Y-périodique} \\ \text{sur Y} \end{array} . \quad (2.4)$$

Le changement d'échelle consiste ainsi à prédire les propriétés macroscopiques d'un matériau à partir d'informations sur sa morphologie et sur les propriétés de ses différentes phases [Sánchez-Palencia, 1980, Suquet, 1987]. Ceci est illustré sur la figure 2.6. Concernant la microstructure du matériau étudié, la proportion de chaque phase (les fractions volumiques) n'est pas une donnée suffisante. Il est par exemple crucial de savoir comment les phases sont disposées dans l'espace, notamment comment elles sont connectées entre-elles [Torquato, 2000]. Les propriétés

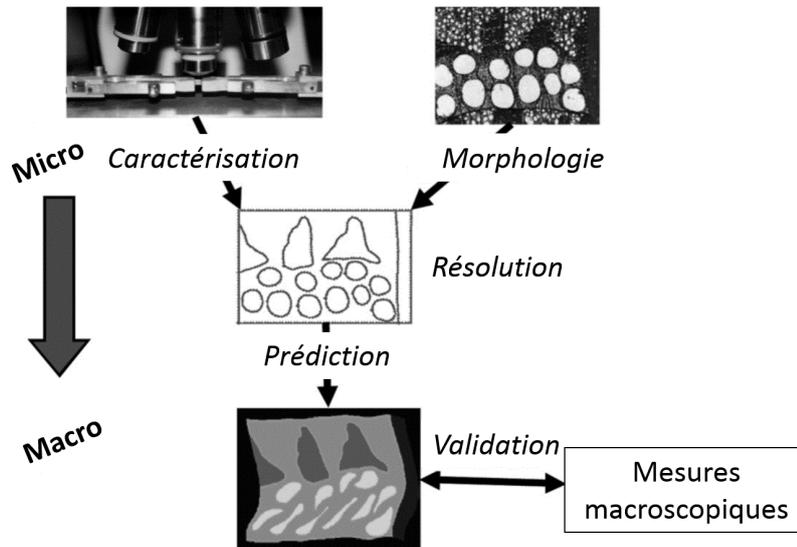


FIGURE 2.6 – Principe du changement d'échelle : à l'échelle microscopique, le milieu est hétérogène et doit être défini par sa morphologie et les propriétés de ses différentes phases. Ces informations permettent de prédire les propriétés macroscopiques qui peuvent être validées expérimentalement. Dans cet exemple, l'échelle microscopique correspond aux tissus du bois et l'échelle macroscopique correspond à un cerne annuel [Perré, 2010].

homogénéisées permettent ensuite de résoudre de nombreux problèmes d'ingénierie à l'échelle macroscopique, les modèles microscopiques n'étant pas adaptés à l'analyse de larges structures.

Puisque les propriétés équivalentes dépendent de la microstructure, une approche générale consiste à calculer les propriétés équivalentes d'un matériau désordonné à partir de sa microstructure. L'enjeu est de prendre en compte la morphologie réelle et précise du matériau vu que les fluctuations de microstructure ont d'importantes conséquences sur les propriétés macroscopiques. La meilleure stratégie capable de satisfaire cette exigence consiste à construire un maillage directement à partir de l'image microscopique du milieu poreux [Perré, 2007]. On a ensuite recours à une méthode numérique pour résoudre le problème physique étudié sur le maillage ayant été défini. Hollister *et al.* ont ainsi utilisé la théorie de l'homogénéisation pour estimer les déformations à différents niveaux d'une structure d'os à partir d'une image numérique [Hollister et Kikuchi, 1994]. Celle-ci a été obtenue par micro-tomographie et les voxels ont été directement employés comme des éléments finis cubiques illustrés sur la figure 2.7. Par ailleurs, Takano *et al.* [Takano *et al.*, 2003] ont étudié une céramique poreuse par la méthode des éléments finis en se basant sur une image numérique réelle du matériau (images prises par une caméra CCD après des polissages successifs du matériau), chaque voxel correspondant à un élément du maillage.

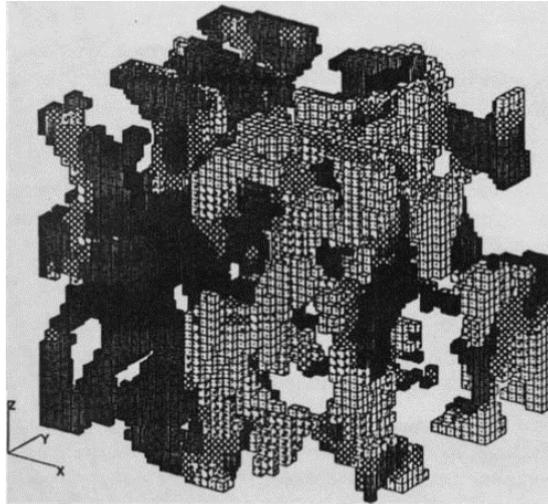


FIGURE 2.7 – Maillage par éléments finis d'une microstructure d'os obtenue par micro-tomographie (taille d'un élément : $50\ \mu\text{m}$) [Hollister et Kikuchi, 1994].

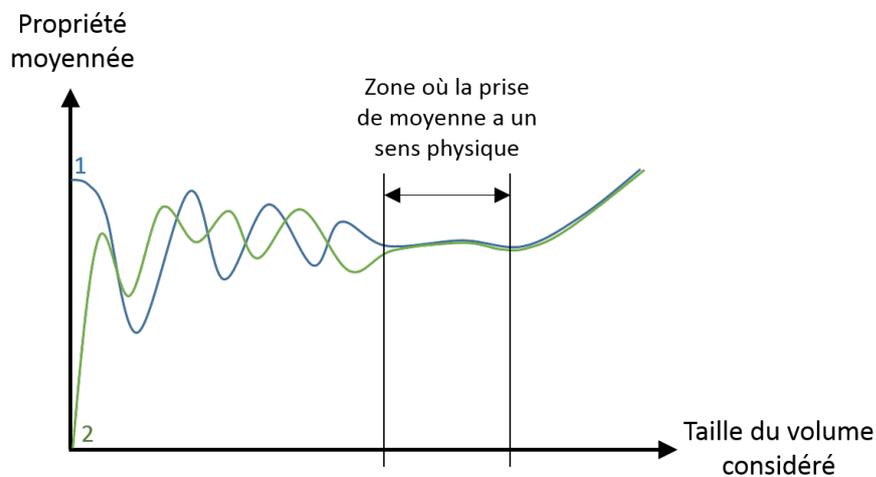


FIGURE 2.8 – La méthode de prise de moyenne suppose l'existence d'un volume élémentaire représentatif, assez grand pour que les quantités moyennées soient définies et assez petit pour éviter les variations macroscopiques et les effets de non-équilibre. Deux courbes sont représentées sur ce schéma : le point 1 est situé dans la phase pour laquelle la propriété considérée est grande, le point 2 dans la phase pour laquelle la propriété est petite (nulle dans cet exemple).

Enfin, la mise en œuvre d'une approche par changement d'échelle nécessite de définir un volume élémentaire représentatif (VER) du matériau étudié. Le VER doit être plus grand que la taille caractéristique des domaines des phases pour représenter correctement le matériau étudié. Mais il doit être plus petit que la taille caractéristique de la structure globale étudiée (ex : panneau isolant) pour pouvoir être remplacé par un matériau homogène équivalent lors d'un calcul macroscopique (ex : thermique du bâtiment). Le VER doit être assez grand pour éviter également les effets dus à des configurations de non-équilibre à l'échelle microscopique. La figure 2.8 schématise l'évolution d'une propriété moyennée d'un matériau en fonction de la taille du volume considéré et illustre ainsi la zone où le VER doit être choisi.

Remarque : si l'on se réfère à la théorie de l'homogénéisation de milieux périodiques [Sánchez-Palencia, 1980], les conditions aux limites rigoureuses à appliquer au volume élémentaire représentatif devraient être des conditions périodiques :

- flux périodiques sur les faces latérales plutôt que des flux nuls ;
- écart constant de la variable macroscopique entre les nœuds opposés des faces amont et aval plutôt que des conditions de Dirichlet.

Cependant, dans le cas de morphologies réelles, la périodicité n'est pas garantie. Une façon classique de reformer une cellule périodique est de former un volume élémentaire représentatif plus grand par retournement du volume sélectionné (deux symétries axiales en 2D pour un VER 4 fois plus grand et 3 symétries planes en 3D pour un VER 8 fois plus grand). Un exemple de cellule unitaire est représenté sur la figure 2.9a. Le milieu périodique correspondant est illustré sur la figure 2.9b et celui obtenu par retournement sur la figure 2.9c.

La cellule unitaire étant délibérément choisie pour représenter un cas extrême, on se rend facilement compte de l'impact des conditions aux limites. Supposons que la phase bleue soit conductrice, si l'on applique à la cellule des conditions périodiques, la cellule sera bien considérée comme isolante tout comme le milieu périodique. En revanche, si on y applique des conditions Dirichlet/flux nul, la cellule est alors conductrice et ne représente plus le milieu périodique. Lorsque le nombre d'inclusions dans la cellule unitaire augmente et que l'on s'éloigne d'un cas limite, la différence entre les deux types de conditions aux limites diminue.

Dans le cas du volume reconstitué par retournement, le VER obtenu a des plans de symétrie évidents comme illustré sur la figure 2.9c. Avec la cellule unitaire choisie (figure 2.9a), l'extension du volume par retournement donne bien une cellule dans laquelle la phase bleue est connexe : ce milieu sera donc conducteur si la phase bleue est conductrice. Le calcul sur le VER complet avec des conditions périodiques revient alors à faire le calcul sur le VER initial avec des conditions de flux nul et des conditions de Dirichlet. Cette stratégie a déjà été utilisée sur du bois [Farruggia, 1998, Perre et Turner, 2002].

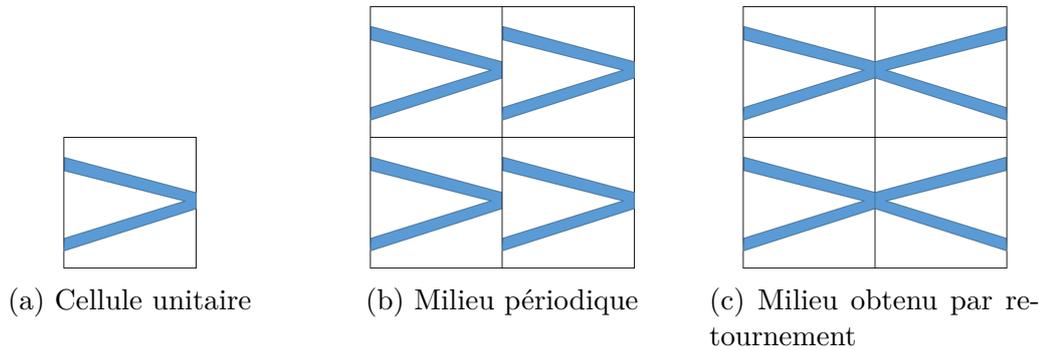


FIGURE 2.9 – Schéma illustrant les différents milieux représentés par une même cellule unitaire selon les conditions aux limites imposées.

Le changement d'échelle requiert donc deux éléments : une information sur la structure du matériau et une méthode de résolution du problème physique. Les solutions retenues pour ce travail de thèse sont la micro-tomographie aux rayons X et la méthode Lattice Boltzmann. Les deux parties suivantes présentent la littérature relative à ces deux sujets et justifient ainsi les choix effectués.

2.5 La micro-tomographie et ses usages

La micro-tomographie aux rayons X est une technique d'imagerie qui permet de caractériser la microstructure d'un matériau de façon non destructive dans les trois dimensions et avec une résolution spatiale de l'ordre du micromètre. Cette technique est particulièrement intéressante pour les sciences des matériaux puisque la relation entre les propriétés macroscopiques et la microstructure d'un matériau est souvent recherchée [Maire *et al.*, 2001, Salvo *et al.*, 2003, Landis et Keane, 2010]. On présente dans cette partie le principe de la micro-tomographie aux rayons X ainsi que ses usages pour l'étude des matériaux biosourcés.

2.5.1 Principe de la micro-tomographie aux rayons X

La micro-tomographie aux rayons X consiste à réaliser une série de radiographies 2D d'un échantillon de matériau que l'on fait tourner autour d'un axe. Pour chaque valeur d'angle, un faisceau de rayons X est envoyé à travers un échantillon et une image d'atténuation du faisceau X par l'échantillon est enregistrée par un détecteur 2D. Par la loi de Beer-Lambert, le ratio entre le nombre de photons transmis et le nombre de photons incidents est relié à l'intégrale du coefficient d'absorption du matériau le long du chemin suivi par les photons à travers l'échantillon. L'image résultante est une information intégrée d'un volume sur un plan 2D, on parle ainsi de « projection ».

En faisant tourner l'échantillon entre 0° et 180° tout en réalisant un grand nombre de radiographies, on peut obtenir une information 3D. En effet, plusieurs algorithmes développés pour la tomographie permettent de reconstruire à partir de cette série de projections 2D une image numérique 3D où chaque voxel (*i.e.* un élément de volume qui est analogue à un pixel en 3D) représente l'absorption des rayons X à ce point. On peut citer comme exemples la transformation de Radon [Radon, 1917, Feldkamp *et al.*, 1984] et les méthodes de rétroprojection filtrée [Herman, 1979]. Comme il y a une relation entre le coefficient d'absorption (qui, par convention, est normalisé par rapport à celui de l'eau et appelé alors « nombre *CT* ») et la densité du matériau, une calibration préalable permet de décrire la structure interne 3D sous la forme d'une cartographie de masse volumique. L'image 3D obtenue est généralement présentée comme une série de « coupes » 2D où les différentes phases se manifestent par des niveaux de gris différents.

Les procédés d'acquisition et de reconstruction sont illustrés sur la figure 2.10. L'acquisition des radiographies 2D nécessite un scintillateur pour convertir les photons X en photons lumineux et des photodétecteurs pour produire une image numérique.

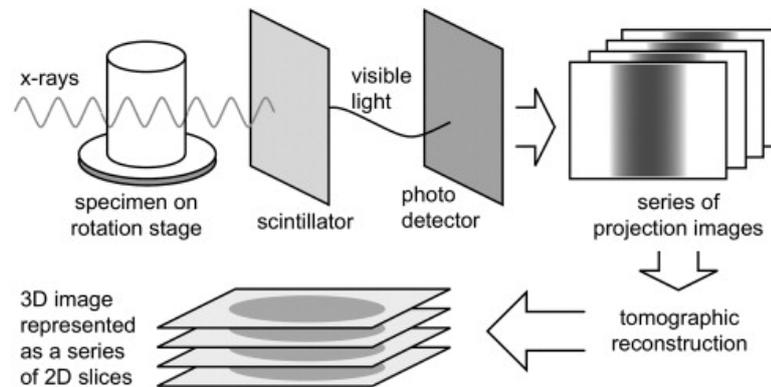


FIGURE 2.10 – Illustration schématique des opérations d'acquisition et de reconstruction de la micro-tomographie aux rayons X. Un faisceau de rayons X permet d'obtenir une série de projections de l'échantillon considéré. Ces projections sont reconstruites mathématiquement en une cartographie 3D traduisant l'absorption des rayons X dans le volume. L'image 3D est généralement présentée comme une série de coupes 2D. Image issue de [Landis et Keane, 2010].

Pour un faisceau de rayons X conique, la résolution de l'image dépend des distances entre l'objet et la source et entre l'objet et les détecteurs. La résolution spatiale des systèmes de tomographie conventionnels est généralement limitée par la géométrie du faisceau de rayons X et par les caractéristiques des détecteurs [Landis et Keane, 2010]. Des compromis sont à arbitrer pour obtenir un scan de qualité. Une transmission trop faible implique une mauvaise statistique de comp-

reconstruction tomographique. Pour profiter des avantages des sources de rayons X synchrotron, l'imagerie est généralement limitée à des échantillons relativement petits (5-10 mm).

En effet, pour éviter plusieurs artefacts d'imagerie, l'échantillon doit être ajusté au champ de vue du détecteur [Kyrieleis *et al.*, 2011]. Le nombre de détecteurs N_d étant fixé pour des raisons technologiques et numériques (généralement 1024 ou 2048 selon les systèmes de tomographie), la taille limite d'un voxel est fonction de la taille de l'échantillon [Cnudde et Boone, 2013]. Si l'on souhaite une résolution donnée, soit une taille de pixel r_p , le diamètre de l'échantillon scanné devra mesurer environ $r_p \times N_d$. Cela signifie qu'un compromis entre la taille maximale de l'échantillon et la résolution spatiale doit être trouvé [Salvo *et al.*, 2003]. Cependant, une nouvelle technologie permet de zoomer sur une partie de l'objet même si l'objet n'est pas complètement dans la partie du faisceau vue par le détecteur, on parle de tomographie locale. La qualité de la reconstruction en tomographie locale va dépendre de l'environnement de l'échantillon (homogénéité du matériau, zone scannée située au centre de l'échantillon) et du rapport entre la zone vue et la taille de l'échantillon [Zhang, 2012]. Il ne sera pas possible de reconstruire les zones non vues par le détecteur mais surtout celles-ci vont influencer les projections des zones vues par le détecteur. Différentes méthodes ont été développées pour traiter la tomographie locale mais c'est la technique de *zoom-in* qui est la plus intéressante et permet d'obtenir un meilleur résultat [Xiao *et al.*, 2007].

Pour effectuer une micro-tomographie aux rayons X, plusieurs modes sont possibles : absorption, contraste de phase et holotomographie. L'absorption correspond au mode conventionnel décrit précédemment pour lequel l'absorption du faisceau est mesurée. Avec des sources synchrotron, un faisceau partiellement cohérent nécessaire pour le contraste de phase est obtenu [Momose, 1995]. La distance entre l'échantillon et le détecteur est augmentée par rapport au mode par absorption. Le contraste est dû à l'interférence entre les ondes ayant subi différents retards de phase en traversant le matériau. Ce contraste est superposé au contraste conventionnel par absorption et est efficace pour la détection de contours, particulièrement quand l'absorption ne conduit qu'à un faible contraste. Ce mode est adapté aux matériaux biosourcés car le contraste de densité entre les phases (parois cellulaires/lumens remplis d'air) est faible [Mayo *et al.*, 2010, Perré, 2011]. De plus, le mode par contraste de phase permet une meilleure résolution que l'absorption ce qui est très utile pour l'imagerie du bois dont certains éléments anatomiques sont de l'ordre du micron.

Les avantages de l'imagerie par micro-tomographie sont nombreux :

- la nature numérique des images 3D obtenues par tomographie permet de les exploiter pour en extraire de nombreuses mesures quantitatives sur la structure interne du matériau (fraction volumique des différentes phases, connectivité des phases, orientation d'éléments, etc.) ;

- la préparation des échantillons à scanner est généralement minimale (usinage d'un petit échantillon) alors que pour les observations 2D, la préparation des échantillons telle que le polissage peut créer des artefacts ;
- comme la technique est non destructive, il est possible de faire plusieurs scans sur un même échantillon sous différentes conditions. Des expériences *in situ* sont en effet réalisables avec divers équipements thermique et/ou mécanique telles que des essais de traction, des tests de compression à haute température ou des tests de fatigue à température ambiante [Buffiere *et al.*, 2010] ;
- grâce à la nature numérique des images, le couplage entre les données tomographiques et des simulations 3D est facilité.

De nombreux outils numériques spécialisés ce sont ainsi développés, tant pour le traitement d'images 3D que pour la maillage des morphologies obtenues. On peut citer des outils de visualisation 3D [Thibault *et al.*, 2002, Holmstad *et al.*, 2006] et des outils d'analyse d'images et de caractérisation de la microstructure (orientation des fibres [Axelsson, 2009], fractions volumiques locale et moyenne [Scaffidi-Argentina *et al.*, 2001], taille des pores [Elmoutaouakkil *et al.*, 2003]). D'autres travaux proposent des maillages numériques des microstructures à partir de scans ce qui permet ensuite de réaliser des simulations. Garboczi [Garboczi, 1998] a montré comment utiliser divers codes basés sur les méthodes des éléments finis et des différences finies pour résoudre des problèmes élastiques et thermiques sur des images numériques de milieux aléatoires. Maire [Maire *et al.*, 2003] a présenté différentes méthodes d'éléments finis permettant de produire des maillages à partir d'images numériques 3D issues de tomographie. Construire un maillage d'éléments finis à partir d'images tomographiques requiert trois étapes (i) la segmentation des images tomographiques pour améliorer la résolution de la frontière entre les phases solide et gazeuse ; (ii) la définition géométrique de la frontière solide par des éléments triangulaires ; (iii) le maillage tétraédrique du volume solide [Youssef *et al.*, 2005]. Des exemples de tels maillages sont illustrés sur la figure 2.12.

2.5.2 Utilisation de la micro-tomographie pour les matériaux biosourcés

La tomodensitométrie (tomographie axiale calculée par ordinateur ou CT-scan) est utilisée pour étudier le bois et ses produits dérivés depuis plusieurs décennies [Davis et Wells, 1992, Lindgren *et al.*, 1992]. Aujourd'hui, la micro-tomographie aux rayons X offre de nombreuses possibilités pour la recherche en sciences des matériaux en général et en sciences du bois en particulier, que ce soit pour les approches qualitatives ou pour les approches quantitatives [Van den Bulcke *et al.*, 2009].

D'une part, pour l'étude du bois, Trtik *et al.* [Trtik *et al.*, 2007] ont mon-

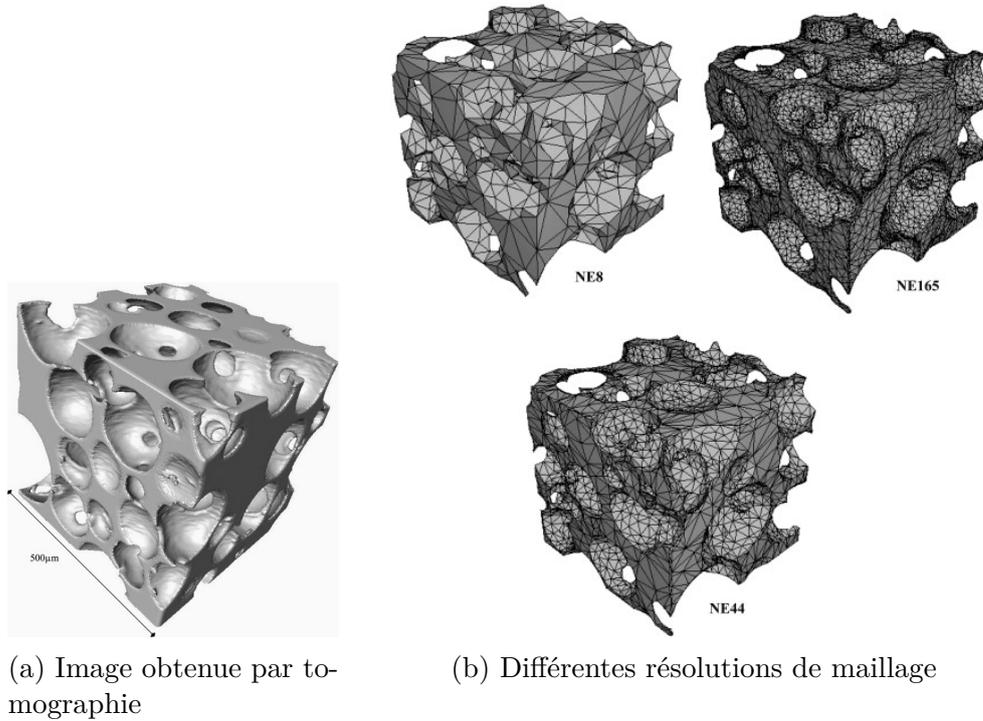


FIGURE 2.12 – Maillage d’une mousse de polyuréthane par la méthode des éléments finis [Youssef *et al.*, 2005].

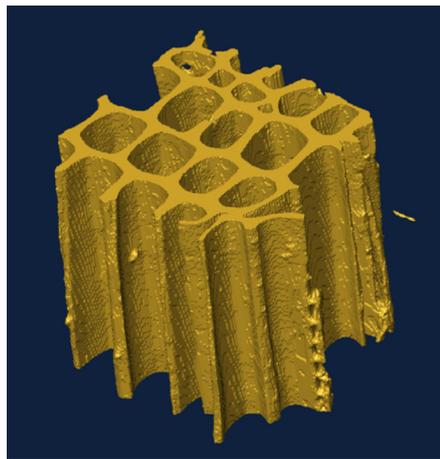


FIGURE 2.13 – Reconstruction 3D d’un échantillon d’épicéa d’environ 200 µm de hauteur [Trtik *et al.*, 2007].

tré que la tomographie aux rayons X utilisant la technologie synchrotron et le contraste de phase est capable de révéler clairement la microstructure du bois (cf. figure 2.13). La section des échantillons scannés est d'environ $200 \times 200 \mu\text{m}^2$ et la taille des voxels de $0,7 \times 0,7 \times 0,7 \mu\text{m}^3$. Ils ont également mesuré la porosité des échantillons d'épicéa scannés, le diamètre des trachéides, l'épaisseur des parois et le diamètre des ponctuations. Par ailleurs, Van den Bulcke *et al.* [Van den Bulcke *et al.*, 2009] ont utilisé la micro-tomographie aux rayons X (résolution de $0,7 \times 0,7 \times 0,7 \mu\text{m}^3$ également) pour visualiser l'anatomie de quatre espèces de bois : le pin sylvestre, le hêtre, le movingui et l'afzelia. Une analyse quantitative a aussi porté sur la mesure des épaisseurs de paroi et des tailles de lumens.

D'autre part, la morphologie de fibres de bois a été étudiée par Lux *et al.* [Lux *et al.*, 2006b] grâce à la tomographie aux rayons X. Les scans ont été réalisés à l'ESRF (European Synchrotron Radiation Facility) sur la ligne ID19 avec une résolution de $4,91 \mu\text{m}$ par pixel. Ils ont mesuré la porosité et les distributions de taille de fibres et de pores et ont quantifié l'anisotropie du réseau en définissant l'orientation locale des fibres. Walther et Thoemen [Walther et Thoemen, 2009] ont examiné la microstructure de panneaux de MDF dont la densité variait entre 300 kg m^{-3} et 1000 kg m^{-3} par micro-tomographie synchrotron aux rayons X (taille de pixel : $2,28 \mu\text{m}$). Un exemple d'image 3D obtenue est montré sur la figure 2.14. Leur analyse est très détaillée : distribution des vides inter- et intra-fibres, des fibres individuelles et en amas ; mesures des surfaces, des espaces de vide, du nombre de contacts et des surfaces de contact. Ils ont également examiné la distribution de résine par micro-tomographie et microscopie électronique à balayage environnementale. De plus, la tomographie sub-micrométrique à très haute résolution a été utilisée par Standfest *et al.* [Standfest *et al.*, 2010] pour caractériser un panneau de fibres de densité moyenne (MDF) industriel. Les scans ont été réalisés à l'aide d'une machine de tomographie numérique à rayons X, la taille des voxels était de $3,2 \times 3,2 \times 3,2 \mu\text{m}^3$. La proportion et la distribution des pores et des fibres ont été déterminées et corrélées à la densité locale.

La micro-tomographie aux rayons X permet donc de décrire la morphologie des matériaux étudiés. Il reste à examiner si la méthode Lattice Boltzmann est adaptée au calcul de propriétés de diffusion équivalentes.

2.6 Calcul de propriétés équivalentes par la méthode LB

La méthode Lattice Boltzmann (méthode LB ou LBM), présentée au chapitre 4, est une méthode numérique permettant de résoudre les équations aux dérivées partielles et donc les problèmes de diffusion. Comme c'est une méthode sans maillage, elle peut facilement être utilisée sur des matériaux hétérogènes avec des morphologies complexes.



FIGURE 2.14 – Exemple de sous-volume de MDF de taille $256 \times 256 \times 256$ voxels où les fibres sont marquées individuellement [Walther et Thoemen, 2009].

La méthode LB a beaucoup été utilisée pour prédire la conductivité thermique et la diffusivité massique équivalentes de milieux hétérogènes. Wang *et al.* [Wang *et al.*, 2007] se sont intéressés à la conductivité thermique équivalente de matériaux fibreux et ont étudié l'influence de l'orientation des fibres, de leur taille et de la porosité sur les résultats. En outre, une analyse très large a été menée par Wang et Pan [Wang et Pan, 2008] qui ont utilisé un modèle LB pour prédire différentes propriétés physiques équivalentes de matériaux composites ayant des structures complexes et variées (granulaire, fibreuse, en forme de réseau, etc.). Des microstructures virtuelles – équivalentes statistiquement aux milieux réels – sont reproduites par un algorithme de croissance par génération stochastique. Les prédictions sont comparées à des données expérimentales existantes ce qui permet de valider la faisabilité, l'efficacité et la robustesse de la méthode. Ils ont notamment calculé les conductivités thermiques de briques de sable humides, aussi bien gelées que non gelées, et les résultats concordent avec les expériences.

Concernant la diffusivité, Xuan *et al.* [Xuan *et al.*, 2010] ont analysé la diffusivité massique effective de milieux poreux par la LBM en 2D et 3D. Ils ont étudié la différence entre des milieux poreux réguliers et aléatoires et se sont également intéressés à l'influence du diamètre de grain moyen. Pour refléter la distribution stochastique des phases qui caractérise la plupart des milieux poreux, les morphologies ont été générées par une méthode de reconstruction. Yablecki et Baylak [Yablecki *et al.*, 2012] ont déterminé la conductivité thermique équivalente – hétérogène et anisotrope – de la couche de diffusion de gaz d'une membrane échangeuse de protons (élément d'une pile à combustible). Plus récemment, Walther *et al.* [Walther *et al.*, 2015] ont prédit la diffusivité effective de pâtes de ciment

pendant l'hydratation. De nombreux calculs ont été réalisés sur des morphologies virtuelles générées indépendamment pour déterminer de façon statistique la diffusivité équivalente. Enfin, Fang *et al.* [Fang *et al.*, 2016] ont utilisé la méthode LB pour prédire la conductivité thermique effective de matériaux hétérogènes anisotropes, constitués eux-mêmes de composants anisotropes. La structure de ces composites étant périodique, ils ont reconstruit une cellule unitaire représentative. Les résultats sont confrontés aux mesures expérimentales (réalisées par la méthode du disque chaud) des conductivités thermiques transverse et longitudinale de matériaux composites tressés.

La méthode Lattice Boltzmann apparaît donc comme une méthode numérique adaptée au calcul de propriétés équivalentes de matériaux hétérogènes et fournit des résultats satisfaisants.

Cependant, on peut noter que dans la plupart des études, les propriétés équivalentes de matériaux hétérogènes sont calculées sur des milieux modèles ou des morphologies reconstruites et non sur des morphologies réelles (algorithme de croissance par génération stochastique [Wang *et al.*, 2007, Wang et Pan, 2008, Xuan *et al.*, 2010], milieu fibreux généré aléatoirement et inclusions uniformément distribuées [Jeong *et al.*, 2008], algorithme stochastique de placement de fibres [Yablecki *et al.*, 2012], champs aléatoires corrélés [Walther *et al.*, 2015]).

Quelques études couplant la méthode LB à la morphologie réelle du matériau obtenue par imagerie existent quand même. Koivu *et al.* [Koivu *et al.*, 2009] ont calculé la perméabilité de papier de bois feuillu par la LBM et par la méthode des différences finies. Pour ces deux méthodes, une grille cubique régulière a été générée à partir d'images 3D obtenues par micro-tomographie aux rayons X et les simulations numériques ont été réalisées sur des sous-volumes de cette grille. Les scans ont été réalisés à l'ESRF sur la ligne ID19 avec une résolution de $0,7 \mu\text{m}$ et les images ont été seuillées pour distinguer les phases. Récemment, Perré *et al.* [Perré *et al.*, 2015] ont étudié à la fois les diffusivités thermique et massique de morphologies réelles d'épicéa en 2D obtenues par microscopie électronique à balayage environnementale avec la LBM. Les résultats ne sont donc donnés que dans deux directions (radiale et tangentielle) alors que le bois possède trois directions d'anisotropie.

2.7 Conclusion du chapitre

Pour diminuer l'impact environnemental du secteur du bâtiment, il paraît intéressant d'utiliser des matériaux biosourcés pour leurs propriétés thermiques, leur faible énergie grise et leur caractère renouvelable. De plus, les logiciels de simulation thermique dynamique utilisés en phase de conception devant accroître leur fiabilité, la caractérisation précise des matériaux de construction, notamment pour les transferts de chaleur et d'humidité, est devenue un enjeu important.

Comme le bois et ses matériaux dérivés sont hygroscopiques, anisotropes et hétérogènes, notre problématique est de déterminer certaines de leurs propriétés hygrothermiques équivalentes (conductivité thermique et diffusivité massique) dans les différentes directions d'anisotropie. Les études sur les propriétés hygrothermiques des matériaux biosourcés sont nombreuses et utilisent aussi bien des méthodes expérimentales que numériques.

Pour calculer numériquement des propriétés équivalentes, des outils théoriques sont nécessaires. Le changement d'échelle est une façon rigoureuse de prédire les propriétés macroscopiques d'un matériau hétérogène à partir de sa microstructure. Il est alors nécessaire de connaître précisément la morphologie réelle des matériaux étudiés et d'utiliser une méthode de résolution numérique.

La micro-tomographie aux rayons X apparaît comme une technique d'imagerie pertinente et éprouvée pour connaître la micro-structure des matériaux et plus particulièrement des matériaux biosourcés grâce au contraste de phase (accessible par la radiation synchrotron). En outre, les images numériques obtenues peuvent servir ultérieurement à des simulations 3D. Pour la résolution numérique, la méthode Lattice Boltzmann s'avère pertinente vu son large usage pour estimer des propriétés de diffusion équivalentes de matériaux hétérogènes.

Cependant, les études couplant la morphologie réelle d'un matériau à la méthode LB sont à notre connaissance moins nombreuses que celles utilisant des morphologies virtuelles. La micro-tomographie aux rayons X et la LBM ont été utilisées pour modéliser des écoulements de fluide mais peu d'études traitent de phénomènes de diffusion. Les diffusions thermique et massique ont certes été modélisées par la LBM sur une morphologie réelle de bois mais seulement en 2D alors que le bois possède trois directions matérielles.

Pour ce travail de thèse, nous nous proposons donc de calculer la diffusivité massique et la conductivité thermique équivalentes 3D d'épicéa et de panneaux de fibres en couplant la méthode Lattice Boltzmann à la micro-tomographie aux rayons X. Comme ces matériaux possèdent la même phase solide, cela nous permettra de mettre en évidence l'effet de la morphologie sur les propriétés macroscopiques.

Chapitre 3

Imagerie par micro-tomographie et traitement d'images

Plusieurs matériaux de construction biosourcés ont été étudiés dans ce travail de thèse : le bois initial (BI) et le bois final (BF) d'épicéa (*Picea abies*), des panneaux de fibres à faible densité (LDF pour *Low Density Fibreboard*) et à moyenne densité (MDF pour *Medium Density Fibreboard*). Dans ce chapitre, nous présentons les résultats du travail d'imagerie réalisé par micro-tomographie et traitement d'images sur ces matériaux. Dans la partie 3.1, nous détaillons d'abord la préparation d'échantillons qui est nécessaire avant l'utilisation de la micro-tomographie aux rayons X. Cette technique permet de caractériser la structure interne d'un matériau et les images reconstruites sont présentées dans la partie 3.2. Nous décrivons ensuite, dans la partie 3.3, le traitement d'images réalisé sur ces coupes 2D pour obtenir des volumes où les phases gazeuse et solide sont segmentées. Enfin, les sélections 3D des matériaux étudiés sont présentées et analysées dans la partie 3.4.

Sommaire

3.1	Préparation des échantillons	42
3.2	Micro-tomographie aux rayons X	45
3.3	Traitement d'images	46
3.4	Volumes sélectionnés	48
3.5	Conclusion du chapitre	55

3.1 Préparation des échantillons

En micro-tomographie aux rayons X, pour obtenir des images 3D avec une haute résolution et un bon contraste de phase, il est préférable de travailler avec des échantillons cylindriques dont le diamètre est proche du diamètre que l'on veut scanner. Nous avons ainsi dû préparer des échantillons de petit diamètre issus des différents matériaux biosourcés étudiés. Selon la cohésion des matériaux, nous avons eu recours à des méthodes différentes.

Pour l'épicéa, nous avons utilisé un tour à métaux pour usiner des cylindres et réduire minutieusement leur diamètre jusqu'à quelques millimètres seulement. L'objectif était d'obtenir des scans de micro-tomographie ayant une résolution inférieure au micromètre. L'usinage des échantillons a été réalisé au LGPM, CentraleSupélec, par Patrick Perré.

Les panneaux de fibres ayant une trop faible cohésion pour être usinés au tour à métaux, nous avons utilisé la découpe laser qui évite les contraintes mécaniques. Les panneaux de LDF et MDF ont été préparés grâce à une machine de découpe laser (marque Arketype, modèle L6090, puissance 100 W), avec l'aide d'Erika Jean-Bart du laboratoire EM2C, CentraleSupélec.

Dans le cas du MDF, nous avons directement découpé au laser un panneau. La figure 3.1 présente un échantillon d'un panneau de MDF et un cylindre usiné de 5 mm de diamètre. Comme on le voit sur cette figure, les échantillons de MDF ont brûlé au niveau de la surface de découpe. Nous avons alors regardé au microscope confocal la zone endommagée par le laser. Nous avons pris soin au préalable de préparer la surface de l'échantillon en la découpant au microtome à glissière (appareil doté d'un rasoir permettant de découper de très fines tranches de matière). La figure 3.2 présente la surface d'un échantillon de MDF découpé au laser et un zoom sur le bord de l'échantillon pour mesurer la zone brûlée. Par rapport à la taille de l'échantillon (5 mm de diamètre), la zone brûlée est très faible (environ 70 μm). On estime donc que la microstructure qui sera obtenue par micro-tomographie ne sera pas affectée par ces brûlures. Dans la suite, nous optons pour cette méthode pour préparer nos échantillons.

Dans le cas du LDF, sa densité est si faible que l'air circule facilement à l'intérieur ce qui cause l'embrasement des échantillons lors de la découpe laser. Pour éviter que le panneau ne brûle, nous avons réalisé un support en aluminium qui peut être balayé par un flux d'azote. La figure 3.3 présente ce support, la tête de découpe laser et la machine de découpe laser. L'alimentation en azote se fait par le tuyau visible sur les photographies. Pour que cela fonctionne, il fallait que l'échantillon de matériau placé dans le récipient soit suffisamment petit pour qu'il y ait de l'azote au niveau de la trajectoire de coupe. Il a donc fallu pré-découper les échantillons avec une scie cloche de 2 cm de diamètre. Pour éviter que le panneau de LDF ne se délite pendant cette pré-découpe, nous avons maintenu le panneau entre deux planches et usiné très précautionneusement. La figure 3.4 présente

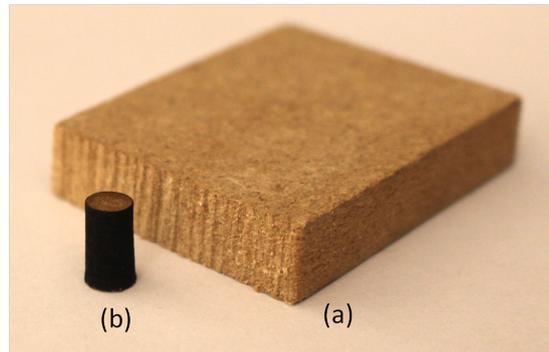


FIGURE 3.1 – Un panneau de MDF (a) est usiné par machine de découpe laser. Le cylindre obtenu (b) a un diamètre de 5 mm.

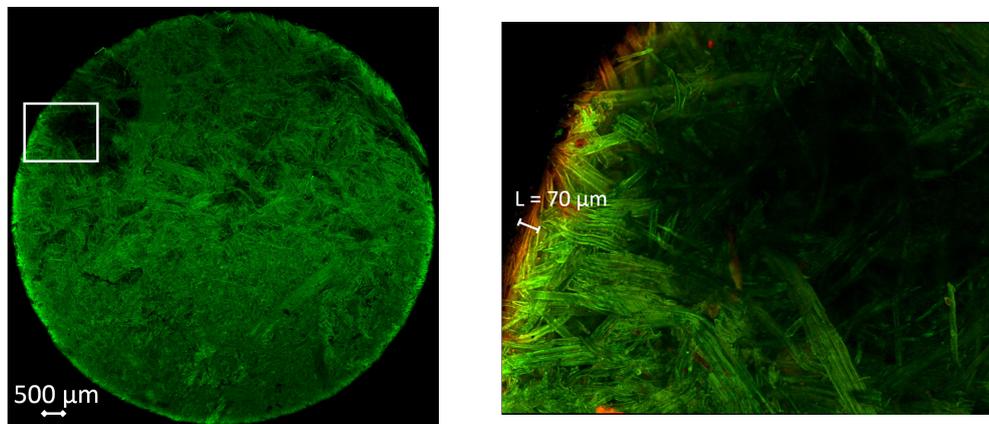


FIGURE 3.2 – Observation au microscope confocal de l'échantillon de MDF découpé au laser. À gauche, toute la surface de l'échantillon est présentée. À droite, un zoom sur le bord du cylindre est réalisé pour mesurer la zone endommagée.

un échantillon de panneau de LDF, un cylindre pré-découpé à la scie cloche de 2 cm de diamètre et le cylindre découpé au laser de 10 mm de diamètre. L'azote a permis de limiter les brûlures à la surface de découpe. La conception et la fabrication du système avec azote et la pré-découpe ont été réalisées au LGPM avec la participation de Patrick Perré, Jean Trubuil et Joel Casalinho.

Pour les deux panneaux, les paramètres de découpe laser ont été ajustés empiriquement pour découper assez profondément les panneaux tout en limitant les brûlures. Après plusieurs tests, les paramètres de découpe laser retenus sont :

- pour le LDF, $v = 70 \text{ mm s}^{-1}$ et $P = 60 \%$;
- pour le MDF, $v = 6 \text{ mm s}^{-1}$ et $P = 40 \%$;

où v est la vitesse de déplacement de la tête de laser et P est la puissance du laser utilisée, exprimée en pourcentage, la puissance nominale du laser étant de 100 W.

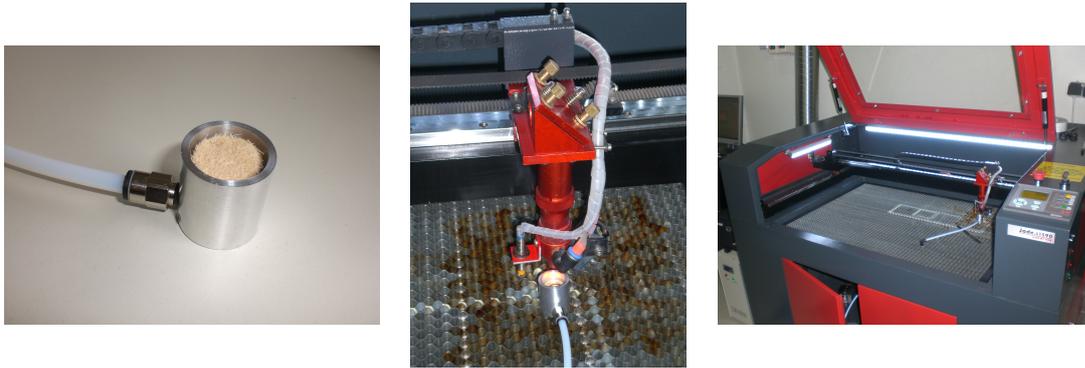


FIGURE 3.3 – Usinage du LDF. De gauche à droite : le support en aluminium contenant le cylindre de LDF pré-découpé ; le montage placé sous la tête de découpe laser ; la machine de découpe laser. Le tuyau visible sur les trois images permet d'alimenter le récipient en azote.

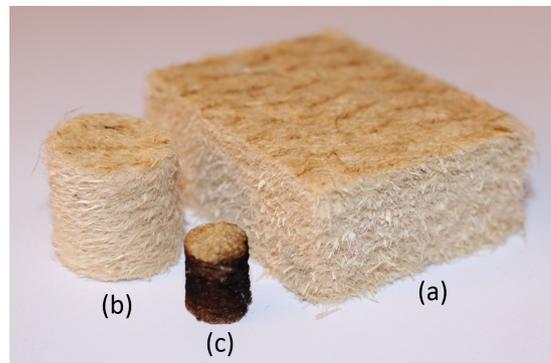


FIGURE 3.4 – Un panneau de LDF (a) est usiné par une machine de découpe laser. Le panneau de LDF est pré-découpé à la scie cloche pour obtenir un cylindre de 2 cm de diamètre (b). Le cylindre obtenu par découpe laser est de 10 mm de diamètre (c).

3.2 Micro-tomographie aux rayons X

Pour obtenir la microstructure 3D des matériaux étudiés, la micro-tomographie aux rayons X est utilisée. Cette technique d'imagerie dont le principe a été présenté au chapitre 2 est non destructive et non invasive.

Nos échantillons ont été scannés à l'ESRF (European Synchrotron Radiation Facility, ligne ID19) par l'intermédiaire de Novitom, entreprise spécialisée dans l'imagerie réalisée par la technologie synchrotron. Le mode d'analyse utilisé pour la tomographie est le contraste de phase et la reconstruction d'images est faite en estimation de phase ce qui facilite la segmentation. Cette reconstruction permet en effet d'obtenir des images où les niveaux de gris sont différents selon les phases (comme en absorption) alors que la reconstruction par contraste de phase ne fait ressortir que les interfaces entre les phases.

Selon le matériau, nous avons scanné à différentes résolutions :

- 3,05 μm pour le LDF ;
- 0,97 μm pour le MDF ;
- 0,625 μm pour l'épicéa.

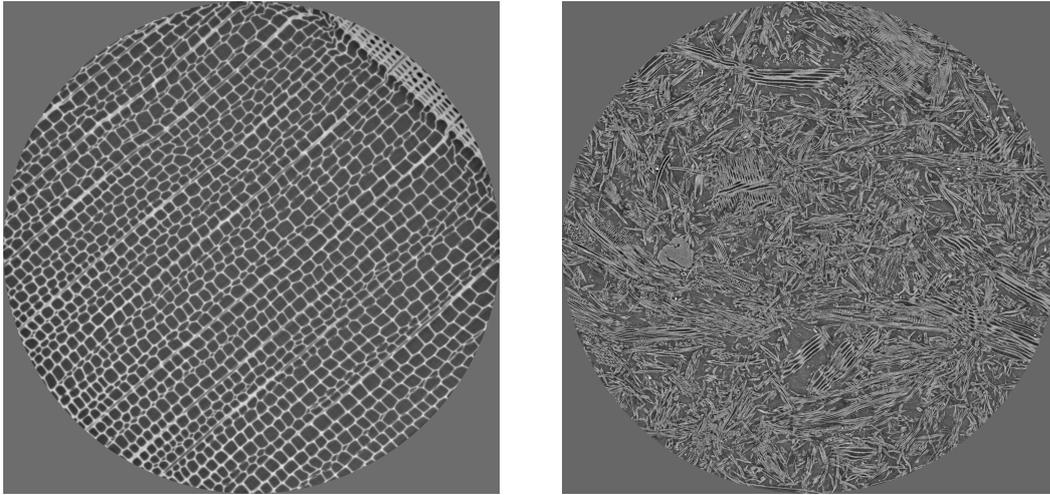
Le choix de la résolution pour chaque matériau s'est fait selon les contraintes techniques de la micro-tomographie et en fonction de la zone de scan nécessaire pour obtenir un volume représentatif de chaque matériau. Par exemple, pour pouvoir observer des ponctuations d'épicéa faisant quelques micromètres de diamètre, il fallait une résolution inférieure au micromètre. À l'inverse, pour scanner un volume assez grand du fait de la grande hétérogénéité des panneaux de LDF, nous avons choisi une résolution moins fine.

Les dimensions des volumes scannés sont :

- $3964 \times 3964 \times 4352$ voxels soit $12 \times 12 \times 13 \text{ mm}^3$ pour le LDF ;
- $4538 \times 4538 \times 2160$ voxels soit $4,4 \times 4,4 \times 2,1 \text{ mm}^3$ pour le MDF ;
- $2186 \times 2186 \times 4230$ voxels soit $1,4 \times 1,4 \times 2,6 \text{ mm}^3$ pour l'épicéa.

Un voxel (contraction de *volumetric pixel*) est l'équivalent d'un pixel en trois dimensions. Notons que le volume scanné d'épicéa contient à la fois du bois initial et du bois final.

Comme expliqué dans le chapitre 2, les images 3D reconstruites sont généralement présentées sous la forme d'une série de coupes 2D faites dans la hauteur du scan. Novitom nous a ainsi fourni, pour chaque échantillon scanné, un ensemble d'images 2D obtenues après reconstruction. La taille de ces dossiers d'images varie entre 18 et 127 Go selon le scan. La figure 3.5 présente deux exemples d'images fournies par Novitom, une coupe d'épicéa et une coupe de MDF. Le scan d'épicéa contient principalement du bois initial, seule une petite zone de bois final, caractérisé par des lumens épais, est observable en haut à droite de l'image. Ces coupes 2D et les morphologies 3D permettent une analyse qualitative mais l'un des aspects les plus intéressants des données issues de tomographie est la nature numérique des images 3D. Cela permet notamment d'extraire des mesures quan-



(a) Coupe 2D d'épicéa, résolution de $3,05 \mu\text{m}$ ($1,4 \times 1,4 \text{ mm}^2$, 2186×2186 pixels)

(b) Coupe 2D de MDF, résolution de $0,97 \mu\text{m}$ ($4,4 \times 4,4 \text{ mm}^2$, 4538×4538 pixels)

FIGURE 3.5 – Exemples d'images 2D reconstruites par Novitom. L'ensemble des coupes de chaque échantillon forme des volumes de dimension $2186 \times 2186 \times 4230$ voxels et $4538 \times 4538 \times 2160$ voxels dans les directions x , y et z , respectivement. La coupe d'épicéa présente la limite d'un cerne annuel (en haut à droite).

titatives sur la structure interne telles que les fractions volumiques des phases, comme nous le verrons dans la partie 3.3 qui suit.

Pour modéliser la diffusion sur des morphologies réelles issues de ces scans (ce qui sera traité dans le chapitre 6), il est nécessaire de réaliser un traitement d'images sur ces coupes pour, d'une part, reconstituer des images 3D et, d'autre part, distinguer la phase gazeuse de la phase solide.

3.3 Traitement d'images

Le traitement d'images des données reconstruites est réalisé avec le logiciel open source *Fiji*, package basé sur *ImageJ*. Il est illustré dans le cas d'une coupe 2D de bois initial d'épicéa sur la figure 3.6.

D'abord, l'outil *Image Sequence* est utilisé pour ouvrir plusieurs coupes 2D, qui forment ainsi un volume 3D. Pour l'épicéa, il est nécessaire de réaliser plusieurs rotations pour que les axes x , y et z de l'image 3D correspondent aux directions matérielles du bois (radiale, tangentielle et longitudinale). Sur la figure 3.6b, une rotation de la coupe 2D d'épicéa a été effectuée pour que les axes x et y de l'image correspondent aux directions radiale et tangentielle respectivement.

Ensuite, les images 3D sont rognées pour obtenir des volumes de $200 \times 200 \times 200$ voxels pour les panneaux de fibres et autour de $100 \times 150 \times 400$ voxels pour

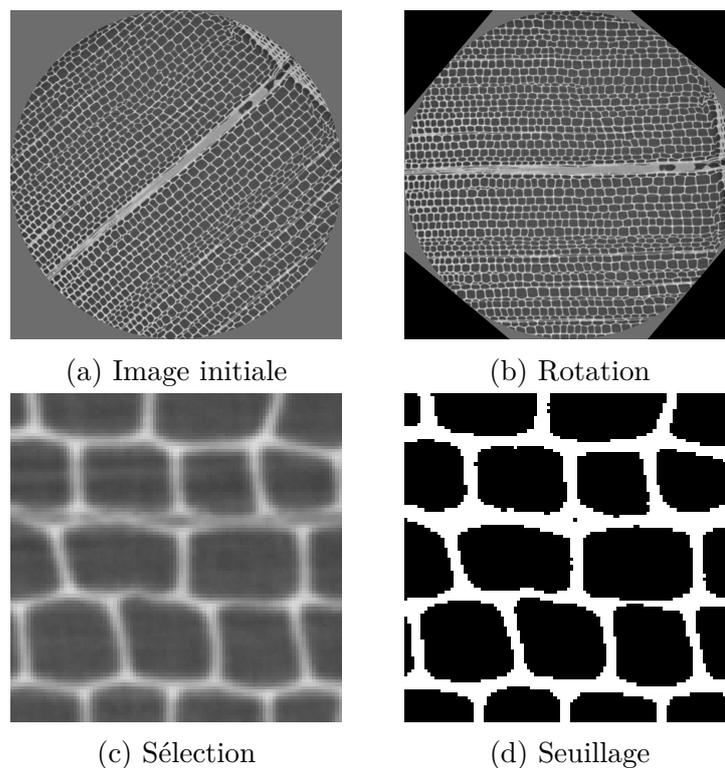


FIGURE 3.6 – Exemple de traitement d'images 2D avec *Fiji*. Une rotation de 40° est effectuée sur une coupe initiale d'épicéa (a) afin que les directions x et y correspondent aux directions radiale et tangentielle respectivement (b). Une zone de bois initial est sélectionnée (c). Enfin un seuillage est réalisé (d) pour déterminer les pixels appartenant à la phase gazeuse (noir) et les pixels appartenant à la phase solide (blanc).

les volumes d'épicéa (cf. figure 3.6c). Pour qu'un volume de $100 \times 150 \times 400$ voxels contienne un nombre suffisant de trachéides, nous avons réalisé un *binning* sur un volume de bois initial de $200 \times 300 \times 800$ voxels d'un facteur 2 dans toutes les directions. En traitement d'images, un *binning* consiste à regrouper un groupe de voxels en un seul voxel (ou un groupe de pixels en un seul pixel en 2D).

Enfin, nous avons appliqué une segmentation à tous les échantillons. Celle-ci est basée sur un seuillage global sur toutes les coupes de l'échantillon considéré et le niveau de seuillage est déterminé par *Fiji* avec la méthode des moments. On obtient une seule valeur de seuillage pour l'ensemble des coupes d'une sélection. L'histogramme présentant l'occurrence de pixels d'un niveau de gris donné de la figure 3.6c est montré figure 3.7. On attribue à tous les pixels dont la valeur est inférieure au seuil calculé par la méthode des moments la valeur 0 (blanc) et à tous les pixels situés au dessus de la limite, la valeur 255 (noir). La phase gazeuse et la phase solide sont ainsi facilement identifiées. L'image seuillée est présentée

sur la figure 3.6d. Le seuillage d'une image 3D est réalisé de la même façon, ce sont les voxels (et non plus les pixels) qui prennent les valeurs 0 ou 255. Pour les images de bois initial, nous avons vérifié que la proportion de phase solide était similaire avant et après le *binning*. Pour la morphologie BI1 présentée dans la suite du chapitre (cf. figure 3.10a), la fraction solide ϵ_s est égale à 0,296 avant le *binning* et égale à 0,291 après, soit une variation de seulement 1,6 %.

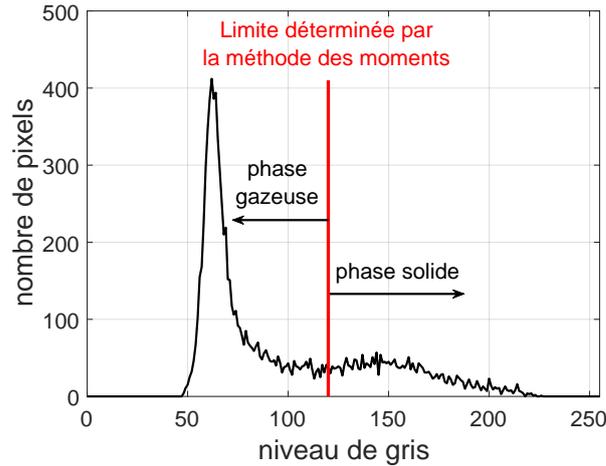


FIGURE 3.7 – Histogramme répertoriant les pixels de la figure 3.6c selon leur niveau de gris. La limite entre les pixels appartenant à la phase gazeuse et ceux appartenant à la phase solide est déterminée par *Fiji* avec la méthode des moments.

Finalement, un fichier contenant les coordonnées des voxels et les niveaux de gris correspondant (0 ou 255) est édité pour chaque sélection 3D de matériaux et défini ainsi une morphologie. Ces fichiers seront utilisés plus tard comme données d'entrée du code Lattice Boltzmann pour calculer les propriétés équivalentes des matériaux (cf. chapitre 6). Dans notre étude, un voxel de valeur 0 correspond à la phase gazeuse et un voxel de valeur 255 correspond à la phase solide.

3.4 Volumes sélectionnés

Les figures 3.8, 3.9 et 3.10 présentent les volumes sélectionnés parmi les trois échantillons de matériaux biosourcés scannés, après traitement d'images. Ces figures illustrent bien les diverses morphologies étudiées qui se différencient à la fois par la porosité du matériau et par la connectivité des pores. Dans le cas des panneaux de fibres (figures 3.8 et 3.9), la phase gazeuse est connectée. À l'inverse, sur les images de bois (figure 3.10), on observe que c'est la phase solide qui est connectée.

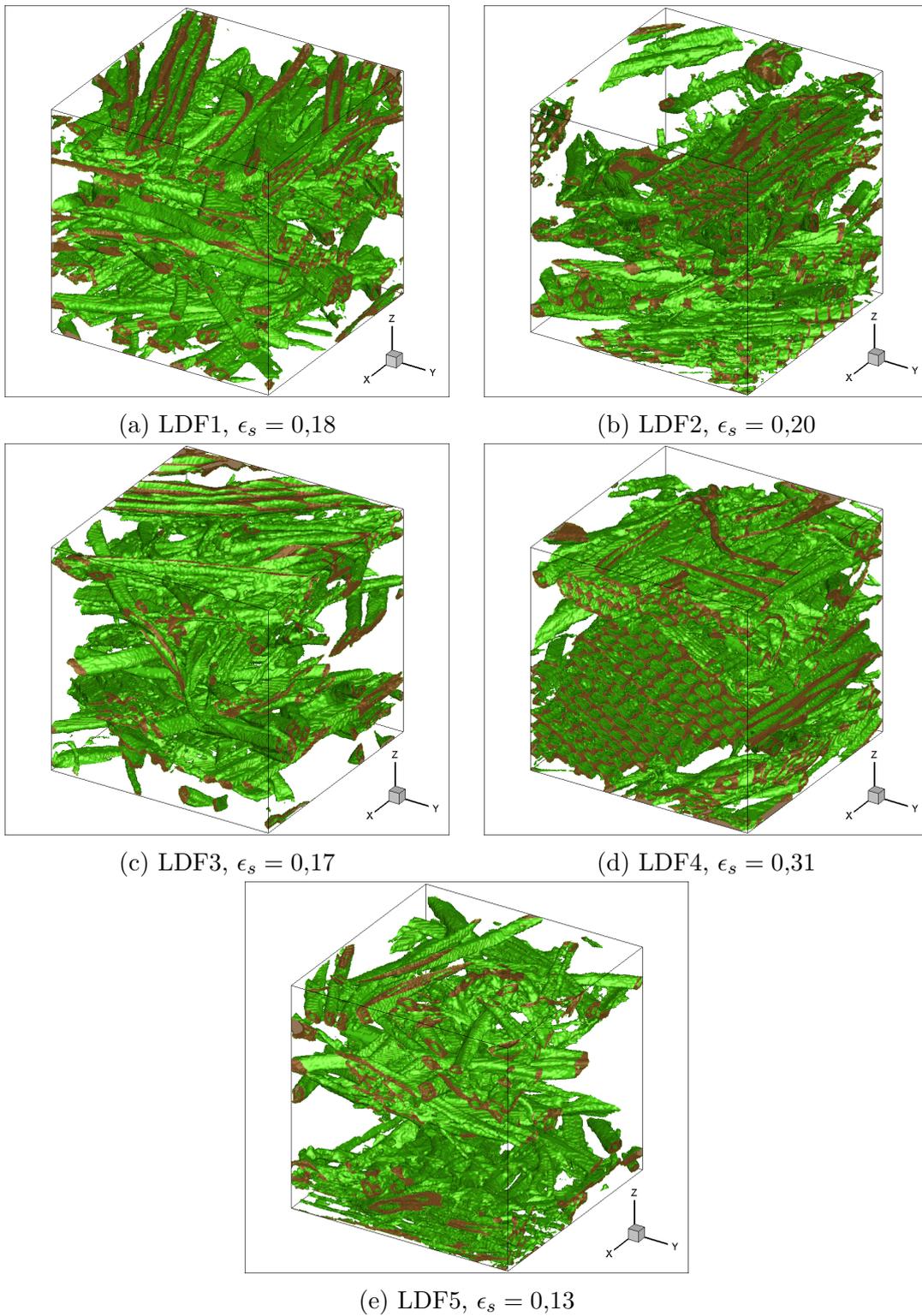


FIGURE 3.8 – Reconstruction 3D de zones réduites du LDF scanné par micro-tomographie aux rayons X. Pour toutes ces sélections, la taille est de $605 \times 605 \times 605 \mu\text{m}^3$, le nombre de voxels est de $200 \times 200 \times 200$ et la fraction solide ϵ_s est donnée pour chacune.

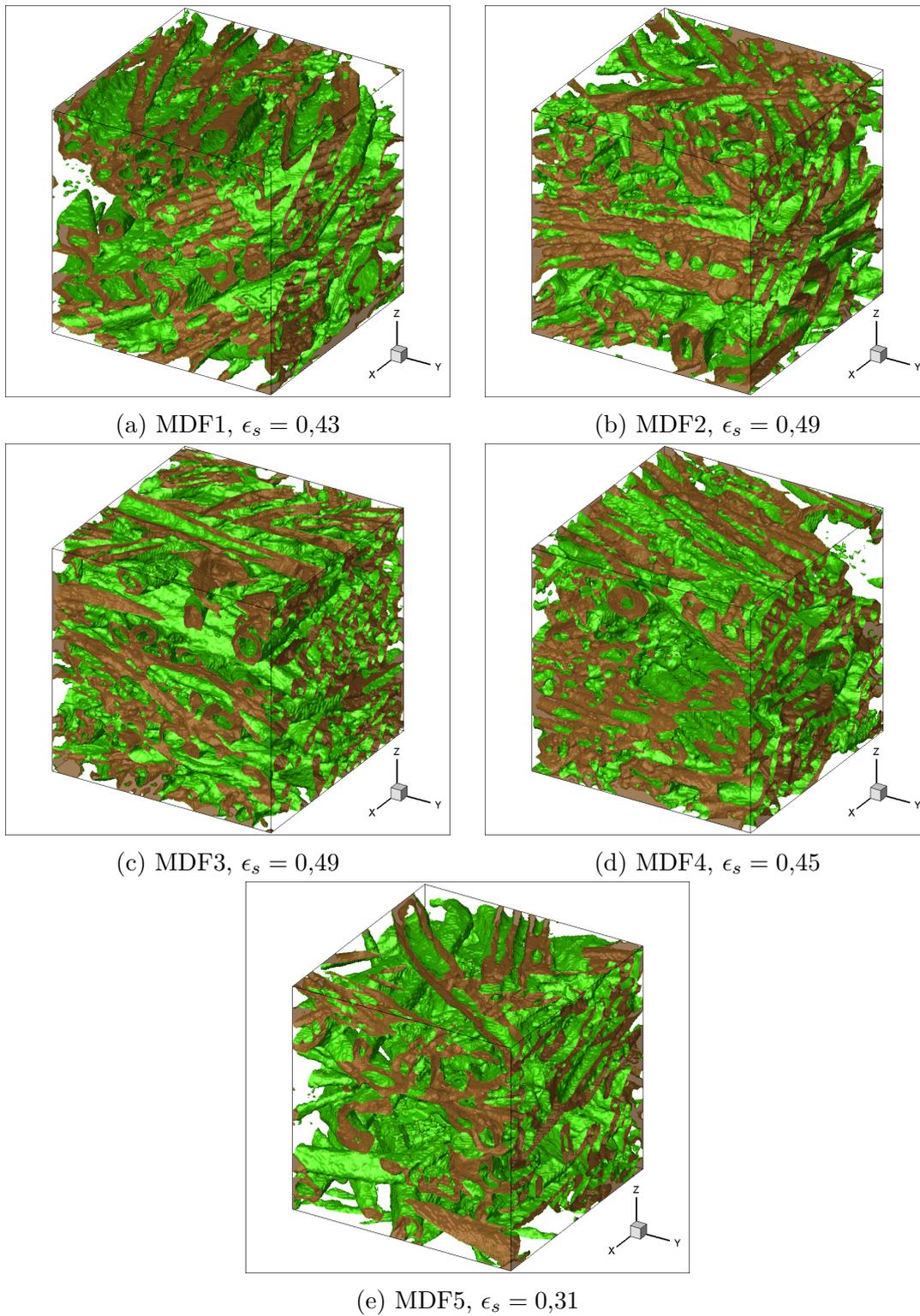


FIGURE 3.9 – Reconstruction 3D de zones réduites du MDF scanné par micro-tomographie aux rayons X. Pour toutes ces sélections, la taille est de $195 \times 195 \times 195 \mu\text{m}^3$, le nombre de voxels est de $200 \times 200 \times 200$ et la fraction solide ϵ_s est donnée pour chacune.

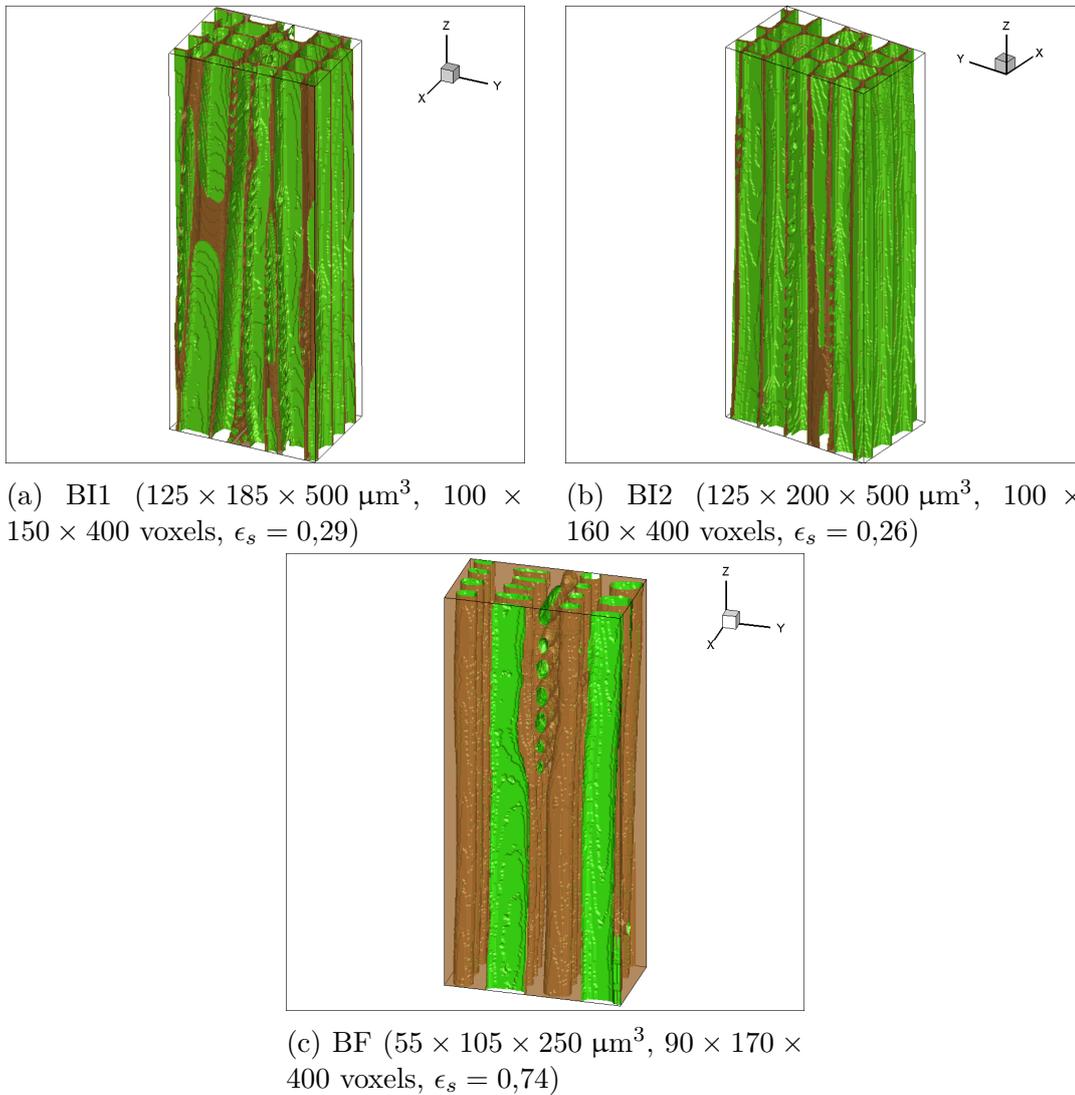


FIGURE 3.10 – Reconstruction 3D de zones réduites de l'épicéa scanné par microtomographie aux rayons X. La taille, le nombre de voxels et la fraction solide ϵ_s sont donnés pour chacune des sélections.

Les fractions solides ϵ_s sont données pour chacune des sélections sur les figures 3.8, 3.9 et 3.10 et sont récapitulées dans le tableau 3.1. Elles sont facilement déterminées après le seuillage en calculant le rapport entre les voxels appartenant à la phase solide et le nombre total de voxels :

$$\epsilon_s = \frac{\sum \text{voxel} = 255}{\sum \text{voxel}} \quad (3.1)$$

On peut classer les matériaux du moins dense au plus dense : LDF, bois initial d'épicéa, MDF, bois final d'épicéa. Les fractions solides volumiques varient de 0,13 pour le LDF le moins dense à 0,74 pour l'échantillon de bois final.

Pour chaque sélection, on peut également calculer la porosité qui est égale à $1 - \epsilon_s$. De plus, en considérant une masse volumique solide $\rho_s = 1500 \text{ kg m}^{-3}$ pour les parois des cellules [Stamm et Hansen, 1937], on peut déterminer les masses volumiques des matériaux qui sont données par $\epsilon_s \times \rho_s$. Ces grandeurs sont renseignées dans le tableau 3.1.

Matériau	fraction solide	porosité	masse volumique (kg m^{-3})
BI1	0,29	0,71	438
BI2	0,26	0,74	390
BF	0,74	0,26	1111
LDF1	0,18	0,82	269
LDF2	0,20	0,80	301
LDF3	0,17	0,83	248
LDF4	0,31	0,69	458
LDF5	0,13	0,87	193
MDF1	0,43	0,57	640
MDF2	0,49	0,51	730
MDF3	0,49	0,51	731
MDF4	0,45	0,55	676
MDF5	0,31	0,69	459

TABLE 3.1 – Fraction solide, porosité et masse volumique des différentes sélections de matériaux.

Les fractions solides du bois initial d'épicéa (0,29 et 0,26) sont 2,5 fois plus petites que celle du bois final à cause de deux effets cumulés bien connus : les parois des cellules sont plus épaisses dans le bois final que dans le bois initial et l'extension radiale des trachéides est plus petite. Les masses volumiques sont égales à environ 410 kg m^{-3} pour le bois initial et à 1111 kg m^{-3} pour le bois final.

Ces résultats pour l'épicéa sont en accord avec la littérature. En effet, Perré *et al.* [Perré *et al.*, 2015] ont calculé sur des morphologies 2D d'épicéa obtenues par

microscopie électronique à balayage environnementale des fractions volumiques de 0,40 pour le bois initial et de 0,78 pour le bois final. En utilisant aussi la micro-tomographie aux rayons X, Trtik *et al.* [Trtik *et al.*, 2007] ont trouvé que la porosité totale d'échantillons d'épicéa était de $59,8 \pm 2,5$ %. La porosité étant égale à $1 - \epsilon_s$, cela correspond à une fraction solide d'environ 0,4 ce qui se situe entre les fractions volumiques de bois initial et de bois final que l'on a calculées. Enfin, Decoux *et al.* [Decoux *et al.*, 2004] ont mesuré par densitométrie aux rayons X les variations de densité le long d'un cerne d'épicéa. Ces mesures sont reportées sur la figure 3.11. La longueur du cerne étudié est de $2850 \mu\text{m}$ et il est divisé en 20 parties égales de $142,5 \mu\text{m}$ de longueur dans la direction radiale. Au milieu du cerne (là où ont été sélectionnés les volumes de bois initial BI1 et BI2), la masse volumique est d'environ 400 kg m^{-3} comme on peut l'observer sur la figure 3.11 à une position dans le cerne d'environ $1400 \mu\text{m}$. On remarque également sur cette figure que la masse volumique varie beaucoup plus dans le bois final que dans le bois initial, le seuil de densité entre les deux étant généralement défini comme la moyenne du minimum et du maximum de densité de chaque cerne [Mothe *et al.*, 1998]. La masse volumique d'une section de bois final dépendra donc énormément de sa localisation dans le cerne. La partie la plus proche de la limite annuelle du cerne (point le plus à droite de la figure 3.11) correspond très bien à notre sélection de bois final BF qui mesure $55 \mu\text{m}$ dans la direction radiale et est située à la limite du cerne. La masse volumique mesurée par Decoux *et al.* est de 1027 kg m^{-3} , celle de la sélection BF est de 1111 kg m^{-3} . Ces mesures de masse volumique de bois initial et de bois final sont très proches de celles que nous avons calculées ce qui valide les fractions solides que nous avons obtenues.

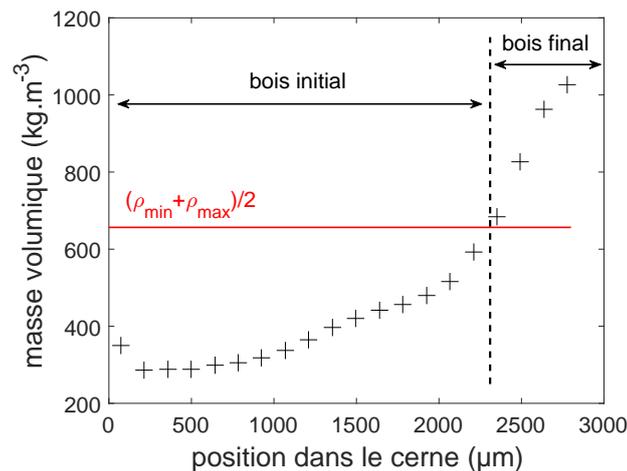


FIGURE 3.11 – Densitométrie aux rayons X d'un cerne d'épicéa. Les valeurs tracées sont issues de [Decoux *et al.*, 2004]. On définit généralement la limite entre bois initial et bois final à l'endroit du cerne où la masse volumique est égale à la moyenne entre les masses volumiques minimale et maximale le long du cerne.

Pour le LDF – et dans une moindre mesure pour le MDF – la fraction solide peut varier du simple au double. Cela s'explique par la grande hétérogénéité du matériau et le fait que l'on a délibérément choisi des zones comportant de nombreuses fibres ou, inversement, comportant une grande proportion de phase gazeuse. La figure 3.8d montre par exemple une zone avec de gros amas de fibres et donc une haute densité.

Avec la même masse volumique des parois de cellules que celle utilisée pour l'épicéa, les masses volumiques des panneaux de fibres sont d'environ 300 kg m^{-3} pour le LDF et de 650 kg m^{-3} pour le MDF. Comme leur masse volumique dépend principalement des conditions de fabrication, il est difficile de réaliser une comparaison avec les données trouvées dans la littérature. Nous avons donc directement estimé la masse volumique des panneaux étudiés en mesurant la masse et le volume d'échantillons provenant des mêmes panneaux que les échantillons scannés. Nous trouvons 156 kg m^{-3} pour le LDF et 612 kg m^{-3} pour le MDF. La masse volumique ainsi mesurée du MDF est proche de celles calculées sur les images 3D. La différence de masse volumique observée pour le LDF peut s'expliquer en partie par la grande hétérogénéité à l'intérieur du matériau. En outre, on remarque que la masse volumique de LDF mesurée est inférieure aux cinq valeurs estimées. Cela peut s'expliquer par la résolution du scan de micro-tomographie, égale à $3 \mu\text{m}$, bien plus faible que les résolutions des scans d'épicéa et de MDF, inférieures au micromètre. Cette résolution de $3 \mu\text{m}$ ne semble pas suffisante pour décrire l'épaisseur des parois des fibres qui est a priori surestimée.

Finalement, comme les masses volumiques calculées sur les images sont satisfaisantes, c'est toute la méthodologie utilisée pour définir des morphologies 3D qui est validée. En effet, l'excellente résolution, le bon contraste et le bruit faible assurés par la micro-tomographie X synchrotron facilite le traitement d'images ultérieur et permet de distinguer précisément la phase solide de la phase gazeuse. Ajoutons que la segmentation est plus difficile sur des images 2D classiques :

- pour des images optiques, la résolution est trop faible pour que la segmentation soit précise. Une calibration de la méthode est nécessaire dans ce cas [Gonçales *et al.*, 1996] ;
- pour les images obtenues par microscopie électronique à balayage, la résolution est meilleure mais les divers artefacts doivent être soigneusement traités : effets de bord sur les contours des parois à cause des charges électriques, déformation de l'échantillon à cause de la déshydratation des parois des cellules (sauf avec un microscope électronique à balayage environnemental [Almeida *et al.*, 2014]).

Nous formulons cependant une réserve quant au cas du LDF du fait de sa grande hétérogénéité. Pour obtenir un volume élémentaire représentatif (VER), il faudrait sélectionner des volumes de taille croissante et constater la convergence des propriétés macroscopiques calculées sur ces volumes quand leur taille augmente. Comme le LDF est très hétérogène, il faudrait pouvoir sélectionner un

volume très grand pour qu'il soit vraiment représentatif du matériau. Le temps nécessaire au traitement d'images et aux calculs de diffusion étant déjà importants, nous n'avons pas pu le faire dans le cadre de ce travail de thèse. Nous avons pris le parti de réaliser des simulations sur cinq échantillons différents de LDF pour quantifier la variabilité au sein du matériau.

3.5 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté la méthode de préparation des échantillons qui est nécessaire avant la réalisation d'une micro-tomographie aux rayons X. L'épicéa a été usiné à l'aide d'un tour à métaux, les panneaux de fibres ont été usinés par une machine de découpe laser. En outre, nous avons conçu et fabriqué un montage permettant de découper au laser le LDF en évitant son embrasement. Nous avons ensuite présenté les résultats de la micro-tomographie avec les volumes scannés, la résolution obtenue ainsi que des exemples d'images 2D reconstruites. Nous avons également détaillé le traitement d'images. Celui-ci a été réalisé avec *Fiji* et le seuillage a permis de segmenter les phases gazeuse et solide. Enfin, nous avons sélectionné plusieurs volumes des matériaux biosourcés étudiés et avons présenté leur morphologie et leur fraction solide. Les masses volumiques estimées sont en accord avec la littérature et les mesures effectuées.

Dans le chapitre suivant, on présente les aspects théoriques de la méthode Lattice Boltzmann. Les images réalisées dans ce chapitre 3 serviront de données d'entrée au code LB dans le chapitre 6.

Chapitre 4

Théorie : la méthode Lattice Boltzmann

Dans ce chapitre, nous présentons les aspects théoriques de la méthode Lattice Boltzmann (méthode LB ou LBM). Dans la partie 4.1, nous nous intéressons d'abord aux différentes échelles de description d'un système pour situer la LBM parmi les autres méthodes numériques. Ensuite, dans la partie 4.2, nous expliquons le principe général de la méthode en présentant son origine, la description discrète du milieu et les équations discrètes de Boltzmann. Dans la partie 4.3, on se concentre sur la modélisation de l'équation de la diffusion par la LBM car c'est ce phénomène de transfert qui nous intéresse pour notre étude. On présente aussi les liens entre l'échelle macroscopique et l'échelle de description de la méthode LB dans la partie 4.4, ceci permet de déterminer des grandeurs macroscopiques à partir de la représentation discrète. Enfin, nous exposons différentes façons de fixer des conditions aux limites de Dirichlet et Neumann dans la partie 4.5.

Sommaire

4.1	Les différentes échelles de description d'un système .	58
4.2	Principe général de la méthode	59
4.2.1	Origine de la méthode	59
4.2.2	Description discrète du milieu et schémas de vitesse .	59
4.2.3	Équation de Boltzmann discrète et approximation BGK	61
4.3	Modélisation de l'équation de la diffusion par la LBM	62
4.4	Relation entre échelles macroscopique et mésoscopique	63
4.5	Conditions aux limites	64
4.5.1	Fonctions de distribution inconnues aux limites	65
4.5.2	Conditions aux limites de Dirichlet	65
4.5.3	Conditions aux limites de Neumann	67
4.5.4	Cas des coins	69
4.6	Conclusion du chapitre	69

4.1 Les différentes échelles de description d'un système

La description d'un système peut se faire à différentes échelles. À l'échelle microscopique, la matière est considérée comme discontinue alors qu'à l'échelle macroscopique, la matière est considérée comme continue. La méthode Lattice Boltzmann se situe entre ces deux grandes échelles, on parle d'échelle mésoscopique. À cette échelle, il est encore possible de définir les grandeurs thermodynamiques macroscopiques (pression, température,...), la matière est considérée comme homogène et les moyennes statistiques ont un sens [Qadri, 2008].

Le comportement d'un fluide peut s'étudier à chacune de ces échelles ce qui correspond à des méthodes numériques différentes. À l'échelle microscopique, la dynamique moléculaire décrit le mouvement de chaque molécule considérée. Étudier le comportement macroscopique d'un fluide en s'appuyant sur le mouvement microscopique de chacune des molécules qui le composent est trop coûteux numériquement, la méthode LB considère donc des groupes de molécules et réduit leurs possibilités de déplacement en les confinant aux nœuds d'un réseau (*lattice* en anglais). Enfin, à l'échelle macroscopique, on utilise les méthodes de type volumes finis, différences finies et éléments finis qui reposent sur une discrétisation des équations macroscopiques de Navier-Stokes. Ceci est synthétisé sur la figure 4.1.

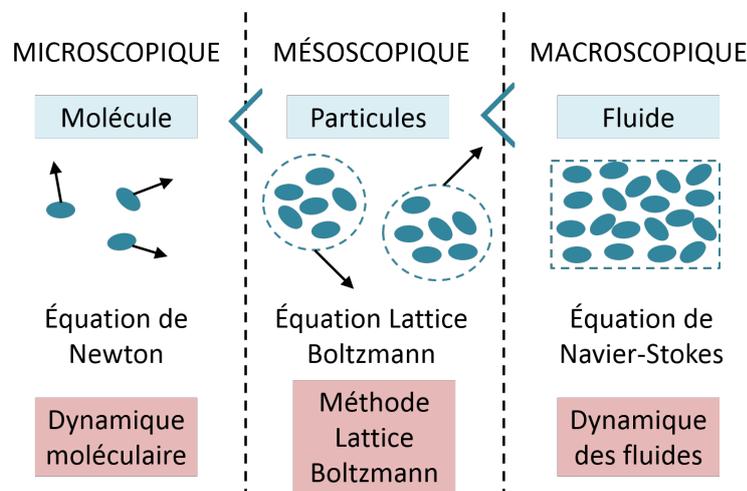


FIGURE 4.1 – Domaines d'études, équations et méthodes de résolution suivant les différentes échelles (figure adaptée de [Walther, 2016]).

Contrairement à ces méthodes traditionnelles de CFD (*Computational Fluid Dynamics*), la LBM est une méthode « ascendante » ou « émergente » où le comportement macroscopique d'un fluide ou d'un solide est déduit du mouvement discret des particules (propagation et collision) [Succi, 2001]. En effet, les équations macroscopiques peuvent être déduites des équations discrètes de la LBM

grâce à un développement asymptotique [Higuera, 1990].

4.2 Principe général de la méthode

4.2.1 Origine de la méthode

La méthode LB est issue de la théorie cinétique des gaz de Boltzmann. L'idée fondamentale de la théorie cinétique est que les fluides sont constitués d'un grand nombre de particules qui se déplacent suivant un mouvement aléatoire. L'échange de quantité de mouvement et d'énergie est obtenu par des collisions élastiques entre les particules et la propagation de ces particules. Ce processus est modélisé par l'équation de transport de Boltzmann :

$$\frac{\partial f(\vec{x}, \vec{u}, t)}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} f(\vec{x}, \vec{u}, t) = \Omega(f) \quad (4.1)$$

où la fonction de distribution $f(\vec{x}, \vec{u}, t)$ d'une particule simple représente la probabilité de trouver au temps t une particule à la position \vec{x} et ayant une vitesse \vec{u} . L'opérateur de collision $\Omega(f)$ caractérise le taux d'évolution de la fonction de distribution f dû aux collisions entre particules. Le deuxième terme de gauche représente la modification de la fonction de distribution due au mouvement des particules (dans le cas où elles ne sont soumises à aucune force).

La densité du fluide ρ , la vitesse macroscopique \vec{v} et l'énergie interne ϵ peuvent être obtenues par la fonction de distribution f :

$$\begin{cases} \rho = \int m_p f du \\ \rho \vec{v} = \int m_p f \vec{u} du \\ \rho \epsilon = \int m_p f \frac{(\vec{u} - \vec{v})^2}{2} du \end{cases} . \quad (4.2)$$

avec m_p la masse d'une particule.

La méthode LB simplifie la théorie de Boltzmann en réduisant le nombre de particules, en limitant leur position aux nœuds d'un réseau et en discrétisant les vitesses autorisées.

4.2.2 Description discrète du milieu et schémas de vitesse

Dans la méthode Lattice Boltzmann, les particules sont confinées aux nœuds d'un réseau (aussi appelé grille ou maillage) régulier, c'est-à-dire que les pas d'espace dans les deux ou trois directions considérées sont égaux ($\delta x = \delta y = \delta z$). À chaque pas de temps, les particules se déplacent de proche en proche sur les nœuds du réseau selon un schéma de vitesses discrètes et échangent leur énergie par collision.

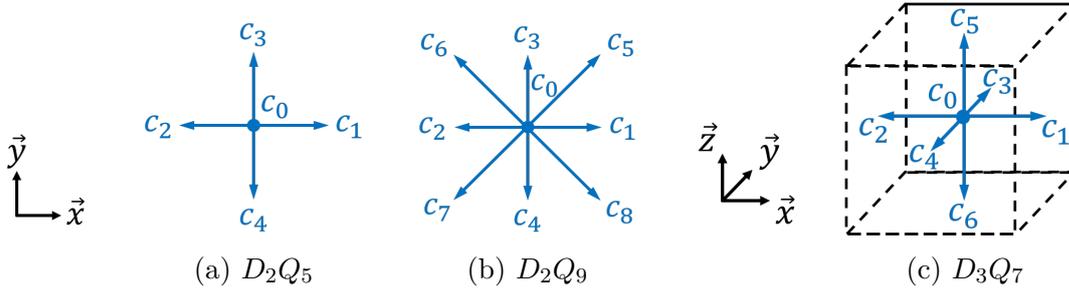


FIGURE 4.2 – Schémas de vitesse utilisés.

Schéma	k	\vec{c}_k	w_k	a
D_2Q_5	0	$c(0,0)$	$1/3$	3
	1,2,3,4	$c(\pm 1,0), c(0, \pm 1)$	$1/6$	
D_2Q_9	0	$c(0,0)$	$4/9$	3
	1,2,3,4	$c(\pm 1,0), c(0, \pm 1)$	$1/9$	
	5,6,7,8	$c(\pm 1, \pm 1)$	$1/36$	
D_3Q_7	0	$c(0,0,0)$	$1/4$	4
	1,2,3,4,5,6	$c(\pm 1,0,0), c(0, \pm 1,0), c(0,0, \pm 1)$	$1/8$	

TABLE 4.1 – Caractéristiques des schémas de vitesse utilisés, $c = \frac{\delta x}{\delta t} = \frac{\delta y}{\delta t} = \frac{\delta z}{\delta t}$.

Remarque : la LBM impose un lien entre les échelles de temps et d'espace : à chaque pas de temps δt , les particules se déplacent d'un pas d'espace δx . Les particules se déplacent ainsi à la vitesse $c = \frac{\delta x}{\delta t}$.

La terminologie utilisée dans le cadre de la méthode LB pour définir les schémas de vitesse est $D_N Q_M$ où N représente la dimension du problème (1 pour 1D, 2 pour 2D ou 3 pour 3D) et M renseigne sur le nombre de liens entre nœuds et ainsi le nombre de vitesses \vec{c}_k . Selon la complexité du problème physique à résoudre (écoulement, diffusion pure, etc.), le nombre de vitesses requises pour modéliser le comportement macroscopique est plus ou moins élevé.

Pour ce travail de thèse, nous avons principalement utilisé trois schémas de vitesse : D_2Q_5 , D_2Q_9 et D_3Q_7 . Ces trois schémas sont illustrés sur la figure 4.2. La vitesse \vec{c}_0 signifie que la particule reste au repos et ne se propage pas. Les caractéristiques des trois schémas – les vitesses \vec{c}_k , les facteurs de pondération w_k de l'équation (4.11) et le facteur a de l'équation (4.12) – sont données dans le tableau 4.1. Les facteurs w_k représentent une pondération constante, relative à chaque direction de propagation. On remarque que dans le schéma D_2Q_9 les w_k relatifs aux vitesses diagonales sont les plus faibles. Cela signifie que les déplacements diagonaux (longs) sont moins probables que les autres (courts).

4.2.3 Équation de Boltzmann discrète et approximation BGK

La méthode Lattice Boltzmann repose sur une description spatiale discrète. La probabilité qu'une particule du réseau se propage dans la direction k est donnée par la fonction de distribution discrète $f_k(\vec{x}, t)$, $k = 0 \dots M$. L'équation de Boltzmann (4.1) peut alors être écrite sous sa forme discrète :

$$\frac{\partial f_k(\vec{x}, t)}{\partial t} + \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla} f_k(\vec{x}, t) = \Omega_k(f), \quad (4.3)$$

ce qui peut être approximé par :

$$\frac{f_k(\vec{x}, t + \delta t) - f_k(\vec{x}, t)}{\delta t} + \vec{c}_k \cdot \frac{f_k(\vec{x} + \delta \vec{x}, t + \delta t) - f_k(\vec{x}, t + \delta t)}{\delta \vec{x}} = \Omega_k(f), \quad (4.4)$$

avec $\vec{c}_k = \frac{\delta \vec{x}}{\delta t}$, on obtient :

$$\frac{f_k(\vec{x} + \delta \vec{x}, t + \delta t) - f_k(\vec{x}, t)}{\delta t} = \Omega_k(f). \quad (4.5)$$

Pour l'opérateur de collision $\Omega_k(f)$, on utilise l'approximation BGK (Bhatnagar-Gross-Krook) très répandue [Bhatnagar *et al.*, 1954]. Cette approche considère que la collision correspond à une relaxation vers un état d'équilibre local (avec un temps de relaxation unique), soit :

$$\Omega_k(f) = -\frac{1}{\tau} [f_k(\vec{x}, t) - f_k^{eq}(\vec{x}, t)] \quad (4.6)$$

où τ est le temps de relaxation qui correspond au temps moyen entre deux collisions et $f_k^{eq}(\vec{x}, t)$ est la fonction de distribution d'équilibre au point \vec{x} et au temps t . L'équation (4.6) signifie qu'après la collision, la fonction de distribution relaxe vers une approximation discrète de la distribution d'équilibre de Maxwell-Boltzmann en un temps de relaxation τ .

En introduisant le facteur de relaxation $\omega = \delta t / \tau$ qui représente la fréquence de collision des particules sur un pas de temps, on obtient l'équation décrivant explicitement l'évolution spatio-temporelle des fonctions de distribution :

$$f_k(\vec{x} + \delta \vec{x}, t + \delta t) = f_k(\vec{x}, t) - \omega [f_k(\vec{x}, t) - f_k^{eq}(\vec{x}, t)]. \quad (4.7)$$

Numériquement, l'équation (4.7) conduit aux deux principales étapes de la méthode Lattice Boltzmann :

— la collision

$$f_k(\vec{x}, t + \delta t) = f_k(\vec{x}, t)(1 - \omega) + \omega f_k^{eq}(\vec{x}, t) \quad (4.8)$$

— et la propagation

$$f_k(\vec{x} + \delta \vec{x}, t + \delta t) = f_k(\vec{x}, t + \delta t). \quad (4.9)$$

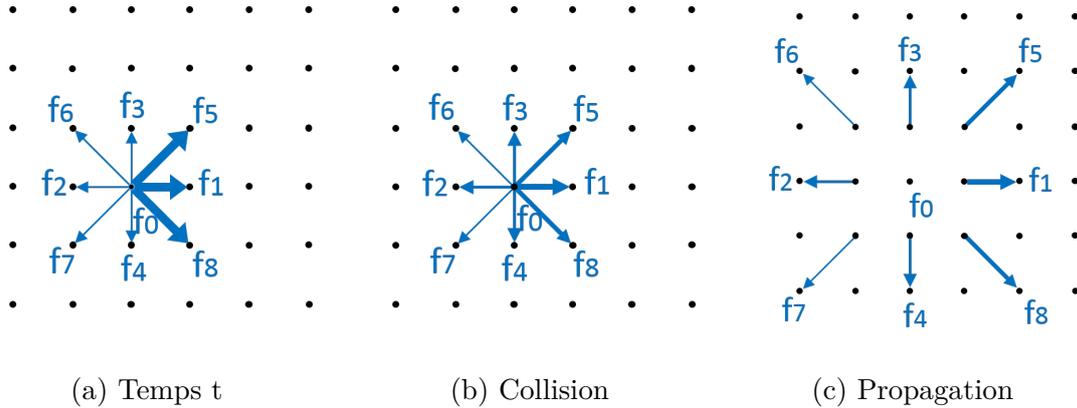


FIGURE 4.3 – Les principales étapes de la LBM dans le cas d'un schéma D_2Q_9 . L'épaisseur des flèches schématise la valeur des fonctions de distribution f_k .

Ces deux étapes sont illustrées sur la figure 4.3 dans le cas d'un schéma D_2Q_9 . À chaque instant t , il est nécessaire de calculer les valeurs des fonctions de distribution sur l'ensemble du réseau, en particulier sur ses bords. Pour compléter un pas de temps, les conditions aux limites (présentées dans la partie 4.5) doivent donc être appliquées après les étapes de collision et de propagation.

4.3 Modélisation de l'équation de la diffusion par la méthode LB

L'équation de diffusion standard en 3D pour le champ normalisé de température ou de masse est :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) \quad (4.10)$$

où α (supposé constant) est le coefficient de diffusion thermique ou massique local et Ψ est la variable macroscopique (champ de température θ ou de masse X). Dans le cas de la diffusion thermique, $\alpha = \lambda / (\rho c_p)$ avec λ la conductivité thermique, ρ la masse volumique et c_p la chaleur spécifique massique. Pour la diffusion massique, $\alpha = D^* \times D_{air}$ avec D^* la diffusivité massique adimensionnée qui correspond au rapport entre la diffusivité du matériau considéré et la diffusivité de l'air [Perré et Turner, 2005] et D_{air} la diffusivité de l'air. On utilise la méthode Lattice Boltzmann pour résoudre l'équation (4.10) sur un milieu rectangulaire $[x_1, x_m] \times [y_1, y_n]$ ou parallélépipédique $[x_1, x_m] \times [y_1, y_n] \times [z_1, z_p]$.

Remarque : dans le cas de la diffusion de chaleur sur un milieu hétérogène avec la méthode LB, le produit ρc_p est supposé être le même pour les deux milieux.

Ceci n'est pas un problème pour notre étude puisque nous utilisons uniquement la solution en régime permanent pour déterminer des propriétés équivalentes de matériaux. Dans nos simulations, nous prendrons $\rho c_p = 1 \text{ W s m}^{-3} \text{ K}^{-1}$, sauf mention contraire.

La forme de la fonction de distribution d'équilibre varie selon le type de problème. Pour un problème de diffusion, on a [Mohammad, 2007] :

$$f_k^{eq} = w_k \Psi \quad (4.11)$$

où les w_k sont les facteurs constants de pondération relatifs à la direction de propagation, tels que $\sum_k w_k = 1$, et Ψ est la variable macroscopique normalisée (champ de température θ ou de masse X).

Il a été montré que les schémas D_2Q_5 et D_3Q_7 étaient suffisants pour modéliser l'équation de la diffusion avec une bonne précision [Fang *et al.*, 2016]. Dans l'annexe A, nous démontrons également qu'il est possible de retrouver l'équation de la diffusion à partir de l'équation de Lattice Boltzmann (équation (4.7)) avec le modèle défini par l'équation (4.11) et le schéma D_2Q_5 . Nous utiliserons le schéma D_3Q_7 pour calculer les propriétés équivalentes de nos échantillons dans le chapitre 6.

4.4 Relation entre échelles macroscopique et mésoscopique

L'équation de diffusion peut être déduite de l'équation de la LBM en utilisant l'expansion de Chapman-Enskog [Higuera, 1990] comme démontré dans l'annexe A. La relation entre les échelles macroscopique et mésoscopique est la suivante :

$$\alpha = \frac{\delta x^2}{a \delta t} \left(\frac{1}{\omega} - \frac{1}{2} \right) \quad (4.12)$$

où a est un facteur dépendant du schéma de vitesse, ses valeurs sont données dans le tableau 4.1. Pour des raisons de stabilité numérique, le facteur de relaxation ω doit respecter la condition suivante : $0 < \omega < 2$ [Succi, 2001].

De plus, les quantités macroscopiques normalisées, le scalaire Ψ et son flux associé $\vec{\phi}$, peuvent être calculées de la façon suivante [D'Orazio *et al.*, 2004, Zhao *et al.*, 2009] :

$$\Psi = \sum_k f_k, \quad (4.13)$$

$$\vec{\phi} = \left(\frac{1}{\omega} - \frac{1}{2} \right) \omega \sum_k \vec{e}_k f_k \quad (4.14)$$

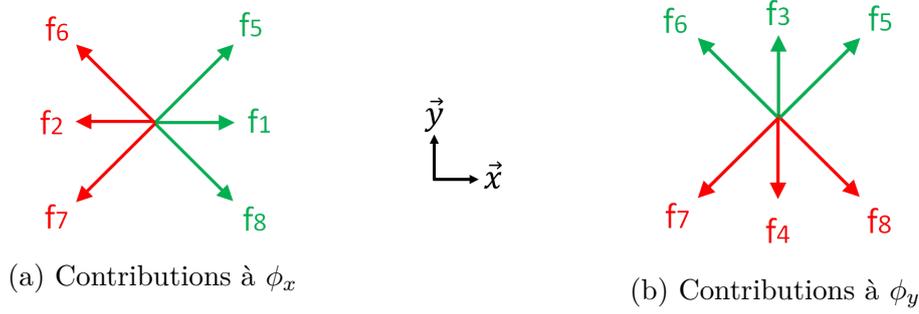


FIGURE 4.4 – Contributions positives et négatives aux flux macroscopiques ϕ_x et ϕ_y pour un schéma D_2Q_9 . Les f_k à contribution positive sont en vert, les f_k à contribution négative sont en rouge.

où les vecteurs \vec{e}_k sont les vecteurs vitesse unitaires. La figure 4.4 illustre les contributions positives et négatives des fonctions de distribution aux composantes du flux $\vec{\phi}$ défini par l'équation (4.14).

Pour le schéma D_2Q_9 par exemple, on a :

$$\phi_x = \left(\frac{1}{\omega} - \frac{1}{2}\right) \omega [f_1 + f_5 + f_8 - f_2 - f_6 - f_7], \quad (4.15)$$

$$\phi_y = \left(\frac{1}{\omega} - \frac{1}{2}\right) \omega [f_3 + f_5 + f_6 - f_4 - f_7 - f_8]. \quad (4.16)$$

En diffusion thermique, le flux macroscopique dimensionné a la forme suivante :

$$\vec{\Phi} = (\Psi_{max} - \Psi_{min}) \rho c_p \frac{\delta x}{\delta t} \vec{\phi}. \quad (4.17)$$

avec Ψ_{max} et Ψ_{min} les valeurs maximale et minimale que peut prendre le scalaire Ψ sur le domaine.

4.5 Conditions aux limites

Les conditions aux limites jouent un rôle primordial dans la définition du problème à résoudre. Cette étape nécessite un traitement spécifique dans la méthode Lattice Boltzmann. En plus des étapes de collision et de propagation présentées dans la partie 4.2.3, les conditions aux limites doivent être appliquées de façon appropriée pour compléter un pas de temps.

Dans la LBM, les conditions aux limites sont imposées via les fonctions de distribution et constituent l'un des grands sujets de réflexion autour de la méthode [Chen *et al.*, 1996, Zou et He, 1997, Kuo et Chen, 2009]. En effet, il n'y a pas de lien intuitif entre celles-ci et la grandeur macroscopique que l'on veut imposer, simplement parce qu'il y a plus d'inconnues (fonctions de distribution) que de

conditions (valeur macroscopique du scalaire ou du flux). Ceci explique pourquoi il y a différentes façons de traiter les fonctions de distribution aux frontières pour qu'elles reflètent une condition aux limites macroscopique donnée.

On présente dans cette partie les conditions aux limites utilisées dans ce travail de thèse. On étudie uniquement des conditions dites *on-grid* où la frontière est située sur le premier rang de nœuds du domaine (elles s'opposent aux conditions dites *mid-grid* où la frontière est située entre les deux premiers rangs du domaine). On illustre notre approche avec le schéma D_2Q_9 car celui-ci est facile à représenter (modèle 2D) et qu'il est général (présence des vitesses diagonales). Ainsi ce qui est exposé est facilement transposable à d'autres schémas.

4.5.1 Fonctions de distribution inconnues aux limites

À chaque pas de temps, la méthode Lattice Boltzmann occasionne un défaut d'information aux frontières du domaine. Définir des conditions aux limites avec la méthode LB revient à recréer des fonctions de distribution pour imposer la grandeur macroscopique voulue aux bords du réseau.

Aux limites, les fonctions de distribution f_k liées aux vitesses orientées vers l'extérieur du domaine sont connues grâce à l'étape de propagation. À l'inverse, les fonctions de distribution liées aux vitesses orientées vers l'intérieur du domaine sont inconnues. Ceci est illustré sur la figure 4.5 avec les exemples des frontières *ouest* et *sud* et du coin *nord-est*. Par exemple, au niveau de la frontière *ouest*, les distributions f_2, f_3, f_4, f_6 et f_7 sont connues par propagation alors que les distributions f_1, f_5 et f_8 sont inconnues et doivent être déterminées. Afin d'imposer les conditions aux limites macroscopiques voulues, certaines méthodes traitent uniquement les fonctions de distribution inconnues alors que d'autres traitent également les fonctions de distribution connues (toutes ou seulement certaines).

On présente dans la suite de cette partie une méthode pour fixer une condition aux limites de Dirichlet (cf. partie 4.5.2) et trois méthodes pour fixer une condition aux limites de Neumann (cf. partie 4.5.3). On explique également pourquoi les coins du domaine nécessitent un traitement particulier dans la partie 4.5.4.

4.5.2 Conditions aux limites de Dirichlet

Une condition aux limites de Dirichlet est imposée à une équation différentielle ou à une équation aux dérivées partielles lorsque l'on spécifie les valeurs que la solution doit vérifier sur les frontières du domaine. Prenons comme exemple la frontière *ouest* et fixons : $\Psi(x=0,t) = \Psi_0$.

Comme il y a plus de fonctions de distribution inconnues que de conditions aux limites imposées, on formule l'hypothèse suivante pour réduire le problème à une seule inconnue : les f_k inconnues participent dans la même proportion que pour une distribution à l'équilibre à imposer le scalaire voulu. On cherche

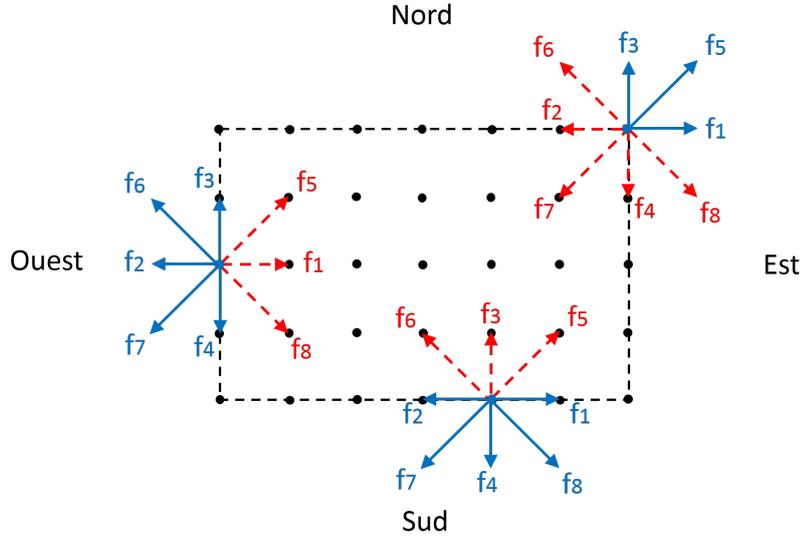


FIGURE 4.5 – Fonctions de distribution connues par la propagation (bleu) et inconnues (rouge) qu’il faut implémenter lors de l’application des conditions aux limites

ainsi à déterminer une variable fictive β telle que, pour toutes les fonctions de distribution inconnues, on ait :

$$f_k = w_k \beta. \quad (4.18)$$

En sommant les fonctions d’équilibre inconnues, on obtient :

$$\sum_{\text{inconnu}} f_k = \sum_{\text{inconnu}} w_k \beta. \quad (4.19)$$

De plus, l’équation (4.13) nous donne sur la frontière *ouest* :

$$\sum_k f_k = \sum_{\text{connu}} f_k + \sum_{\text{inconnu}} f_k = \Psi_0 \quad (4.20)$$

et donc :

$$\sum_{\text{inconnu}} f_k = \Psi_0 - \sum_{\text{connu}} f_k. \quad (4.21)$$

En combinant les équations (4.19) et (4.21), on a :

$$\beta = \frac{1}{\sum_{\text{inconnu}} w_k} \left(\Psi_0 - \sum_{\text{connu}} f_k \right). \quad (4.22)$$

On en déduit, avec l’équation (4.18), pour tout f_i inconnu ($\forall i \in \{1,5,8\}$ sur le côté *ouest* par exemple, cf. figure 4.5) :

$$f_i = \frac{w_i}{\sum_{\text{inconnu}} w_k} \left(\Psi_0 - \sum_{\text{connu}} f_k \right). \quad (4.23)$$

4.5.3 Conditions aux limites de Neumann

Une condition aux limites de Neumann est imposée à une équation différentielle ou à une équation aux dérivées partielles lorsque l'on spécifie les valeurs des dérivées que la solution doit vérifier sur les frontières du domaine. Prenons comme exemple la frontière *sud* et fixons : $\frac{\partial \Psi}{\partial y}(y = 0, t) = 0$, soit $\vec{\Phi} \cdot \vec{n} = 0$ avec \vec{n} le vecteur normal à la frontière.

Pour imposer une condition de Neumann, *i.e.* une condition sur les flux, plusieurs méthodes sont possibles.

Méthode des différences finies

La première méthode étudiée est décrite par Mohammad [Mohammad, 2007]. En s'inspirant de l'approche des différences finies, $\frac{\partial \Psi}{\partial y} = 0$ peut être approximé par :

$$\frac{\Psi(x, y + \delta y) - \Psi(x, y)}{\delta y} = 0. \quad (4.24)$$

On en déduit :

$$\Psi(x, y + \delta y) = \Psi(x, y) \quad (4.25)$$

et en remplaçant par les fonctions de distribution :

$$\sum_k f_k(x, y + \delta y) = \sum_k f_k(x, y). \quad (4.26)$$

Une façon simple d'obtenir cette égalité est de fixer :

$$\forall k, f_k(x, y + \delta y) = f_k(x, y). \quad (4.27)$$

Il est à noter que cette méthode n'est pas locale vu qu'il est nécessaire de connaître les fonctions de distribution aux nœuds adjacents à la frontière. En différences centrées, cette méthode revient en réalité à imposer le flux nul à mi-chemin entre le nœud du bord et le premier nœud inférieur plutôt que le flux exactement à la frontière. Les deux paragraphes suivants expliquent comment tirer parti de la richesse des fonctions de distribution pour imposer un flux normal nul exactement à la frontière.

Méthode du *bounce-back*

Cette méthode utilise l'expression permettant de calculer le flux en un point à l'aide des fonctions de distribution (cf. équations (4.15) et (4.16)). La méthode du *bounce-back* (ou du « rebond ») est souvent utilisée dans la méthode LB. Elle est ainsi nommée car quand une fonction de distribution atteint un nœud à la frontière, la fonction de distribution est réfléchiée selon sa direction préalable [Succi, 2001]. Il y a plusieurs variantes à cette méthode.

La figure 4.4 illustre les contributions positives et négatives des fonctions de distribution aux composantes du flux normalisé $\vec{\phi}$ (et donc aussi du flux dimensionné $\vec{\Phi}$). Pour imposer un flux normal nul aux limites, il suffit d'attribuer aux distributions associées à des vitesses positives la valeur de celles qui sont associées à des vitesses négatives (ou l'inverse selon la frontière considérée). La méthode du *bounce-back* consiste ainsi à ce que la distribution inconnue prenne la valeur de la distribution correspondant à la direction de transport opposée. Par exemple, dans le cas de la frontière *sud* illustrée figure 4.6, si l'on veut annuler le flux selon y , le rebond implique simplement :

$$\begin{cases} f_3 = f_4 \\ f_5 = f_7 \\ f_6 = f_8 \end{cases} \quad (4.28)$$

On obtient bien $\vec{\Phi} \cdot \vec{n} = 0$ mais on notera que cette méthode affecte les composantes du flux selon x . En effet, après l'application du *bounce-back*, la distribution f_7 (qui a donné sa valeur à f_5) contribue de façon positive au flux selon x alors qu'elle y contribuait de façon négative avant. C'est l'inverse pour f_8 qui passe d'une contribution positive à une contribution négative. Les distributions tangentielles f_1 et f_2 permettent éventuellement d'influer sur ϕ_x .

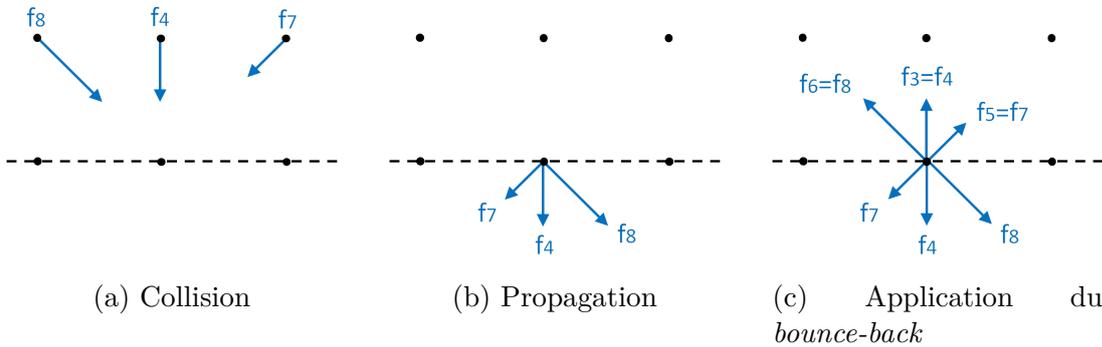


FIGURE 4.6 – Illustration de la méthode du *bounce-back*. Seules les fonctions de distribution d'intérêt sont représentées.

Condition de glissement

La troisième méthode étudiée est la condition aux limites de glissement [Succi, 2001]. Le flux normal est nul et le flux tangentiel est libre. Sur la frontière *sud*, les fonctions d'équilibre inconnues sont déterminées par symétrie axiale (ou par symétrie plane en 3D) comme illustré figure 4.7 :

$$\begin{cases} f_3 = f_4 \\ f_5 = f_8 \\ f_6 = f_7 \end{cases} \quad (4.29)$$

On a encore de façon évidente $\vec{\Phi} \cdot \vec{n} = 0$. En effet, $\phi_y \propto (f_3 + f_5 + f_6) - (f_4 - f_7 - f_8) = 0$. Pour traiter une condition de flux normal nul, c'est cette méthode qui est rigoureuse. On le montrera à travers des essais numériques au chapitre 5.

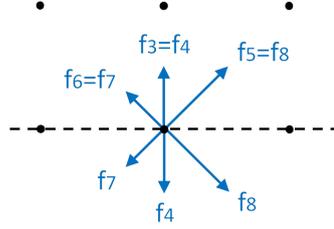


FIGURE 4.7 – Illustration de la condition de glissement. Seules les fonctions de distribution d'intérêt sont représentées.

4.5.4 Cas des coins

Au niveau des coins, le problème est plus complexe car il y a plus de fonctions de distribution inconnues. Ceci est illustré sur la figure 4.5 dans le cas du schéma D_2Q_9 : il y a cinq fonctions de distribution inconnues aux coins (f_2, f_4, f_6, f_7 et f_8 au coin *nord-est*) alors qu'il y en a seulement trois sur les côtés (f_1, f_5 et f_8 sur le côté *ouest*). La littérature est peu fournie à ce sujet dans le cas de la diffusion.

Dans une première approche, on supposera que les coins sont soumis aux conditions aux limites de Dirichlet présentées dans la partie 4.5.2. Prenons comme exemple le coin *nord-est* et fixons : $\Psi(x = L, t) = \Psi_L$. On a alors pour tout f_i inconnu ($\forall i \in \{2, 4, 6, 7, 8\}$ pour le coin *nord-est*) :

$$f_i = \frac{w_i}{\sum_{\text{inconnu}} w_k} \left(\Psi_L - \sum_{\text{connu}} f_k \right). \quad (4.30)$$

4.6 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté les aspects théoriques de la méthode Lattice Boltzmann en commençant par les différentes échelles de description d'un milieu et le principe général de la LBM avec la description discrète du milieu. Le modèle BGK est utilisé pour représenter l'opérateur de collision. On s'est ensuite intéressé à la modélisation de l'équation de la diffusion avec la méthode LB, sujet central de ce travail de thèse. Les liens entre les échelles mésoscopique et macroscopique ont été exposés avec les relations entre diffusivité et facteur de relaxation et entre fonctions de distribution et grandeurs macroscopiques. Enfin, différentes méthodes pour imposer des conditions aux limites de Dirichlet et Neumann ont été expliquées.

Dans le chapitre suivant, on présente le travail réalisé pour développer un code de simulation reposant sur cette méthode LB.

Chapitre 5

Développement d'un code Lattice Boltzmann optimisé

Dans ce chapitre, nous présentons les différents travaux réalisés pour développer un code maison en Fortran 90 permettant d'implémenter la méthode Lattice Boltzmann avec une bonne précision tout en limitant le temps de calcul. On commence par expliquer, dans la partie 5.1, l'implémentation d'un milieu hétérogène et des étapes de collision et de propagation. Dans la partie 5.2, on détaille les conditions aux limites implémentées et on teste différentes méthodes. Une attention particulière est portée au traitement des coins. Ensuite, dans la partie 5.3, on explique comment obtenir les propriétés équivalentes d'un milieu hétérogène. Le code peut alors être validé sur des géométries simples. On travaille également sur différents aspects pour garantir une bonne précision : l'influence du facteur de relaxation sur les résultats et la définition d'un critère de convergence sont présentées dans les parties 5.4 et 5.5. Enfin, dans la partie 5.6, nous montrons comment limiter le temps de calcul en parallélisant le code et en utilisant des facteurs de relaxation successifs.

Sommaire

5.1	Développement d'un code LB hétérogène	73
5.1.1	Implémentation d'un milieu hétérogène	73
5.1.2	Implémentation des étapes de collision et de propagation	74
5.2	Conditions aux limites implémentées dans le code . .	75
5.2.1	Conditions aux limites de Dirichlet	75
5.2.2	Conditions aux limites de Neumann	77
5.2.3	Cas des coins	80
5.3	Calcul de propriétés équivalentes et validation du code	82
5.3.1	Homogénéisation : calcul de propriétés équivalentes . .	82
5.3.2	Validation du code sur des milieux série et parallèle .	82
5.3.3	Comparaison des schémas D_2Q_5 et D_2Q_9	83

5.4	Influence de la résolution du réseau et du facteur de relaxation	84
5.4.1	Détermination d'une valeur de référence avec <i>Comsol</i>	84
5.4.2	Résultats obtenus avec la méthode LB	86
5.4.3	Comparaison des schémas D_2Q_5 et D_2Q_9	88
5.5	Critère de convergence	90
5.6	Réduction du temps de calcul	92
5.6.1	Parallélisation du code en <i>OpenMP</i>	92
5.6.2	Utilisation de facteurs de relaxation successifs	95
5.7	Conclusion du chapitre	96

5.1 Développement d'un code LB hétérogène

Comme expliqué au chapitre 4, la méthode Lattice Boltzmann consiste à décrire un milieu par un réseau de points et, en appliquant la collision et la propagation aux fonctions de distribution de chacun de ces points, elle permet de simuler des phénomènes de transfert. On présente dans cette partie l'implémentation de ces deux étapes principales dans un milieu hétérogène.

5.1.1 Implémentation d'un milieu hétérogène

L'objectif de ce travail de thèse est de calculer des propriétés équivalentes de matériaux hétérogènes. Pour cela, chaque point du réseau est attribué soit à la phase solide, soit à la phase gazeuse et possède alors les propriétés associées : conductivité thermique du solide ou de l'air, ou diffusivité massique du solide ou de l'air. Compte tenu de l'équation (4.12), chaque point du réseau est donc associé soit au facteur de relaxation du gaz, soit à celui du solide. Pour traiter une morphologie réelle obtenue au chapitre 3, le fichier contenant les coordonnées des voxels et les niveaux de gris correspondant (0 ou 255) pourra être lu par le code ce qui permettra de définir à quelle phase appartient chaque point du réseau.

La façon d'implémenter le code pour un milieu hétérogène est décrit ci-après. Les données du problème sont les suivantes :

- α_s et α_g sont les diffusivités (thermique ou massique) des deux phases ;
- L_x est la longueur du domaine dans la direction x , direction dans laquelle un gradient est imposé ;
- δx est le pas d'espace entre deux points du réseau, égal à la taille d'un voxel.

Appelons α_1 la plus grande diffusivité et α_2 la plus petite. Notons qu'en diffusion thermique, $\alpha_1 = \alpha_s$ et $\alpha_2 = \alpha_g$ et qu'en diffusion massique c'est l'inverse, $\alpha_1 = \alpha_g$ et $\alpha_2 = \alpha_s$. L'équation (4.12) qui est rappelée ici pour faciliter la lecture :

$$\alpha = \frac{\delta x^2}{a\delta t} \left(\frac{1}{\omega} - \frac{1}{2} \right) \quad (5.1)$$

nous apprend que α et ω sont inversement proportionnels. Le facteur de relaxation du milieu dont la diffusivité est la plus grande sera donc le plus petit, et inversement. Nous pouvons alors définir deux facteurs de relaxation : ω_{min} associé à α_1 et ω_{max} associé à α_2 .

Nous fixons d'abord la valeur du facteur de relaxation ω_{min} (la valeur optimale sera déterminée plus tard dans la partie 5.4). Ensuite, nous calculons le pas de temps δt grâce à l'équation (5.1) :

$$\delta t = \frac{\delta x^2}{a\alpha_1} \left(\frac{1}{\omega_{min}} - \frac{1}{2} \right). \quad (5.2)$$

Puis nous déterminons le facteur de relaxation de l'autre phase ω_{max} grâce de nouveau à l'équation (5.1), de façon à imposer la même valeur au pas de temps δt dans les deux phases :

$$\omega_{max} = \frac{2\delta x^2}{2a\alpha_2\delta t + \delta x^2}. \quad (5.3)$$

5.1.2 Implémentation des étapes de collision et de propagation

Selon le modèle D_NQ_M choisi, on implémente les facteurs de pondération w_k selon les valeurs données dans le tableau 4.1. On initialise ensuite les M fonctions de distribution à chaque nœud du réseau selon la condition initiale Ψ_{init} :

$$f_k(\vec{x}) = w_k \Psi_{init}(\vec{x}) \quad (5.4)$$

Dans notre cas, Ψ_{init} est choisie constante sur tout le réseau, égale à 0.

Pour effectuer l'étape de collision, il est nécessaire de connaître à chaque itération et à chaque nœud, les M fonctions d'équilibre données par les équations (4.11) et (4.13) :

$$f_k^{eq}(\vec{x}) = w_k \sum_k f_k(\vec{x}) \quad (5.5)$$

À chaque itération et à chaque nœud, on peut alors implémenter les étapes de collision et de propagation (cf. équations (4.8) et (4.9)) :

$$f_k(\vec{x}) = (1 - \omega_i) f_k(\vec{x}) + \omega_i f_k^{eq}(\vec{x}), \quad (5.6)$$

$$f_k(\vec{x} + \vec{c}_k \delta t) = f_k(\vec{x}). \quad (5.7)$$

On remarque que l'équation de collision fait intervenir ω_i . Selon le point du réseau où se déroule la collision, ω_i prendra la valeur ω_{min} ou ω_{max} .

Remarque : nous n'avons pas utilisé de tableau f_k^* permettant de stocker des valeurs temporaires des fonctions de distribution. Pour l'étape de collision, nous remplaçons donc directement f_k par sa nouvelle valeur ce qui explique pourquoi f_k apparaît des deux côtés de l'équation (5.6). De plus, pour l'étape de propagation, il faut faire attention à remplacer les f_k dans le sens inverse de la propagation. Par exemple, pour f_1 , on remplace d'abord $f_1(L_x)$ par $f_1(L_x - \delta x)$, puis $f_1(L_x - \delta x)$ par $f_1(L_x - 2\delta x)$ et ainsi de suite jusqu'à $f_1(\delta x)$ remplacé par $f_1(0)$.

Pour compléter un pas de temps, il reste à implémenter les conditions aux limites.

5.2 Conditions aux limites implémentées dans le code

Initialement, un champ constant est implémenté : $\Psi_{init}(x,y,z,0) = 0$. Pour calculer la conductivité thermique équivalente et la diffusivité massique équivalente de matériaux hétérogènes, il est nécessaire d'appliquer un gradient entre deux côtés opposés ($x = 0$ et $x = L_x$). Cela revient à appliquer des conditions aux limites de Dirichlet dans la direction x . Sur les autres côtés, on impose des conditions aux limites adiabatiques en thermique (ou des conditions équivalentes de flux normal nul en massique). Les conditions aux limites macroscopiques que nous souhaitons appliquer sont donc les suivantes en 2D :

$$\begin{cases} \Psi = \Psi_0 & \text{en } x = 0 \\ \Psi = \Psi_L & \text{en } x = L_x \\ \vec{\Phi} \cdot \vec{n} = 0 & \text{en } y = 0 \text{ et } y = L_y \end{cases} . \quad (5.8)$$

Comme nous l'avons vu dans le chapitre 4, les conditions aux limites sont imposées via les fonctions de distribution f_k . Notre méthode pour les fixer est illustrée sur la figure 5.1. Nous avons choisi de représenter le cas d'un schéma de vitesses D_2Q_9 pour montrer comment gérer les vitesses diagonales. Les flèches pleines bleues représentent les f_k connues grâce à la propagation. Les flèches en pointillé représentent les f_k inconnues. Les flèches rouges sont déterminées par la méthode présentée dans la partie 4.5.2 qui permet d'imposer des conditions aux limites de Dirichlet. Les flèches vertes sont déterminées par la condition de glissement présentée dans la partie 4.5.3, l'égalité entre deux f_k est montrée par l'égalité des épaisseurs entre flèches bleue et verte.

5.2.1 Conditions aux limites de Dirichlet

Sur les côtés *ouest* et *est*, nous imposons un champ constant ce qui correspond à une condition aux limites de Dirichlet (cf. figure 5.1). Pour cela, nous utilisons la méthode présentée dans le chapitre 4. Les fonctions de distribution inconnues sur le côté *ouest* sont obtenues de la façon suivante :

$$\begin{cases} f_1 = \frac{w_1}{w_1 + w_5 + w_8} \times [\Psi_0 - f_0 - f_2 - f_3 - f_4 - f_6 - f_7] \\ f_5 = \frac{w_5}{w_1 + w_5 + w_8} \times [\Psi_0 - f_0 - f_2 - f_3 - f_4 - f_6 - f_7] \\ f_8 = \frac{w_8}{w_1 + w_5 + w_8} \times [\Psi_0 - f_0 - f_2 - f_3 - f_4 - f_6 - f_7] \end{cases} . \quad (5.9)$$

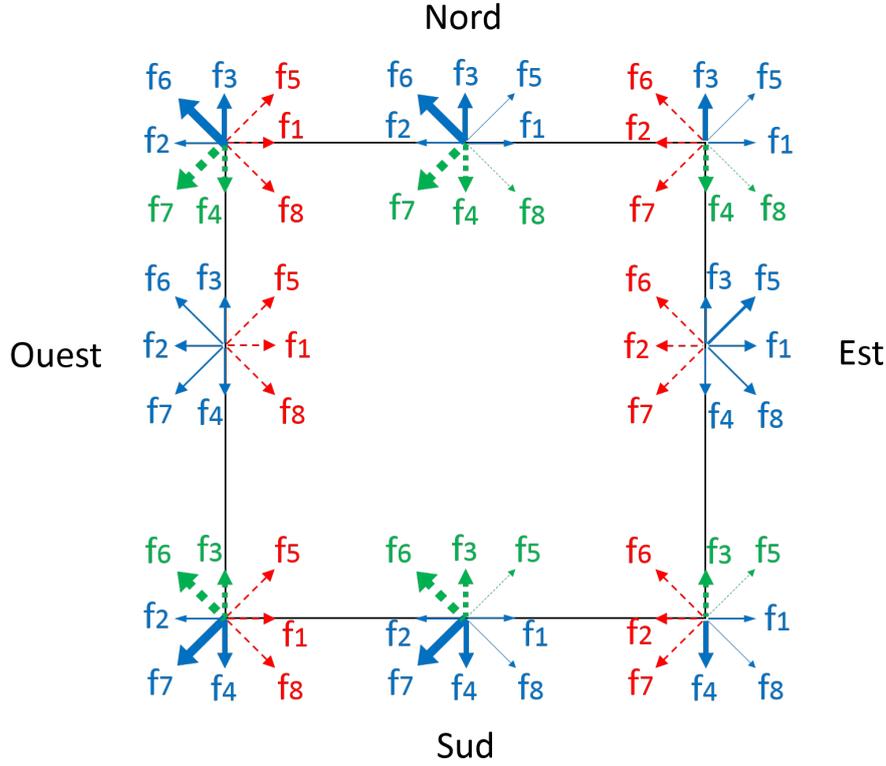


FIGURE 5.1 – Conditions aux limites dans le cas d'un schéma D_2Q_9 . Les flèches bleues pleines représentent les f_k connues par propagation, les flèches en pointillé représentent les f_k inconnues, les flèches rouges et vertes sont déterminées différemment, l'épaisseur d'une flèche verte opposée à une flèche bleue traduit l'égalité entre deux f_k . Les fonctions de distribution f_0 ne sont pas représentées.

De la même façon, sur le côté *est*, on écrit :

$$\begin{cases} f_2 = \frac{w_2}{w_2 + w_6 + w_7} \times [\Psi_L - f_0 - f_1 - f_3 - f_4 - f_5 - f_8] \\ f_6 = \frac{w_6}{w_2 + w_6 + w_7} \times [\Psi_L - f_0 - f_1 - f_3 - f_4 - f_5 - f_8] \\ f_7 = \frac{w_7}{w_2 + w_6 + w_7} \times [\Psi_L - f_0 - f_1 - f_3 - f_4 - f_5 - f_8] \end{cases} \quad (5.10)$$

Dans un premier temps, comme décrit dans la partie 4.5.4, on fixe également les conditions aux limites de Dirichlet au niveau des coins. Pour le coin *nord-ouest*

par exemple, nous avons :

$$\left\{ \begin{array}{l} f_1 = \frac{w_1}{w_1 + w_4 + w_5 + w_7 + w_8} \times [\Psi_0 - f_0 - f_2 - f_3 - f_6] \\ f_4 = \frac{w_4}{w_1 + w_4 + w_5 + w_7 + w_8} \times [\Psi_0 - f_0 - f_2 - f_3 - f_6] \\ f_5 = \frac{w_5}{w_1 + w_4 + w_5 + w_7 + w_8} \times [\Psi_0 - f_0 - f_2 - f_3 - f_6] . \\ f_7 = \frac{w_7}{w_1 + w_4 + w_5 + w_7 + w_8} \times [\Psi_0 - f_0 - f_2 - f_3 - f_6] \\ f_8 = \frac{w_8}{w_1 + w_4 + w_5 + w_7 + w_8} \times [\Psi_0 - f_0 - f_2 - f_3 - f_6] \end{array} \right. \quad (5.11)$$

L'implémentation des autres coins se déduit facilement de cet exemple.

5.2.2 Conditions aux limites de Neumann

Sur les côtés *nord* et *sud*, nous imposons des conditions aux limites adiabatiques (ou équivalent) soit des conditions aux limites de Neumann. Nous avons testé les différentes méthodes présentées dans le chapitre 4 pour simuler de telles conditions. Des tests sont réalisés sur un milieu homogène 2D en diffusion thermique avec les paramètres suivants : schéma D_2Q_9 , $\lambda = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\omega = 0,5$, $L_x = L_y = 1 \text{ m}$, $m = n = 100$, avec m tel que $\delta x = \frac{L_x}{m-1}$.

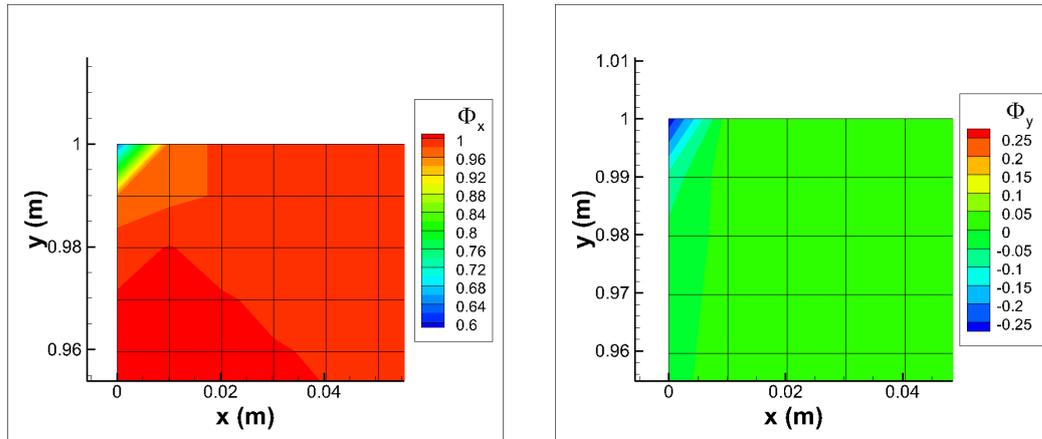
Méthode des différences finies

La première méthode testée est celle consistant à imposer l'égalité entre les fonctions de distribution des nœuds appartenant à la frontière et celles des nœuds adjacents. L'implémentation de cette méthode sur la frontière *nord*, par exemple, est la suivante :

$$\forall k, \forall x \in [\delta x, L_x - \delta x], f_k(x, L_y) = f_k(x, L_y - \delta y). \quad (5.12)$$

On teste cette méthode sur un milieu homogène 2D en diffusion thermique et les résultats sont satisfaisants. La figure 5.2 montre les flux Φ_x et Φ_y obtenus en régime permanent en fonction de x et y , au coin *nord-ouest*. On remarque que le flux Φ_y à la frontière *nord* est bien nul, sauf au coin *nord-ouest*. Le flux Φ_x est également perturbé au niveau du coin. Les mêmes résultats sont observés à la frontière *sud* et aux trois autres coins.

On a fixé au coin *nord-ouest* la condition de Dirichlet $\Psi = \Psi_0$ comme au point situé en dessous sur la frontière *ouest*. On s'attendrait donc à calculer un flux Φ_y nul, les scalaires de ces deux points étant les mêmes. Cependant, c'est le flux Lattice Boltzmann qui est calculé via l'équation (4.14) et même si le scalaire est le même, les fonctions de distribution sont différentes ce qui conduit à des flux



(a) Flux selon x en régime permanent, Φ_x (W m^{-2})

(b) Flux selon y en régime permanent, Φ_y (W m^{-2})

FIGURE 5.2 – Flux en régime permanent au coin *nord-ouest* obtenus avec la méthode des différences finies. Schéma D_2Q_9 , $\lambda = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\omega = 0,5$, $L_x = L_y = 1 \text{ m}$, $m = n = 100$.

différents. Ceci constitue une limite à notre méthode pour imposer une condition aux limites de Dirichlet, au niveau des coins particulièrement.

Cette méthode des différences finies fonctionne donc bien pour modéliser une condition de flux normal nul mais présente un inconvénient : elle est non locale puisqu'elle nécessite les informations sur les nœuds adjacents. Pour résoudre le problème des coins, on pourrait appliquer à leurs fonctions de distribution l'équation (5.12) mais cette méthode étant non locale, on préfère examiner d'autres approches.

Méthode du *bounce-back*

La deuxième méthode testée est la méthode classique du *bounce-back* où les fonctions de distribution inconnues sont déterminées par symétrie ponctuelle. L'implémentation de la frontière *sud* a été donnée dans la partie 4.5.3, l'implémentation de la frontière *nord* est la suivante :

$$\begin{cases} f_4 = f_3 \\ f_7 = f_5 \\ f_8 = f_6 \end{cases} . \quad (5.13)$$

Comme précédemment, cette méthode a été testée sur un milieu homogène. Les flux Φ_y obtenus en régime permanent sont bien nuls aux frontières *nord* et *sud* (cf. figure 5.3b) mais les résultats ne sont pas satisfaisants quant aux flux selon x . En effet, la figure 5.3a montre que Φ_x est inférieur de 40 % au niveau des frontières *nord* et *sud* par rapport au reste du domaine alors qu'il devrait être homogène

dans tout le domaine. Comme mentionné au chapitre 4, la façon de remplacer les f_k avec la méthode du *bounce-back* annule certes Φ_y mais modifie aussi Φ_x . Cette méthode est surtout utilisée pour fixer une condition de non-glissement pour un écoulement en imposant l'égalité entre les fonctions de distribution tangentielles. Elle ne convient donc pas pour notre étude.

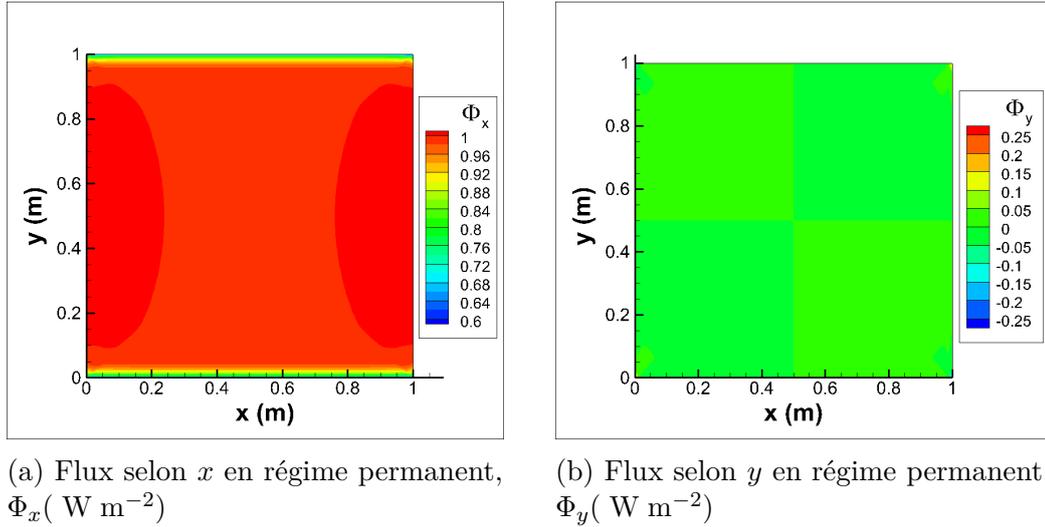


FIGURE 5.3 – Flux en régime permanent obtenus avec la méthode du *bounce-back*. Schéma D_2Q_9 , $\lambda = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\omega = 0,5$, $L_x = L_y = 1 \text{ m}$, $m = n = 100$.

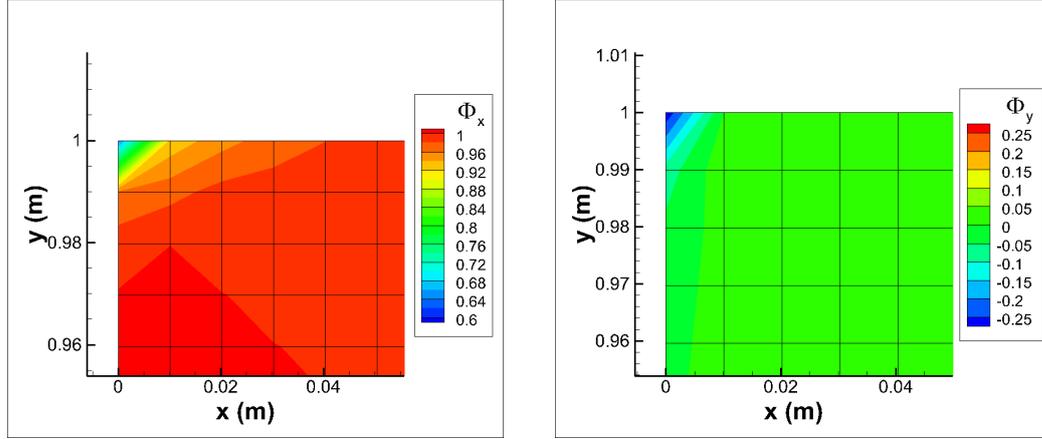
Condition de glissement

La dernière méthode testée est la condition de glissement pour laquelle les fonctions de distribution inconnues sont déterminées par symétrie axiale en 2D ou plane en 3D. L'implémentation de la frontière *sud* a été donnée dans la partie 4.5.3, l'implémentation de la frontière *nord* est la suivante :

$$\begin{cases} f_4 = f_3 \\ f_7 = f_6 \\ f_8 = f_5 \end{cases} . \quad (5.14)$$

Les résultats sur un milieu homogène sont très satisfaisants. En effet, les flux selon x et y sont bien nuls aux frontières *nord* et *sud* et uniquement perturbés au niveau des coins comme le montre la figure 5.4. Cette méthode étant de plus locale, nous choisissons celle-ci pour imposer les conditions aux limites de Neumann.

Nous savons à présent implémenter les fonctions de distribution pour imposer des conditions aux limites de Dirichlet et de Neumann, il reste à résoudre le problème des flux parasites aux coins.



(a) Flux selon x en régime permanent, Φ_x (W m^{-2})

(b) Flux selon y en régime permanent, Φ_y (W m^{-2})

FIGURE 5.4 – Flux en régime permanent au coin *nord-ouest* obtenus avec la condition de glissement. Schéma D_2Q_9 , $\lambda = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\omega = 0,5$, $L_x = L_y = 1 \text{ m}$, $m = n = 100$.

5.2.3 Cas des coins

Dans le cadre de la modélisation de la diffusion pure avec la méthode Lattice Boltzmann, la façon de traiter les coins est rarement explicitée dans la littérature. Nous avons donc développé une méthode originale pour fixer les conditions aux limites au niveau des coins (où de nombreuses fonctions de distribution sont inconnues). Cette méthode consiste à imposer une condition combinée Dirichlet/Neumann : les degrés de liberté à chaque nœud (*i.e.* les valeurs des fonctions de distribution f_k) nous permettent d'imposer à la fois la valeur du scalaire et un flux normal nul. La condition de glissement est d'abord appliquée ce qui permet de déterminer deux des fonctions de distribution inconnues. Ensuite, la condition aux limites de Dirichlet est imposée ce qui fixe la valeur des trois fonctions de distribution restantes. Par exemple, sur le coin *nord-ouest*, f_4 et f_7 sont d'abord déterminées par symétrie axiale comme sur le côté *nord*, puis f_1 , f_5 et f_8 sont déterminées comme sur le côté *ouest* :

$$\begin{cases} f_4 = f_3 \\ f_7 = f_6 \\ f_1 = \frac{w_1}{w_1 + w_5 + w_8} \times [\Psi_0 - f_0 - f_2 - f_3 - f_4 - f_6 - f_7] \\ f_5 = \frac{w_5}{w_1 + w_5 + w_8} \times [\Psi_0 - f_0 - f_2 - f_3 - f_4 - f_6 - f_7] \\ f_8 = \frac{w_8}{w_1 + w_5 + w_8} \times [\Psi_0 - f_0 - f_2 - f_3 - f_4 - f_6 - f_7] \end{cases} \quad (5.15)$$

Notons que la condition de glissement n'est imposée que sur deux fonctions de distribution mais comme $w_5 = w_8$, on a $f_5 = f_8$ et donc la condition de glissement est finalement réalisée sur l'ensemble des fonctions du distribution du nœud considéré. De cette façon, le scalaire et le même que sur le côté *ouest* et le flux selon y est égal à zéro comme sur le côté *nord*.

Les résultats sur un milieu homogène confirment cela. La figure 5.5b montre le flux selon y au coin *nord-ouest*. Contrairement aux résultats précédents (cf. figure 5.4b), Φ_y est bien nul au coin. De même, la valeur de Φ_x est bien la même dans tout le domaine en régime permanent, même aux coins. Notre méthode pour implémenter les conditions mixtes aux coins est donc validée.

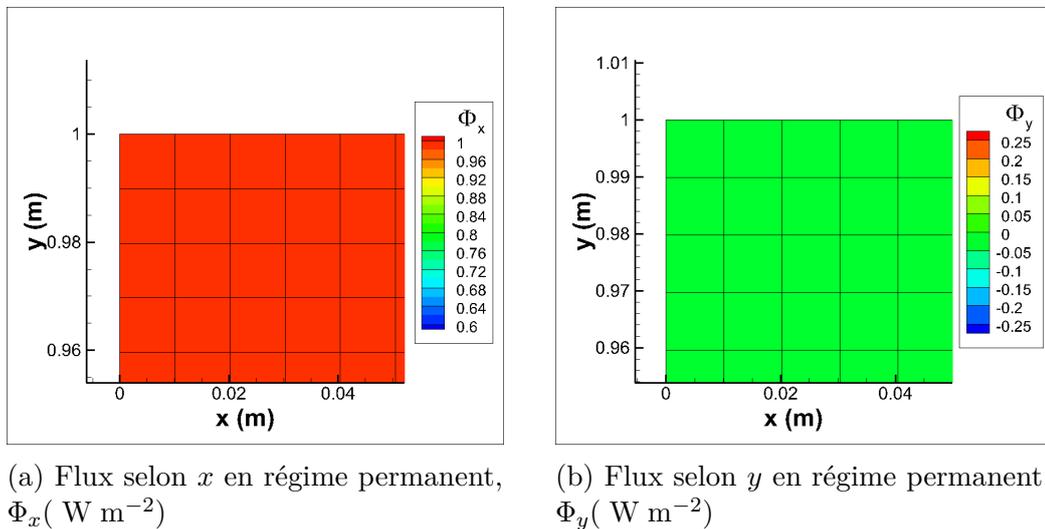


FIGURE 5.5 – Flux en régime permanent au coin *nord-ouest* obtenus avec la condition de glissement aux frontières *nord* et *sud* et la méthode combinée Dirichlet/Neumann aux coins. Schéma D_2Q_9 , $\lambda = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\omega = 0,5$, $L_x = L_y = 1 \text{ m}$, $m = n = 100$.

Dans cette partie, l'implémentation des fonctions de distribution aux frontières a été explicitée dans le cas du schéma D_2Q_9 . L'extrapolation pour le cas du schéma D_2Q_5 est facile, il suffit de supprimer les fonctions de distribution f_5 , f_6 , f_7 et f_8 des équations données. L'implémentation des conditions aux limites avec un schéma D_3Q_7 se déduit aussi facilement de ce qui est présenté et sera explicitée dans le chapitre 6.

5.3 Calcul de propriétés équivalentes et validation du code

5.3.1 Homogénéisation : calcul de propriétés équivalentes

Pour calculer une propriété macroscopique équivalente d'un milieu hétérogène, les différentes étapes de la méthode LB (collision, propagation et conditions aux limites) sont itérées jusqu'à ce que le régime permanent soit atteint. La propriété équivalente Γ_{eq} est égale à la moyenne du flux selon x $\langle \Phi_x \rangle$ divisée par le gradient imposé par les conditions aux limites de Dirichlet :

$$\Gamma_{eq} = \frac{\langle \Phi_x \rangle L_x}{\Delta \Psi} \quad (5.16)$$

où Γ_{eq} représente la propriété équivalente, λ_{eq} ou D_{eq}^* .

Φ_x est donné par l'équation (4.17). Pour calculer $\langle \Phi_x \rangle$ (et par conséquent toutes les moyennes sur des flux), on calcule simplement la moyenne arithmétique des Φ_x mais en imposant une pondération sur les bords du domaine :

- en 2D, 1/4 pour les nœuds situés sur un coin, 1/2 pour les nœuds situés sur un côté ;
- en 3D, 1/8 pour les nœuds situés sur un coin, 1/4 pour les nœuds situés sur une arête et 1/2 pour les nœuds situés sur des faces.

En effet, la surface allouée à un nœud n'est pas la même selon que le nœud se trouve à l'intérieur de l'échantillon ou en bordure. Ceci est illustré sur la figure 5.6 dans le cas 2D.

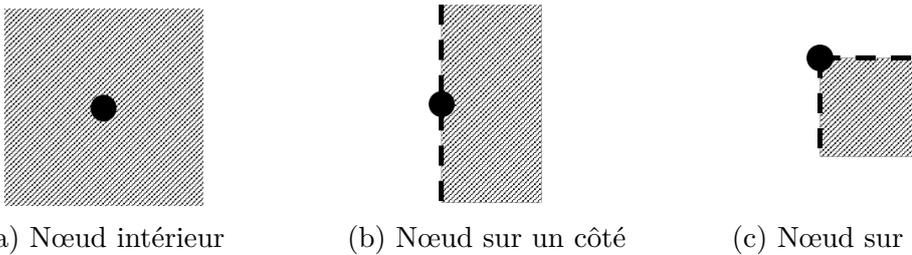


FIGURE 5.6 – Surface allouée à un nœud selon sa position sur un réseau 2D.

5.3.2 Validation du code sur des milieux série et parallèle

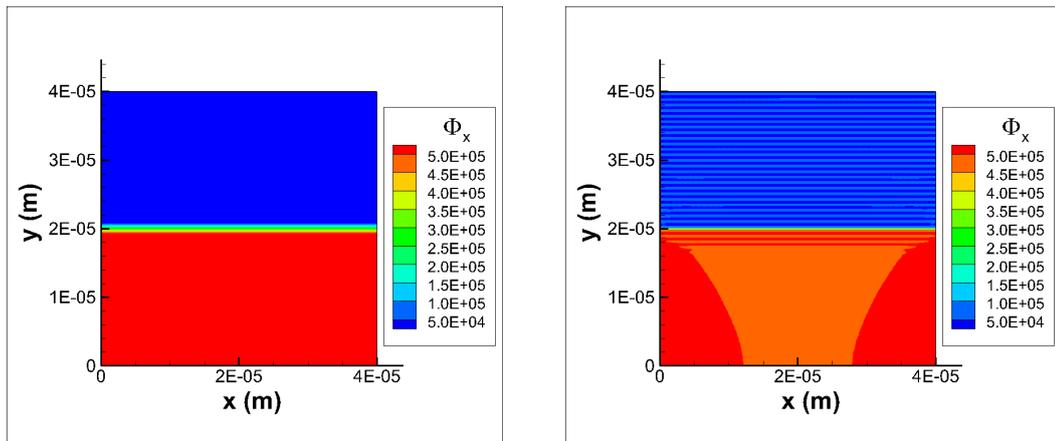
Pour valider le code, différentes morphologies simples (parallèle et série) ont été testées et comparées aux diffusivités équivalentes obtenues avec les solutions analytiques classiques.

Par exemple, dans le cas de la diffusion thermique, avec les conductivités thermiques de la phase solide et de la phase gazeuse, $\lambda_s = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et

$\lambda_g = 0,023 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, les valeurs analytiques pour les cas série et parallèle sont : $\lambda_{\parallel} = 0,51 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et $\lambda_{\perp} = 4,5 \cdot 10^{-2} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Le schéma D_2Q_5 fournit ces valeurs avec un erreur relative inférieure à 10^{-10} . Les champs de température et de flux sont également en accord avec la solution analytique. Le code est ainsi validé pour ces morphologies simples.

5.3.3 Comparaison des schémas D_2Q_5 et D_2Q_9

Lors de cette phase de validation, nous avons remarqué que dans le cas de la géométrie parallèle avec le schéma D_2Q_9 , des problèmes de flux apparaissent à la limite entre les deux milieux alors que le problème n'existe pas avec le schéma D_2Q_5 . La figure 5.7 illustre cela. Nous en avons conclu que ce problème provenait probablement des composantes diagonales des fonctions de distribution f_k ($k = 5,6,7,8$) qui ne sont pas alignées avec l'interface entre les deux milieux.



(a) Φ_x (W m^{-2}) obtenu en régime permanent pour le schéma D_2Q_5

(b) Φ_x (W m^{-2}) obtenu en régime permanent pour le schéma D_2Q_9

FIGURE 5.7 – Mise en évidence d'un problème de flux avec le schéma D_2Q_9 sur une géométrie parallèle. $\omega_{min} = 1,3$, $m = 100$, $\lambda_1 = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et $\lambda_2 = 0,1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\rho c_p = 3,62 \cdot 10^6 \text{ W s m}^{-3} \text{ K}^{-1}$.

Dans la partie suivante, on réalise des calculs sur une géométrie plus complexe. Cela permettra de comparer la précision des schémas D_2Q_5 et D_2Q_9 quand aucun des deux n'est aligné avec l'interface entre les milieux.

5.4 Influence de la résolution du réseau et du facteur de relaxation

Dans cette partie, nous présentons l'étude faite sur l'influence de la résolution du réseau et du facteur de relaxation ω_{min} sur la précision des calculs. Pour cela, nous avons fait tourner notre code D_2Q_5 sur le milieu suivant : un disque possédant les propriétés de l'air (phase gazeuse) est placé au centre d'une matrice carrée possédant les propriétés du bois (phase solide). Le rayon du disque est égal au quart de la longueur de la matrice $R = L_x/4$. Cette géométrie est illustrée sur la figure 5.8a. On se place dans le cas de la diffusion thermique avec $\lambda_g = 0,023 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et $\lambda_s = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et avec $\omega_{min} = \omega_s$.

La géométrie de cette cellule de base (un disque dans une matrice) fournit de très nombreux angles d'interface. En effet, sur un réseau carré régulier, le disque est approximé par un polygone et, selon la position dans la cellule, la perturbation rencontrera une interface plus ou moins inclinée. Les résultats permettront ainsi une validation plus complète du code et justifieront son utilisation sur des morphologies réelles complexes.

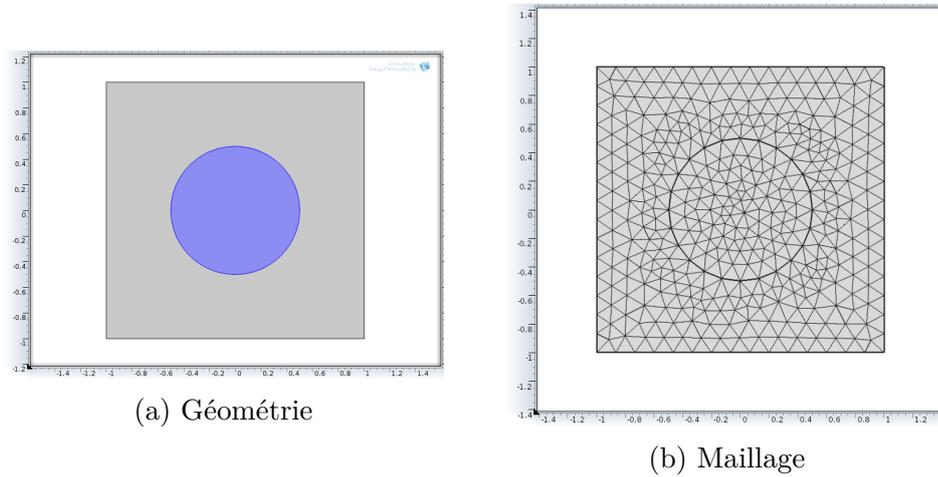
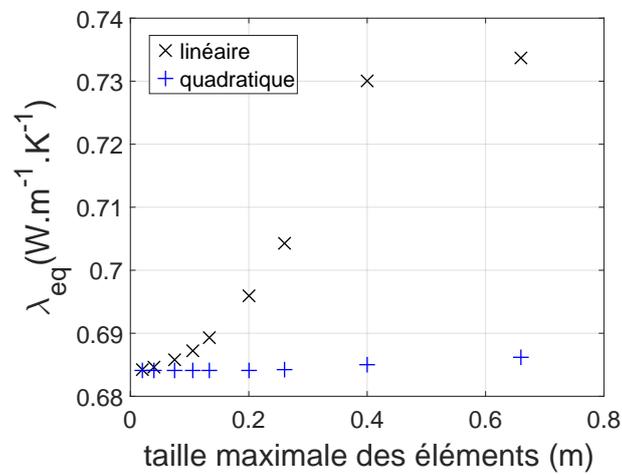
5.4.1 Détermination d'une valeur de référence avec *Comsol*

Pour obtenir une valeur de référence pour ce problème et pouvoir apprécier la précision des résultats obtenus par la méthode LB, nous utilisons le logiciel commercial de calculs multi-physiques par éléments finis *Comsol*.

Un projet de diffusion thermique 2D stationnaire est créé avec la géométrie présentée figure 5.8a, λ_g est attribué au disque, λ_s est attribué à la matrice entourant le disque. Comme avec la LBM, on applique une température constante pour la condition initiale et on impose un gradient de température entre deux côtés opposés et des conditions aux limites adiabatiques sur les deux autres côtés. Le maillage de taille « normal » (7×10^2 éléments, taille maximale d'un élément : 0,134 m) généré par *Comsol* est présenté sur la figure 5.8b pour exemple. On peut choisir des éléments de type linéaire ou quadratique.

En raffinant le maillage et en calculant à chaque fois la moyenne du flux selon x $\langle \Phi_x \rangle$, on obtient la conductivité équivalente du milieu λ_{eq} avec l'équation (5.16). Les résultats présentés sur la figure 5.9 permettent de vérifier que le cas quadratique converge beaucoup plus vite que le cas linéaire quand on raffine le maillage [Zienkiewicz *et al.*, 1977]. Pour les maillages de type « extra fin » (7×10^3 éléments, taille maximale d'un élément : 0,04 m) et « extrêmement fin » (3×10^4 éléments, taille maximale d'un élément : 0,02 m), on obtient le même résultat pour λ_{eq} avec 6 chiffres après la virgule. La valeur de référence est ainsi obtenue :

$$\lambda_{eq,ref} = 0,684071 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}.$$

FIGURE 5.8 – Géométrie du milieu (a) et maillage (b) réalisés sous *Comsol*.FIGURE 5.9 – *Comsol* : Convergence de λ_{eq} avec le raffinement du maillage. En utilisant des éléments quadratiques, la convergence est beaucoup plus rapide qu'avec des éléments linéaires.

5.4.2 Résultats obtenus avec la méthode LB

La conductivité thermique équivalente est calculée avec un schéma de vitesse D_2Q_5 , pour différents nombres de nœuds du réseau m tel que $\delta x = L_x/(m-1)$ et différents facteurs de relaxation ω_{min} (et donc ω_{max}). Selon la résolution du réseau ($m = 30; 50; 100; 200$), le rapport entre le nombre de points appartenant à la phase gazeuse et le nombre de points appartenant à la phase solide est différent comme le montre la figure 5.10. La valeur de référence est calculée analytiquement : $r_{air/bois} = \pi R^2 / (L_x^2 - \pi R^2) = (\pi/4^2) / (1 - \pi/4^2) \approx 0,2443$.

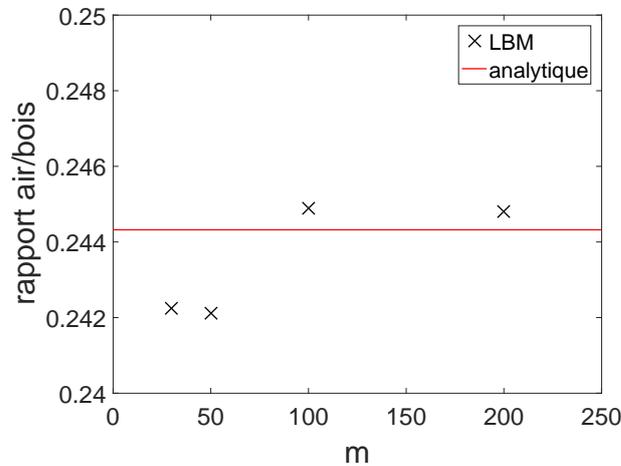
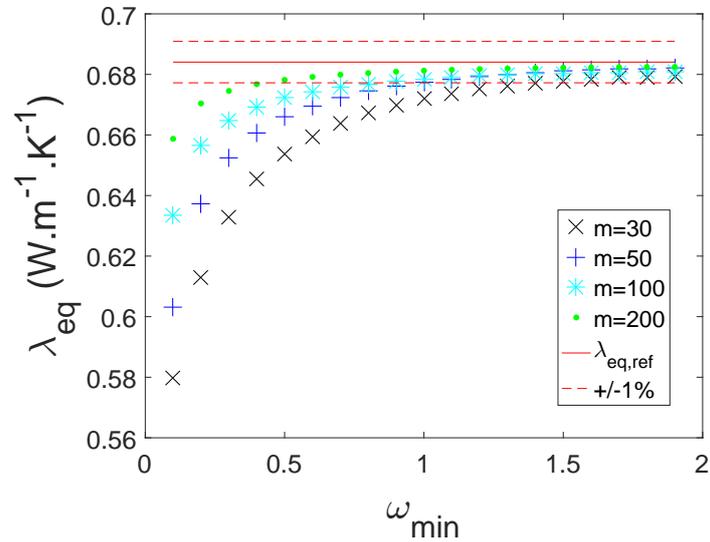


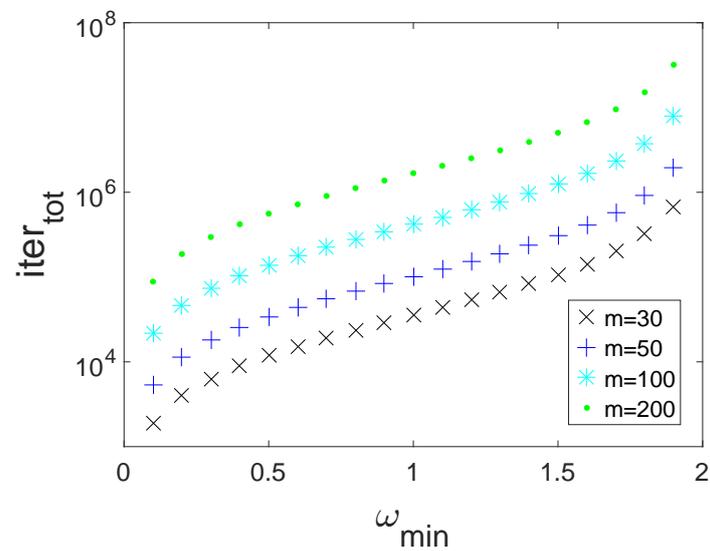
FIGURE 5.10 – Rapport entre le nombre de points appartenant à la phase gazeuse et le nombre de points appartenant à la phase solide selon le nombre de nœuds du réseau m . La valeur analytique est tracée en rouge. Les écarts à la valeur théorique restent inférieurs à 1 %.

L'influence de m et de ω_{min} sur le calcul de λ_{eq} est montrée sur la figure 5.11a. On remarque que plus ω_{min} est grand, plus λ_{eq} est précis et tend vers la valeur de référence. Cependant le coût de calcul augmente drastiquement avec ω_{min} puisque le nombre d'itérations est 100 fois plus grand pour $\omega_{min} = 1,9$ que pour $\omega_{min} = 0,1$ (cf. figure 5.11b). Pour limiter le temps de calcul, nous avons fixé ω_{min} à 1,4 parce qu'au delà de cette valeur, l'erreur est inférieure à 1 % même pour la grille la plus grossière ($m = 30$).

Nous avons également vérifié qu'en inversant les conductivités thermiques entre le disque et la matrice, le critère $\omega_{min} = 1,4$ était satisfaisant. Les résultats présentés figure 5.12 montrent que l'erreur est inférieure à 1 % pour chaque taille de grille et chaque ω_{min} . A fortiori, le critère $\omega_{min} = 1,4$ convient.



(a) Conductivité thermique équivalente en fonction du facteur de relaxation ω_{min} , pour différentes résolutions du maillage m .



(b) Nombre d'itérations requis en fonction du facteur de relaxation ω_{min} , pour différentes résolutions du maillage m .

FIGURE 5.11 – Diffusion thermique dans une matrice solide avec une inclusion gazeuse. Schéma D_2Q_5 , $\lambda_s = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\lambda_g = 0.023 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

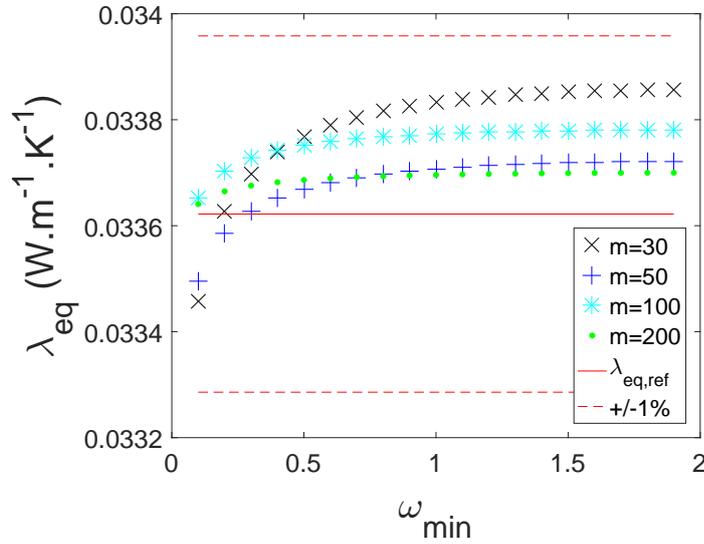


FIGURE 5.12 – Conductivité thermique équivalente en fonction du facteur de relaxation ω_{min} , pour différentes résolutions du maillage m . Diffusion thermique dans une matrice gazeuse avec une inclusion solide. Schéma D_2Q_5 , $\lambda_s = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\lambda_g = 0.023 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

5.4.3 Comparaison des schémas D_2Q_5 et D_2Q_9

Nous avons également calculé la conductivité thermique équivalente d'un même milieu avec le schéma de vitesse D_2Q_9 pour vérifier la pertinence du schéma D_2Q_5 . Les résultats sont présentés sur la figure 5.13. On remarque que la précision est un peu meilleure puisque l'erreur sur la conductivité thermique équivalente devient inférieure à 1 % pour $\omega_{min} = 1,3$ au lieu de $\omega_{min} = 1,4$. En revanche, la figure 5.14 montre que le temps de calcul augmente significativement avec un schéma D_2Q_9 par rapport à un schéma D_2Q_5 . Cela s'explique par le fait qu'à chaque itération, la collision, la propagation et, dans une moindre mesure, l'application des conditions aux limites requièrent un plus grand nombre d'opérations puisqu'il faut prendre en compte neuf vitesses et non cinq. Le schéma D_2Q_5 est suffisant pour modéliser un phénomène de diffusion. De plus, il est plus rapide que le schéma D_2Q_9 .

En conclusion, pour simuler la diffusion dans un milieu hétérogène avec une bonne précision tout en limitant le temps de calcul, un schéma D_2Q_5 (ou D_3Q_7 en 3D) et un facteur de relaxation $\omega_{min}^{opt} = 1,4$ seront systématiquement utilisés pour tout le reste de ce travail.

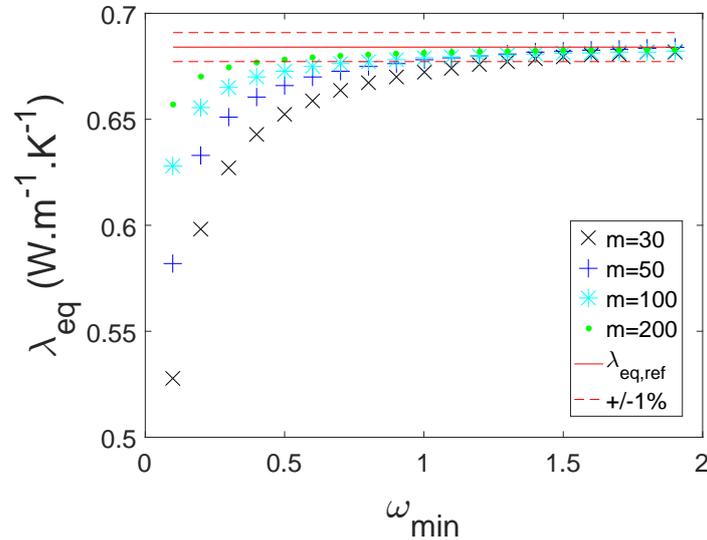


FIGURE 5.13 – Conductivité thermique équivalente en fonction du facteur de relaxation ω_{min} , pour différentes résolutions du maillage m . Diffusion thermique dans une matrice solide avec une inclusion gazeuse. Schéma D_2Q_9 , $\lambda_s = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\lambda_g = 0.023 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

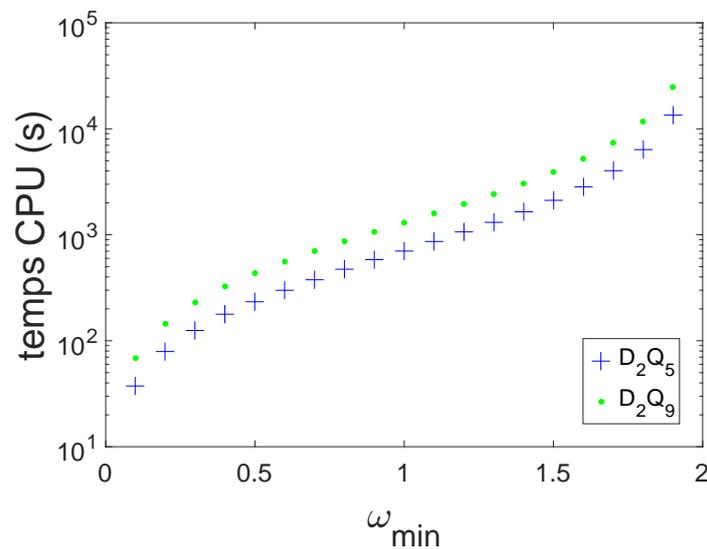


FIGURE 5.14 – Temps CPU requis en fonction du facteur de relaxation ω_{min} , pour les schémas de vitesse D_2Q_5 et D_2Q_9 . Diffusion thermique dans une matrice solide avec une inclusion gazeuse. $m = 100$, $\lambda_s = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\lambda_g = 0.023 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

5.5 Critère de convergence

Comme la propriété équivalente macroscopique Γ_{eq} est calculée en régime permanent, un critère de convergence doit être défini pour arrêter les itérations à bon escient (précision assurée sans calculs inutiles).

Compte tenu des conditions aux limites imposées (Dirichlet sur deux côtés opposés et flux normal nul sur les autres côtés), la moyenne du flux selon x $\langle \Phi_x \rangle$ est la même sur toutes les lignes perpendiculaires au flux quand le régime permanent est atteint. En effet, en régime permanent :

$$\operatorname{div}(\vec{\Phi}) = 0, \quad (5.17)$$

Donc en intégrant sur un volume quelconque,

$$\int_V \operatorname{div}(\vec{\Phi}) dV = 0. \quad (5.18)$$

D'après le théorème de Green-Ostrogradski, on a alors :

$$\oint_S \vec{\Phi} \cdot \vec{n} dS = 0. \quad (5.19)$$

Vu que le flux normal est nul sur les côté $y = y_1$ et $y = y_n$, on a, pour toutes surfaces normales à x , S_1 et S_2 :

$$\int_{S_1} \vec{\Phi} \cdot \vec{n} dS = \int_{S_2} \vec{\Phi} \cdot \vec{n} dS, \quad (5.20)$$

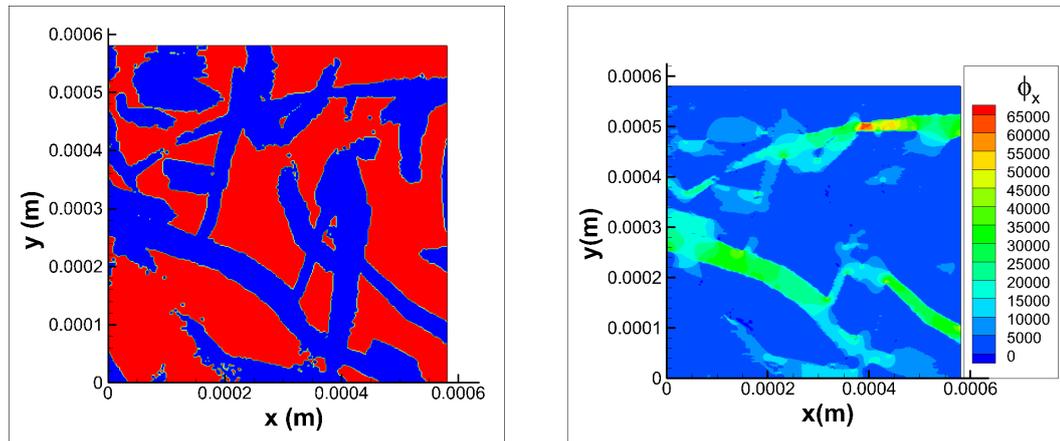
soit :

$$\langle \Phi_x \rangle_{S_1} = \langle \Phi_x \rangle_{S_2}. \quad (5.21)$$

Comme expliqué dans la partie 5.3 lors du calcul de Γ_{eq} nécessitant $\langle \Phi_x \rangle$, nous devons pondérer par 1/2 les flux associés aux nœuds situés sur les frontières du domaine. Pour vérifier que cette pondération est nécessaire, nous avons calculé les flux moyens sur des lignes normales à x sur une morphologie 2D de LDF en diffusion thermique. La figure 5.15 présente les moyennes du flux Φ_x calculées sur les lignes $x = x_i$ en régime permanent en fonction de x_i , avec ou sans la pondération de 1/2 sur les flux aux frontières. On remarque qu'en régime permanent, avec la pondération, la moyenne $\langle \Phi_x \rangle_{x_i}$ est bien la même à chaque x_i . À l'inverse, sans la pondération, les $\langle \Phi_x \rangle_{x_i}$ varient en fonction du x_i , jusqu'à 0,4 % environ. Cela confirme que les pondérations présentées dans la partie 5.3 sont nécessaires puisqu'elles permettent d'obtenir l'égalité des $\langle \Phi_x \rangle_{x_i}$ prédite par l'équation (5.21).

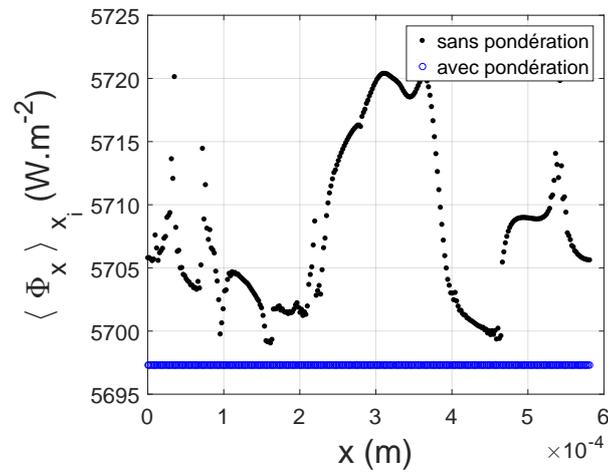
D'après l'équation (5.21), si le $\langle \Phi_x \rangle$ d'entrée est proche du $\langle \Phi_x \rangle$ de sortie, le calcul peut donc être arrêté car on est proche du régime permanent. Nous définissons alors le paramètre de convergence $\Delta F/F$ suivant :

$$\Delta F/F = \frac{\langle \Phi_x \rangle_{x_1+\delta x,t} - \langle \Phi_x \rangle_{x_m-\delta x,t}}{\langle \Phi_x \rangle_t} \quad (5.22)$$



(a) Morphologie 2D de LDF, résolution du réseau : 300×300

(b) Φ_x (W m⁻¹ K⁻¹) en régime permanent



(c) Moyenne de Φ_x à chaque x_i , avec et sans pondération

FIGURE 5.15 – Mise en évidence de la nécessité d'appliquer une pondération sur les flux aux frontières.

où $\langle \Phi_x \rangle_t$ est le flux selon x moyenné sur l'ensemble du domaine au temps t alors que $\langle \Phi_x \rangle_{x_1+\delta x,t}$ et $\langle \Phi_x \rangle_{x_m-\delta x,t}$ sont les flux selon x moyennés seulement sur des lignes à x constant (les côtés gauche et droit du domaine, respectivement). Notons que $\langle \Phi_x \rangle$ est calculé en $x_1 + \delta x$ et $x_m - \delta x$ au lieu de x_1 et x_m pour éviter les problèmes aux frontières.

Il faut ensuite déterminer à partir de quelle valeur de ce paramètre, on estime que le régime permanent est atteint. Pour cela, le paramètre de convergence $\Delta F/F$ et l'erreur faite sur Γ_{eq} , ϵ_Γ sont tracés au fur et à mesure des itérations :

$$\epsilon_\Gamma = \frac{\Gamma_{eq,t} - \Gamma_{eq,\infty}}{\Gamma_{eq,\infty}} \quad (5.23)$$

avec $\Gamma_{eq,t}$ la propriété équivalente au temps t et $\Gamma_{eq,\infty}$ la valeur de référence obtenue par la solution analytique si elle existe ou après un très grand nombre d'itérations s'il n'y a pas de solution analytique (1×10^6 pour le cas thermique et 5×10^6 pour le cas massique représentés sur la figure 5.16).

Avec certaines géométries (homogène, parallèle, inclusion), l'erreur faite sur Γ_{eq} décroît très rapidement même lorsque le régime stationnaire n'est pas du tout atteint. En effet, le calcul de Γ_{eq} est une moyenne sur tout le domaine et peut donc donner de très bons résultats avant que le régime permanent ne soit atteint, le flux en sortie « petit » étant compensé par le flux en entrée « grand ». On réalise donc l'étude sur deux autres morphologies, série et bois initial d'épicéa, pour lesquelles la valeur de Γ_{eq} converge plus « lentement ».

Les résultats, dans le cas du bois initial, sont présentés sur la figure 5.16. Quand le paramètre de convergence diminue, l'erreur faite sur Γ_{eq} diminue aussi. On fixe le critère de convergence, $\Delta F/F = 10^{-2}$, qui permet d'avoir une erreur sur Γ_{eq} faible, de l'ordre de 10^{-4} dans le cas du bois initial et de l'ordre de 10^{-2} dans le cas d'une géométrie série.

5.6 Réduction du temps de calcul

Exécuter des calculs 3D jusqu'à atteindre le régime permanent sur un large domaine requiert de grands temps de calcul. Pour réduire le temps de calcul total, nous avons cumulé deux stratégies : paralléliser le code en *OpenMP* et utiliser des facteurs de relaxation successifs.

5.6.1 Parallélisation du code en *OpenMP*

Comme dit précédemment, l'un des avantages de la méthode Lattice Boltzmann est qu'il est assez aisé de paralléliser les codes de calcul grâce à la formulation locale. Le temps de calcul sur des morphologies 3D de taille typique $200 \times 200 \times 200$ nœuds pouvant atteindre plusieurs semaines, nous avons procédé à la parallélisation du code LB afin de réduire ce temps de calcul. Dans cette

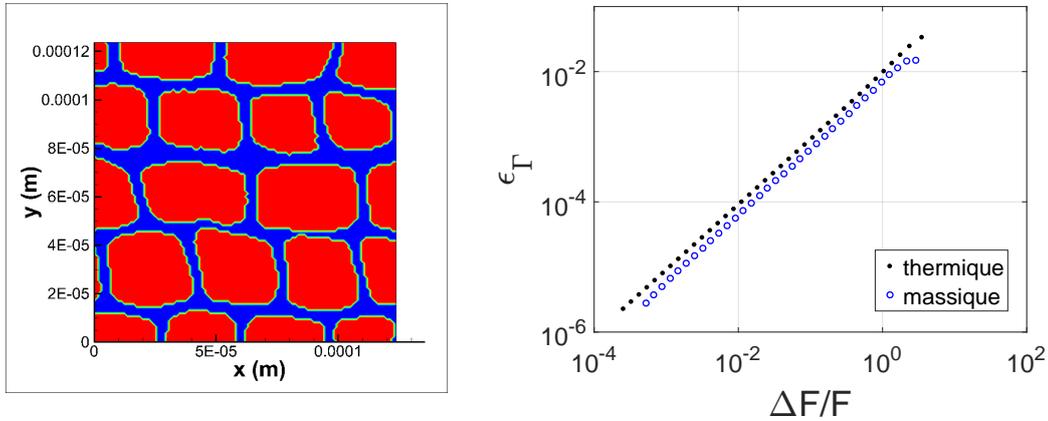


FIGURE 5.16 – Calcul de l'erreur faite sur Γ_{eq} et du paramètre de convergence à différents pas de temps sur une morphologie d'épicéa. Pour la diffusion thermique, un point est tracé toutes les 2×10^4 itérations, pour la diffusion massique, un point est tracé toutes les 12×10^4 itérations.

partie, on présente d'abord les principes de *OpenMP* qui est utilisé pour réaliser la parallélisation. On explique ensuite comment le code a été implémenté en *OpenMP*.

Ce travail a été réalisé grâce aux supports de cours de l'Idris [Chergui et Lavallée, 2015] et de Cédric Bastoul (Université de Strasbourg) [Bastoul, 2016].

Présentation de *OpenMP*

OpenMP (*Open Multi-Processing*) est une interface de programmation pour le calcul parallèle sur architecture à mémoire partagée (contrairement à *MPI* – pour *Message Passing Interface* – qui est un modèle de programmation à mémoire distribuée). *OpenMP* est un standard industriel mature et répandu. Il présente de bonnes performances, avec un effort de programmation raisonnable et il est portable.

La parallélisation repose sur l'utilisation de processus système légers (appelés *threads*). Un *thread* est une entité d'exécution avec une mémoire locale. Une tâche est une instance de code exécutable et ses données associées.

Tous les *threads* ont accès à la même mémoire partagée mais chaque *thread* possède également sa propre mémoire privée. Les tâches de calcul peuvent ainsi accéder à un espace mémoire commun, ce qui limite la redondance des données et simplifie les échanges d'information entre les tâches. Les données privées sont accessibles seulement par le *thread* correspondant.

OpenMP permet de définir des régions parallèles, c'est à dire des portions de code destinées à être exécutées en parallèle. Un programme *OpenMP* est une alternance de régions séquentielles et de régions parallèles comme l'illustre la

figure 5.17. À l'entrée d'une région parallèle, le *thread* maître crée des *threads* travailleurs et autant de tâches implicites. Au sein d'une même région parallèle, tous les *threads* exécutent chacun une tâche implicite différente, mais composée du même code. Les *threads* travailleurs disparaissent en fin de région parallèle. L'exécution redevient alors séquentielle avec uniquement l'exécution du *thread* maître.

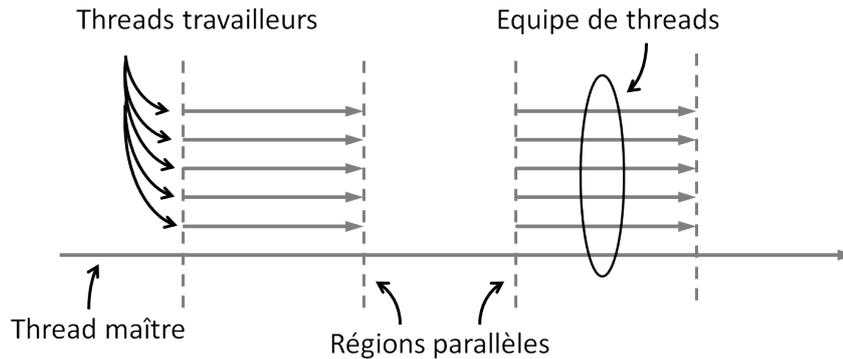


FIGURE 5.17 – Un programme *OpenMP* est une succession de régions parallèles et séquentielles.

Pour qu'un code soit exécuté en parallèle, il faut lui ajouter des directives interprétées par le compilateur. Nous présentons uniquement celles utilisées dans le code développé. La construction de régions parallèles se fait par la directive **PARALLEL**. À l'intérieur d'une région parallèle, le partage du travail entre les *threads* peut se faire de différentes façons :

- la directive **DO** répartit les itérations d'une boucle entre les *threads*. Une boucle est parallèle si toutes ses itérations sont indépendantes les unes des autres ;
- la directive **SECTIONS** répartit l'exécution de plusieurs portions de code indépendantes entre différents *threads*. Au sein de cette construction, la directive **SECTION** définit une portion de code exécutée par un et un seul *thread*.

Une ligne de code *OpenMP* commence par une sentinelle propre au langage utilisé et est interprétée s'il y a l'option *OpenMP* à l'appel du compilateur, sinon c'est un commentaire. C'est ce qui confère son caractère portable à la méthode. Pour le langage Fortran, en format libre, la sentinelle est : `!$ OMP`.

Implémentation de *OpenMP*

Les parties suivantes du code ont été parallélisées :

- la boucle de la collision avec l'instruction `!$ OMP DO` ;
- les différentes boucles de propagation avec l'instruction `!$ OMP SECTIONS`.
La propagation d'un f_k sur tout le domaine est réalisée par un seul *thread*

avec l'instruction `!$ OMP SECTION`. Seuls six *threads* sont donc sollicités en 3D, f_0 n'étant pas propagé ;

- les différentes boucles de conditions aux limites avec l'instruction `!$ OMP SECTIONS`. L'application des conditions aux limites sur une face est réalisée par un seul *thread* avec l'instruction `!$ OMP SECTION`.

Dans la boucle de collision, la fonction d'équilibre f_k^{eq} est calculée à chaque nœud du domaine et pour chaque f_k . Quand le travail est réparti sur plusieurs *threads*, chaque *thread* calcule alors des f_k^{eq} différents en même temps. Dans cette situation, quand certaines variables sont utilisées et calculées en parallèle dans des *threads* différents, il faut donner le statut `PRIVATE` à ces variables.

Nous avons également suivi deux règles pour optimiser la parallélisation en *OpenMP* :

- ne pas paralléliser les boucles faisant référence à la première dimension d'un tableau multi-dimensionnel ;
- minimiser le nombre de régions parallèles dans le code en mettant les instructions sur la collision et la propagation dans la même région (vu qu'elles se trouvent dans la même *subroutine*).

D'après des tests réalisés sur une morphologie de LDF de taille $100 \times 100 \times 100$ nœuds, cette parallélisation permet de diviser par 4 le temps de calculs en utilisant 6 *threads* (sur une machine ayant 6 cœurs).

5.6.2 Utilisation de facteurs de relaxation successifs

Pour diminuer encore le temps de calcul, nous avons développé une méthode consistant à faire tourner le code LB pour des facteurs de relaxation successifs, en commençant par de petites valeurs, ce qui permet d'avancer plus vite vers le régime permanent, et en augmentant jusqu'à $\omega_{min}^{opt} = 1,4$ comme fixé dans la partie 5.4 afin de retrouver une bonne précision. Quand le critère de convergence défini dans la partie 5.5 est atteint avec le premier ω_{min}^1 , le code est relancé avec le facteur ω_{min}^2 suivant et ainsi de suite. Le résultat final est obtenu pour $\omega_{min}^{opt} = 1,4$.

Nous avons testé la séquence $\omega_{min}^{1;2;3;4;5} = \{0,1; 0,3; 0,5; 1; 1,4\}$ sur une morphologie de LDF de taille $100 \times 100 \times 100$ en diffusion thermique. Les résultats sont présentés dans le tableau 5.1, pour deux critères de convergence $\Delta F/F = 10^{-1}$ et $\Delta F/F = 10^{-2}$. La référence pour le calcul de l'erreur et du gain de temps est donnée par le cas $\omega_{min} = 1,4$.

Pour $\Delta F/F = 10^{-2}$, le recours à plusieurs ω_{min} permet de diviser le temps de calcul d'un facteur 14 tout en ayant une erreur sur λ_{eq} de seulement 1 % par rapport au résultat obtenu avec un seul ω_{min} fixé à 1,4. On remarque que même si le temps de calcul est beaucoup plus faible pour $\Delta F/F = 10^{-1}$ et que le gain de temps est plus grand en utilisant plusieurs facteurs de relaxation (temps de calcul divisé d'un facteur 24), la précision sur la conductivité équivalente obtenue

est mauvaise puisque l'erreur est de 4,5 %. Nous avons donc choisi de travailler avec le critère $\Delta F/F = 10^{-2}$.

$\Delta F/F$	ω_{min}	$\lambda_{eq}(10^{-2} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1})$	Nb itérations	ϵ_λ	Facteur
10^{-1}	1,4	7,8624	978×10^3	/	/
	0,1; 0,3; 0,5; 1; 1,4	8,2164	40×10^3	4,50 %	24
10^{-2}	1,4	7,8709	1704×10^3	/	/
	0,1; 0,3; 0,5; 1; 1,4	7,9562	120×10^3	1,08 %	14

TABLE 5.1 – Conductivités thermiques équivalentes, nombre d'itérations, erreur sur λ_{eq} et facteur de gain de temps obtenus pour deux critères de convergence et pour différents ω_{min} . La référence pour le calcul de l'erreur et du gain de temps est donnée par le cas $\omega_{min} = 1,4$.

L'effet conjugué de ces deux stratégies permet de diminuer le temps de calcul d'un facteur $4 \times 14 = 56$. Pour un calcul de diffusion thermique sur une morphologie de LDF de taille $100 \times 100 \times 100$, on passe ainsi de plusieurs jours à quelques heures de calcul.

5.7 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté la méthodologie pour déterminer les propriétés équivalentes d'un matériau avec la méthode Lattice Boltzmann tout en limitant le temps de calcul. Nous avons d'abord détaillé la façon d'implémenter un milieu hétérogène et les étapes de collision et de propagation. Nous avons ensuite testé les conditions aux limites de Dirichlet et Neumann présentées dans le chapitre précédent. La condition de glissement a été choisie pour implémenter une condition de flux normal nul et une méthode pour traiter les coins a été développée. Nous avons alors expliqué comment calculer une propriété équivalente et la code a pu être validé. Ensuite, nous avons étudié l'influence de la taille du maillage et du facteur de relaxation sur la précision des calculs. Un compromis entre précision et temps de calcul est obtenu pour $\omega_{min}^{opt} = 1,4$. Un critère de convergence a également été défini : quand la différence entre les flux moyens selon x d'entrée et de sortie du domaine est inférieure à 10^{-2} , on estime que le régime permanent est atteint. Enfin, on a travaillé sur la diminution du temps de calcul par la parallélisation du code en *OpenMP* et par l'utilisation de facteurs de relaxation successifs : $\omega_{min} = \{0,1; 0,3; 0,5; 1; 1,4\}$. Le gain total sur le temps de calcul est d'un facteur 56.

En conclusion de cette partie, l'algorithme implémenté est illustré sur la figure 5.18. Il sera utilisé pour obtenir les résultats de diffusion thermique et massique présentés dans le chapitre 6.

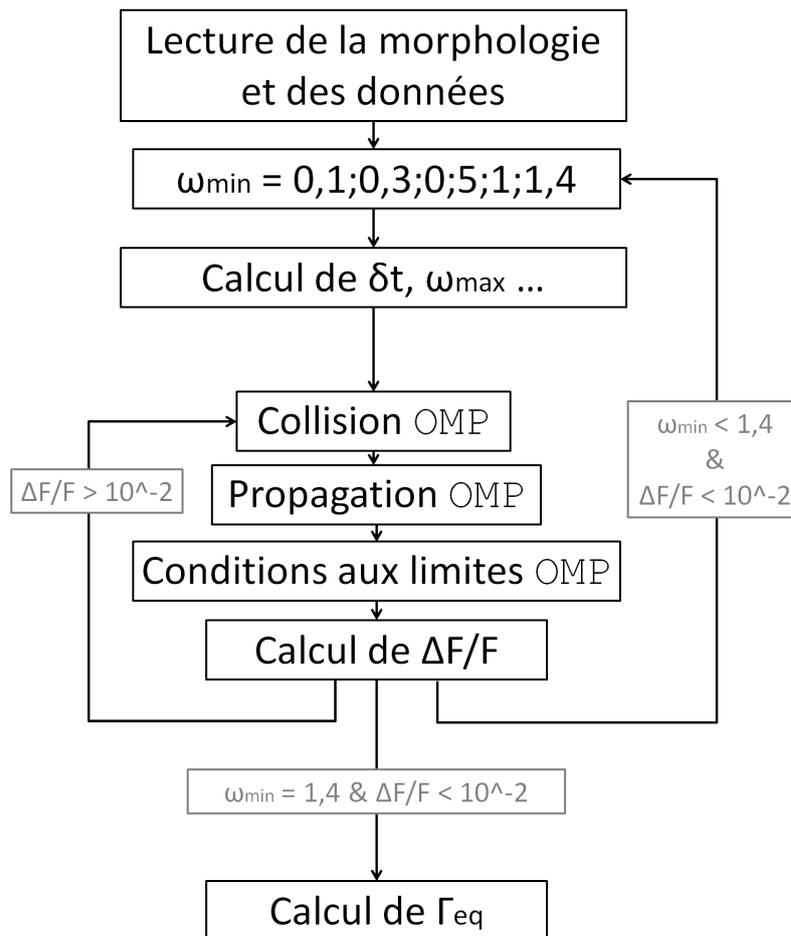


FIGURE 5.18 – Schéma de l'algorithme utilisé.

Chapitre 6

Calcul de propriétés équivalentes de matériaux biosourcés

Le code Lattice Boltzmann optimisé (dont le développement a été présenté au chapitre 5) est utilisé pour calculer les propriétés équivalentes de différents matériaux biosourcés à partir des morphologies qui ont été déterminées au chapitre 3. Dans ce chapitre, nous présentons et analysons les résultats ainsi obtenus. Dans la partie 6.1, on expose d’abord les caractéristiques du code Lattice Boltzmann utilisé pour réaliser les calculs de diffusion 3D. On étudie également, dans la partie 6.2, l’influence de la taille des volumes sélectionnés sur la valeur de la propriété équivalente calculée. Ensuite, on détaille les résultats (conductivités thermiques et diffusivités massiques) obtenus pour l’épicéa et les panneaux de fibres dans les parties 6.3 et 6.4 respectivement. Enfin, dans la partie 6.5, on analyse les résultats en comparant les conductivités et les diffusivités des différents matériaux et, pour un même matériau, en examinant les différences selon les directions de diffusion. Des familles de morphologies sont également identifiées.

Sommaire

6.1	Développement du code 3D	100
6.1.1	Conditions aux limites	100
6.1.2	Propriétés des phases du milieu hétérogène	102
6.2	Étude sur la représentativité des volumes sélectionnés	103
6.3	Propriétés équivalentes d’épicéa	104
6.4	Propriétés équivalentes de panneaux de fibres	106
6.5	Analyse des résultats	110
6.5.1	Diffusion thermique	110
6.5.2	Diffusion massique	113
6.5.3	Familles de morphologies	116
6.6	Conclusion du chapitre	118

6.1 Développement du code 3D

Pour réaliser des simulations de diffusion thermique et massique sur les morphologies définies au chapitre 3, on utilise le code Lattice Boltzmann D_3Q_7 développé pour ce travail de thèse. Le critère de convergence $\Delta F/F = 10^{-2}$ et la séquence de facteurs de relaxation $\omega_{min} = \{0,1 ; 0,3 ; 0,5 ; 1 ; 1,4\}$ déterminés au chapitre 5 sont implémentés, tout comme la parallélisation en *OpenMP*.

6.1.1 Conditions aux limites

Les conditions aux limites macroscopiques correspondent aux conditions dictées par la théorie de l'homogénéisation en considérant que le domaine maillé correspond à 1/8 d'un VER ayant trois plans de symétrie (cf. remarque p. 30 dans le chapitre 2). On fixe sur deux côtés opposés les conditions aux limites de Dirichlet pour imposer un gradient macroscopique et les conditions aux limites de Neumann (flux normal nul) sur les quatre autres côtés comme illustré sur les figures 6.1a et 6.1b. Les huit coins sont implémentés avec une condition combinée Dirichlet/Neumann (cf. figure 6.1d). Les arêtes en revanche ne sont pas toutes implémentées de la même façon vu que quatre arêtes se situent à l'intersection de deux faces où la condition de flux normal nul est imposée alors que huit arêtes se situent à l'intersection d'une face où la condition de Dirichlet est imposée et d'une autre face où la condition de flux normal nul est imposée (cf. figure 6.1c).

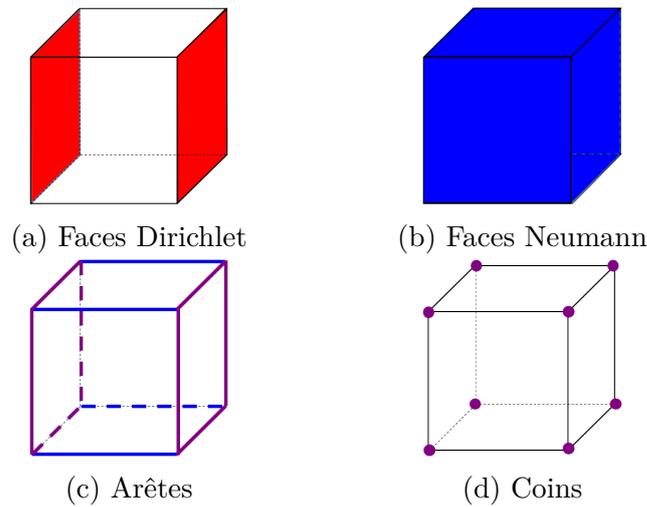


FIGURE 6.1 – Conditions aux limites imposées en 3D. Les conditions aux limites de Dirichlet sont imposées sur deux faces opposées (rouge), les conditions aux limites de Neumann (flux normal nul) sur les quatre autres faces (bleu). Certaines arêtes sont soumises aux conditions de Neumann (bleu), d'autres sont soumises à des conditions combinées Dirichlet/Neumann (violet). Les huit coins sont soumis à des conditions combinées Dirichlet/Neumann (violet).

Pour implémenter de telles conditions aux limites avec un schéma D_3Q_7 , on adapte simplement ce qui a été présenté pour le schéma D_2Q_9 au chapitre 5. La géométrie du schéma D_3Q_7 est rappelée sur la figure 6.2. On remarquera que, sur chaque face, une seule fonction de distribution est inconnue ce qui simplifie les équations pour fixer les conditions aux limites.

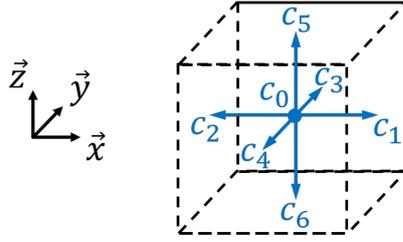


FIGURE 6.2 – Schéma de vitesse D_3Q_7 .

Sur la face ($x = 0$) soumise à la condition aux limites de Dirichlet, seule la fonction de distribution f_1 est inconnue. On la détermine ainsi très simplement :

$$f_1 = \Psi_0 - f_0 - f_2 - f_3 - f_4 - f_5 - f_6. \quad (6.1)$$

L'implémentation de la face ($x = L_x$) est équivalente pour la valeur de f_2 .

Sur la face ($y = 0$) soumise aux conditions de Neumann, on impose très simplement un flux nul selon y par l'égalité des valeurs alignées sur la normale :

$$f_3 = f_4. \quad (6.2)$$

Les calculs pour les trois autres faces ($y = L_y$); ($z = 0$); ($z = L_z$) se déduisent facilement.

L'arête ($y = 0 \cap z = 0$) est située à l'intersection de deux faces auxquelles on impose une condition de flux normal nul. Les deux fonctions de distribution inconnues, f_3 et f_5 , sont déterminées par :

$$\begin{cases} f_3 = f_4 \\ f_5 = f_6 \end{cases}. \quad (6.3)$$

On traite de la même façon les arêtes ($y = 0 \cap z = L_z$); ($y = L_y \cap z = 0$) et ($y = L_y \cap z = L_z$).

Sur l'arête ($x = 0 \cap y = 0$), située entre une face soumise à une condition de Dirichlet et une face soumise à une condition de flux normal nul, on impose à la fois le flux nul selon y et le scalaire Ψ_0 :

$$\begin{cases} f_3 = f_4 \\ f_1 = \Psi_0 - f_0 - f_2 - f_3 - f_4 - f_5 - f_6 \end{cases}. \quad (6.4)$$

Les fonctions de distribution inconnues des arêtes ($x = 0 \cap y = L_y$); ($x = 0 \cap z = 0$); ($y = 0 \cap z = L_z$); ($x = L_x \cap y = 0$); ($x = L_x \cap y = L_y$); ($x = L_x \cap z = 0$) et ($x = L_x \cap z = L_z$) sont calculées de la même manière.

Enfin, pour le coin ($x = 0 \cap y = 0 \cap z = 0$), trois fonctions de distribution sont inconnues et on fixe une condition combinée Dirichlet/Neumann :

$$\begin{cases} f_3 = f_4 \\ f_5 = f_6 \\ f_1 = \Psi_0 - f_0 - f_2 - f_3 - f_4 - f_5 - f_6 \end{cases} . \quad (6.5)$$

Les sept autres coins sont traités de façon similaire.

6.1.2 Propriétés des phases du milieu hétérogène

Le calcul des propriétés effectives d'un milieu est un changement d'échelle qui permet de calculer les propriétés macroscopiques en fonction de l'agencement des différentes phases du milieu et de leurs propriétés. Dans le cas de matériaux biosourcés et contrairement à d'autres matériaux, il n'est pas possible d'avoir accès à la phase solide seule. Les propriétés de la phase solide sont donc déterminées indirectement. Pour la conduction thermique, des travaux précédents ont montré que la paroi végétale, constituée de macromolécules organiques, a une conductivité proche de l'unité. Pour la diffusivité massique, les seules données disponibles proviennent d'une étude de 1959 [Stamm, 1959]. Dans ce travail très original, l'auteur a rempli les pores du bois d'un métal liquide afin d'inhiber la contribution de la phase gazeuse. Ce travail a été repris par Siau pour exprimer la diffusivité massique de la paroi en fonction de la teneur en eau.

En nous référant à ces travaux, les conductivités thermiques des phases solide et gazeuse sont fixées à $\lambda_s = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et $\lambda_g = 0,023 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ respectivement [Perré *et al.*, 2015].

Pour la diffusion massique, nous utilisons la diffusivité massique adimensionnée D^* qui est le rapport entre la diffusivité du matériau et celle de l'air [Perré et Turner, 2005]. Par conséquent, cette valeur varie entre 0 et 1. Les valeurs de D^* utilisées pour les phases solide et gazeuse sont $D_s^* = 0,004$ et $D_g^* = 1$ respectivement. Ces valeurs sont représentatives de la diffusion d'eau liée dans le bois à une teneur en eau d'environ 12 % [Siau, 1984].

Pour chaque morphologie, on calcule aussi les valeurs de propriétés équivalentes les plus basses (phases hétérogènes placées en série) et les plus hautes possibles (phases hétérogènes placées en parallèle) :

$$\Gamma_{\perp} = \frac{1}{\frac{1-\epsilon_s}{\Gamma_g} + \frac{\epsilon_s}{\Gamma_s}} \quad (6.6)$$

$$\Gamma_{\parallel} = (1 - \epsilon_s)\Gamma_g + \epsilon_s\Gamma_s \quad (6.7)$$

où Γ représente λ pour la diffusion thermique ou D^* pour la diffusion massique et ϵ_s est la fraction solide. On pourra ainsi comparer les propriétés équivalentes des matériaux étudiés à ces valeurs extrêmes.

Les simulations sont réalisées dans les trois directions matérielles du bois (radiale (R), tangentielle (T) et longitudinale (L)) et dans trois directions des panneaux de fibres ((p_1) et (p_2) les deux directions orthogonales situées dans le plan du panneau et (t) la direction normale au plan, *i.e.* la direction transversale au panneau). Ces différentes directions sont illustrées sur la figure 6.3 dans le cas des sélections de bois final BF et de panneau de fibres LDF1.

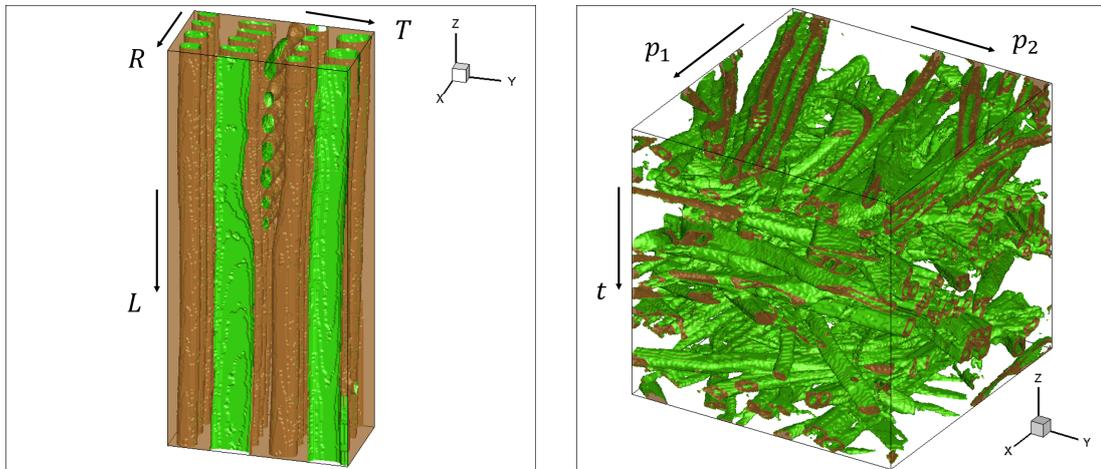


FIGURE 6.3 – Directions dans lesquelles sont réalisés les calculs : directions radiale (R), tangentielle (T) et longitudinale (L) pour l'épicéa ; deux directions orthogonales situées dans le plan du panneau (p_1 et p_2) et direction transversale (t) pour les panneaux de fibres.

L'exécution du code LB jusqu'à atteindre le régime permanent sur un réseau d'environ $200 \times 200 \times 200$ nœuds nécessite un jour de calcul avec un Intel Xeon x5650 à 2,67 GHz. Notons que le temps de calcul est beaucoup plus élevé (autour d'une semaine et jusqu'à quatre semaines pour les cas les plus défavorables) quand c'est la phase connectée qui a une faible diffusivité (diffusion massique pour le bois, diffusion thermique pour les fibres).

6.2 Étude sur la représentativité des volumes sélectionnés

Pour calculer des propriétés équivalentes de matériaux, il faut s'assurer que les volumes sélectionnés sont représentatifs. En raison du temps de calcul, nous avons limité cette analyse aux sélections BI2 et MDF1 en calculant les propriétés

équivalentes pour plusieurs tailles croissantes de sous-volumes. Ceux-ci sont déterminés en considérant des tranches de matériaux d'épaisseur croissante dans la direction transversale pour BI2 (cf. figures 6.4a-6.4c) et dans la direction radiale pour MDF1 (cf. figures 6.5a-6.5c). Les propriétés équivalentes sont calculées dans ces directions.

L'évolution de la conductivité thermique et de la diffusivité massique en fonction de l'épaisseur des sous-volumes considérés est tracée sur les figures 6.4 et 6.5. Selon le cas, l'épaisseur est exprimée en pourcentage de la dimension radiale de la sélection BI2 (L_R) ou en pourcentage de la dimension transversale de la sélection MDF1 (L_t).

On observe sur la figure 6.4 que, dans le cas du bois initial, la conductivité thermique atteint tout de suite un plateau. La diffusivité massique quant à elle est d'abord élevée puis diminue quand l'épaisseur du sous-volume augmente avant d'atteindre également un plateau. Quand seule une tranche fine de matériau est considérée comme sur la figure 6.4a, la diffusivité massique est élevée car la phase gazeuse – phase conductrice pour la diffusion massique – est connectée ce qui cause un court-circuit. Les deux propriétés atteignant un plateau, la dimension du volume de bois initial est suffisante dans la direction radiale.

Sur la figure 6.5, on remarque que la conductivité thermique semble atteindre un plateau quand la dimension transversale du sous-volume atteint celle de la sélection MDF1 (quelques points supplémentaires auraient permis de le confirmer). De plus, comme dans le cas du bois initial, la diffusivité massique du panneau de MDF diminue avant d'atteindre un plateau.

Finalement, les sélections BI2 et MDF1 peuvent effectivement être considérées comme des volumes représentatifs dans les directions radiale et transversale respectivement.

6.3 Propriétés équivalentes d'épicéa

L'ensemble des résultats pour les trois morphologies d'épicéa (deux de bois initial, une de bois final), en diffusion thermique et massique, est présenté dans le tableau 6.1. Pour chaque morphologie, on rappelle la fraction solide ϵ_s et on donne les valeurs minimale et maximale de la conductivité thermique et de la diffusivité massique fournies par les modèles analytiques série et parallèle respectivement.

Entre les deux morphologies de bois initial, les résultats sont très proches puisque les microstructures sont évidemment similaires et que les fractions solides ont des valeurs proches (0,29 et 0,26). La conductivité thermique dans la direction tangentielle est plus petite que celle calculée dans la direction radiale, elle-même plus petite que celle dans la direction longitudinale. Les diffusivités thermiques sont classées dans le même ordre.

Le bois final étant plus dense que le bois initial, il est moins isolant et présente donc des conductivités thermiques plus élevées dans toutes les directions. Cette

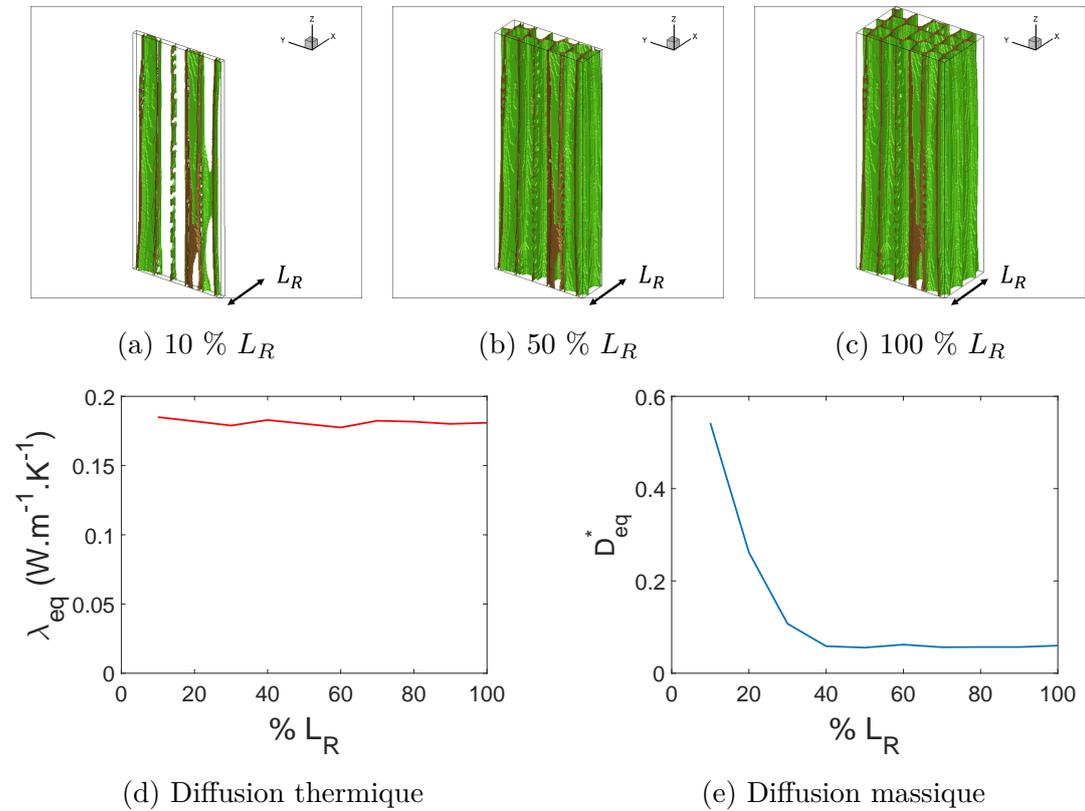


FIGURE 6.4 – Calcul de propriétés équivalentes dans la direction radiale de sous-volumes de la sélection BI2.

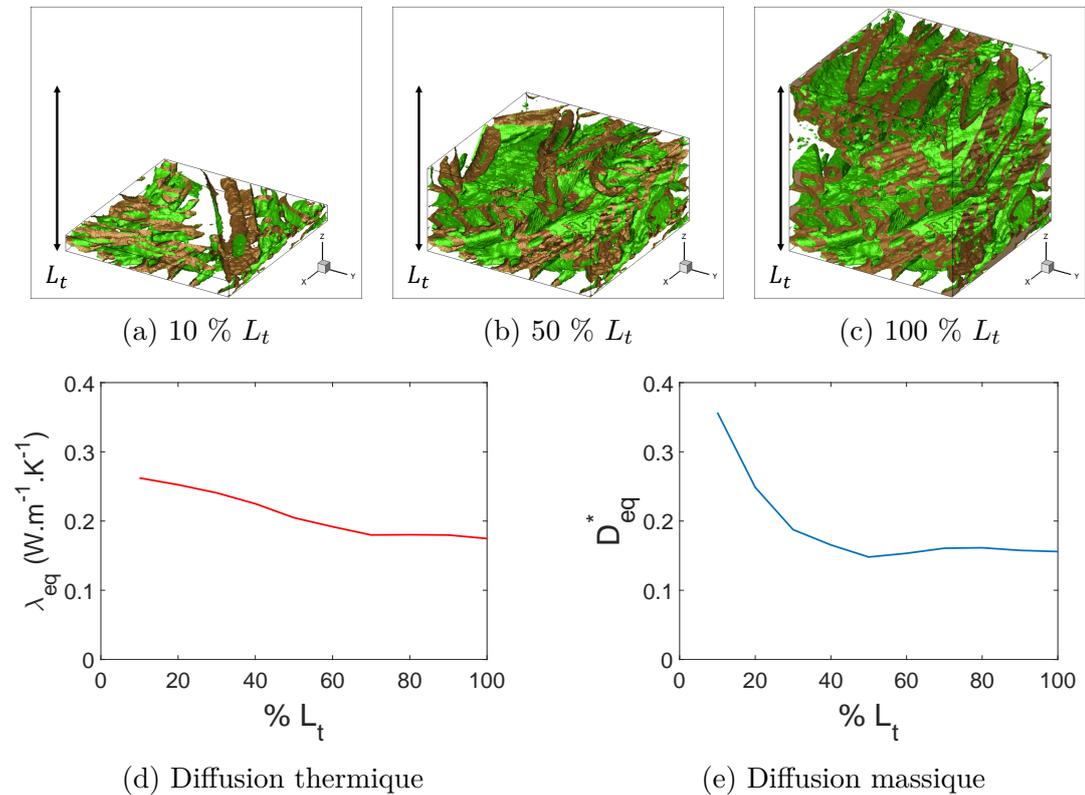


FIGURE 6.5 – Calcul de propriétés équivalentes dans la direction transversale de sous-volumes de la sélection MDF1.

Matériau	ϵ_s	thermique			analytique		massique			analytique	
		λ_R	λ_T	λ_L	λ_{\perp}	λ_{\parallel}	D_R^*	D_T^*	D_L^*	D_{\perp}^*	D_{\parallel}^*
BI1	0,29	0,18	0,14	0,29	0,032	0,30	0,061	0,041	0,68	0,014	0,71
BI2	0,26	0,18	0,12	0,27	0,031	0,28	0,060	0,039	0,72	0,015	0,74
BF	0,74	0,51	0,63	0,74	0,083	0,74	0,013	0,0088	0,24	0,0054	0,26

TABLE 6.1 – Conductivités thermiques et diffusivités massiques équivalentes de bois initial et de bois final d’épicéa dans les directions radiale (R), tangentielle (T) et longitudinale (L).

fois-ci la conductivité radiale est la plus petite, la conductivité longitudinale est toujours la plus élevée. À l’inverse, les diffusivités massiques du bois final sont plus petites que celles du bois initial ce qui s’explique aussi par la fraction solide plus grande. La diffusivité tangentielle est particulièrement petite ($D_T^* = 0,0088$).

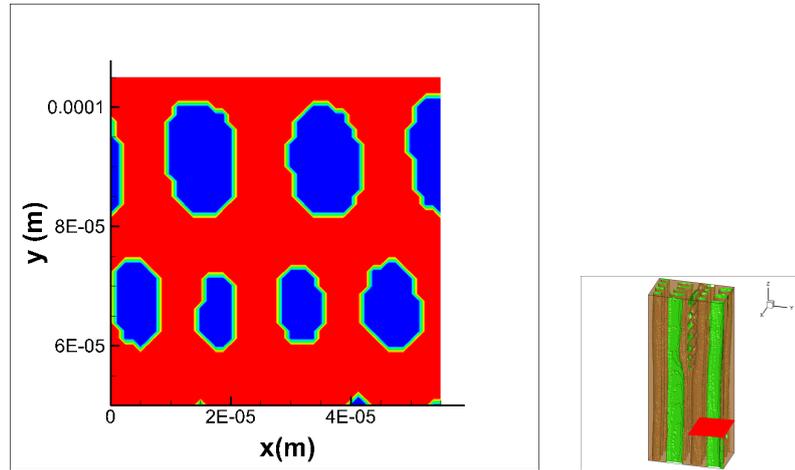
Dans la direction longitudinale – que ce soit dans le bois initial ou dans le bois final – les propriétés équivalentes thermique et massique sont toujours très proches du modèle parallèle.

Ces résultats témoignent de l’effet de la disposition des phases sur l’anisotropie des propriétés équivalentes chez l’épicéa, les propriétés variant significativement d’une direction à l’autre. Pour la morphologie de bois final, il y a notamment un facteur 27 entre les diffusivités massiques longitudinale et tangentielle. En outre, les valeurs radiales et tangentielles calculées sont en accord avec des résultats de la littérature [Perré *et al.*, 2015]. Par exemple, dans la direction radiale, les auteurs évaluent la conductivité thermique du bois final à $0,57 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ pour une fraction solide de 0,78. Nous trouvons de notre côté $\lambda_R = 0,51 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ce qui est similaire mais inférieur puisque dans notre cas $\epsilon_s = 0,74$. Pour l’épicéa, il est difficile de comparer nos résultats à des valeurs expérimentales puisque nous avons étudié séparément le bois initial et le bois final.

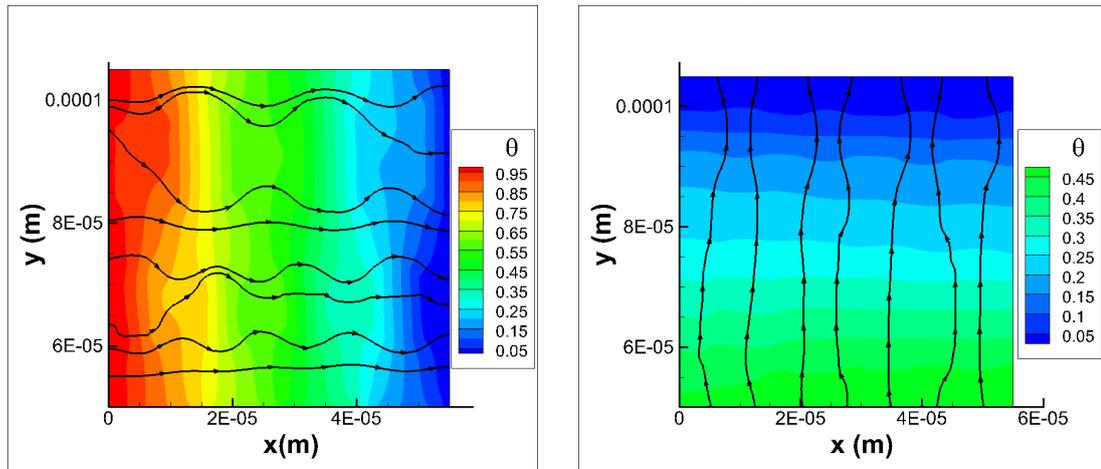
La figure 6.6 illustre des exemples de champs normalisés de température et de lignes de courant obtenus en régime permanent dans du bois final d’épicéa. La diffusion thermique est simulée dans les directions radiale et tangentielle et seul un plan transversal est représenté. En comparant la position des lignes de courant à la morphologie de bois final, on observe que le flux de chaleur tire profit de la phase connectée et conductrice (la phase solide), en évitant les inclusions de faible conductivité (les lumens).

6.4 Propriétés équivalentes de panneaux de fibres

L’ensemble des résultats de diffusion thermique et massique dans les panneaux de fibres (cinq morphologies de LDF et cinq de MDF) est présenté dans le tableau 6.2. Pour chaque morphologie, on rappelle la fraction solide ϵ_s et on donne



(a) Plan transversal de bois final d'épicéa



(b) Diffusion dans la direction radiale

(c) Diffusion dans la direction tangentielle

FIGURE 6.6 – Champs normalisés de température et lignes de courant dans le cas de la diffusion de chaleur dans les directions radiale et tangentielle dans du bois final d'épicéa ($x = R$ et $y = T$). On représente uniquement un plan transversal. Seule la moitié de l'échantillon est montrée dans la direction tangentielle.

les valeurs minimale et maximale de la conductivité thermique et de la diffusivité massique.

Matériau	ϵ_s	thermique			analytique		massique			analytique	
		λ_{p_1}	λ_{p_2}	λ_t	λ_{\perp}	λ_{\parallel}	$D_{p_1}^*$	$D_{p_2}^*$	D_t^*	D_{\perp}^*	D_{\parallel}^*
LDF1	0,18	0,11	0,11	0,045	0,028	0,20	0,68	0,69	0,52	0,022	0,82
LDF2	0,20	0,13	0,098	0,065	0,029	0,22	0,65	0,51	0,43	0,020	0,80
LDF3	0,17	0,099	0,098	0,045	0,027	0,18	0,70	0,70	0,53	0,024	0,84
LDF4	0,31	0,26	0,15	0,095	0,033	0,32	0,59	0,27	0,14	0,013	0,70
LDF5	0,13	0,088	0,082	0,037	0,026	0,15	0,78	0,76	0,60	0,030	0,87
MDF1	0,43	0,31	0,25	0,17	0,039	0,44	0,37	0,24	0,16	0,0093	0,58
MDF2	0,49	0,32	0,33	0,17	0,044	0,50	0,28	0,27	0,14	0,0082	0,52
MDF3	0,49	0,31	0,36	0,25	0,044	0,50	0,21	0,26	0,16	0,0082	0,51
MDF4	0,45	0,29	0,31	0,20	0,41	0,46	0,28	0,28	0,17	0,0083	0,55
MDF5	0,31	0,17	0,17	0,10	0,033	0,32	0,48	0,47	0,34	0,013	0,70

TABLE 6.2 – Conductivités thermiques et diffusivités massiques équivalentes de LDF et de MDF dans les directions incluses dans le plan du panneau (p_1) et (p_2) et dans la direction transversale (t).

Les fractions solides des différentes morphologies de LDF variant du simple au double, les propriétés thermique et massique varient également sensiblement. Les conductivités thermiques et diffusivités massiques sont les plus faibles dans la direction transversale.

Le MDF étant plus dense que le LDF, ses conductivités thermiques sont plus élevées que celles du LDF et ses diffusivités massiques plus faibles quelle que soit la direction considérée. Comme pour le LDF, les conductivités thermiques et diffusivités massiques transversales du MDF sont plus petites que celles calculées dans les autres directions. Le panneau de MDF utilisé a été étudié expérimentalement [Perré *et al.*, 2015]. Deux échantillons dont la fraction solide était de 0,42 ont été soumis à un gradient d'humidité. Cela a permis de mesurer leur diffusivité massique transversale : $D_t^* = 0,297$ pour l'un des échantillon, $D_t^* = 0,238$ pour l'autre. Ces valeurs se situent entre les diffusivités obtenues pour une fraction solide supérieure à 0,42 ($D_t^* \approx 0,15$) et celles obtenues pour une fraction solide inférieure à 0,42 ($D_t^* = 0,34$) ce qui est satisfaisant.

Il est difficile de comparer les résultats dans les directions p_1 et p_2 entre eux car ces directions ne correspondent pas à une direction matérielle des panneaux. Il est surtout pertinent de comparer les résultats dans les directions p_1 et p_2 , incluses dans le plan du panneau, aux résultats dans la direction t , orthogonale au panneau. Cependant, on peut remarquer que pour la morphologie LDF4 représentée figure 3.8d (et dans une moindre mesure pour celle LDF2 représentée figure 3.8b), les propriétés équivalentes sont sensiblement différentes entre les directions p_1 et

p_2 . Cela s'explique par la présence d'un amas de fibres dans la direction p_1 qui facilite le transfert de chaleur (conductivité thermique plus élevée) mais limite la diffusion d'eau (diffusivité massique plus faible).

Ces résultats témoignent de l'anisotropie du LDF et du MDF. Pour le LDF, on observe notamment un facteur 2 entre les conductivités thermiques transversales du LDF et celles dans le plan du panneau.

La figure 6.7 représente un exemple de lignes de courant obtenues en régime permanent dans le cas de la diffusion massique dans du LDF. La morphologie de fibres est également illustrée pour pouvoir étudier la forme des lignes de courant par rapport à la structure du matériau. Seulement un huitième du volume calculé est représenté pour améliorer la visibilité des lignes de courant. Comme la phase gazeuse diffuse plus que la phase solide dans le cas de la diffusion d'eau liée, les lignes de courant contournent les fibres.

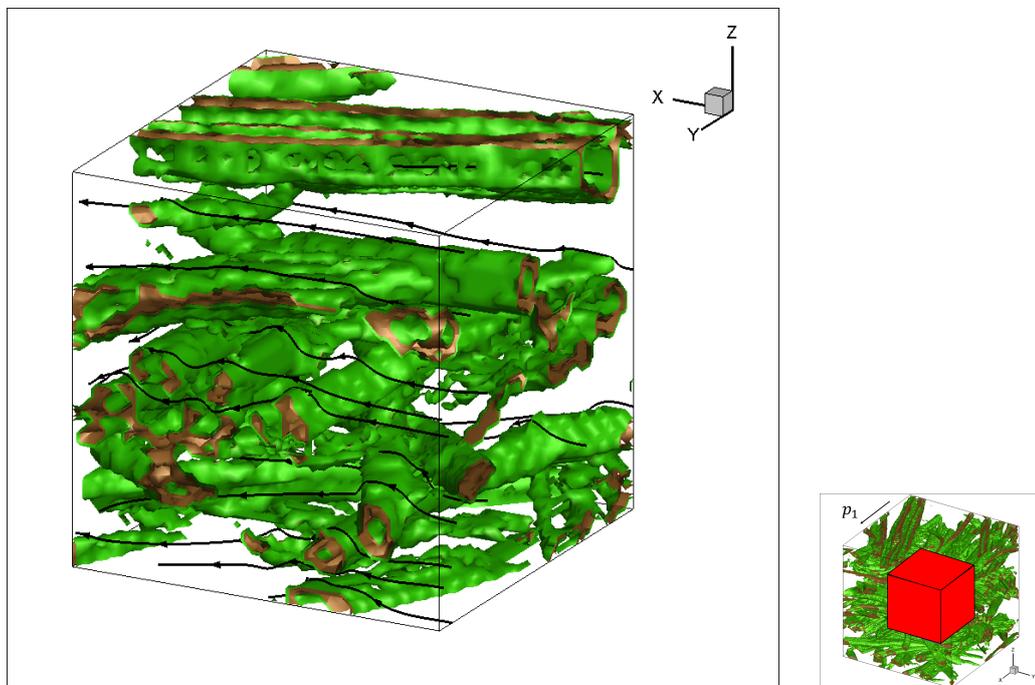


FIGURE 6.7 – Lignes de courant obtenues en régime permanent dans le cas de la simulation de la diffusion massique dans la direction p_1 de la morphologie LDF1 ($x = p_1$, $y = p_2$ et $z = t$). Seul un huitième du volume calculé est représenté pour une meilleure visibilité.

La figure 6.8 illustre le flux Φ_x obtenu en régime permanent dans le cas de la diffusion thermique dans la direction p_1 de la sélection LDF1 ($x = p_1$). Seul un plan parallèle au plan du panneau est représenté. On observe que la chaleur se propage dans les fibres conductrices, le flux étant beaucoup plus élevé dans les fibres que dans l'air.

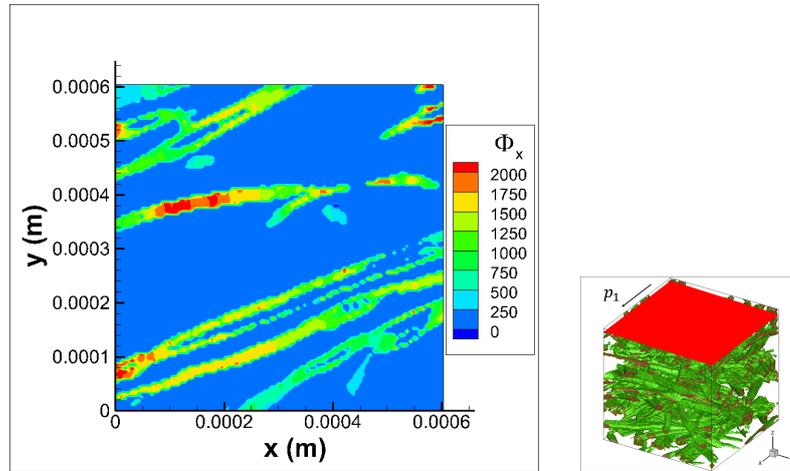


FIGURE 6.8 – Flux selon x obtenu en régime permanent, Φ_x (W m^{-2}). Simulation de la diffusion thermique dans la direction p_1 de la morphologie LDF1 ($x = p_1$ et $y = p_2$). Seul un plan (p_1, p_2) est représenté.

Enfin, la figure 6.9 représente les champs normalisés de température θ et de masse X obtenus en régime permanent dans le cas de la diffusion (thermique ou massique respectivement) dans la direction p_1 de l'échantillon LDF3. Pour comparer les deux diffusions, les iso-surfaces $\theta = 0,29$ et $X = 0,29$ sont tracées. Comme les phases conductrices sont inversées entre les deux types de diffusion, on remarque qu'un recul dans l'iso-surface $\theta = 0,29$ correspond à une avancée dans l'iso-surface $X = 0,29$ et inversement.

6.5 Analyse des résultats

6.5.1 Diffusion thermique

Pour étudier les résultats obtenus en diffusion thermique, on montre sur la figure 6.10 la conductivité thermique équivalente λ_{eq} en fonction de la fraction solide ϵ_s pour tous les matériaux biosourcés étudiés. Seule une sélection par type de morphologie est représentée. On trace également les modèles série et parallèle pour pouvoir comparer les conductivités calculées aux valeurs minimales et maximales théoriquement possibles.

Comme nous l'avons déjà observé dans le tableau 6.1, les valeurs macroscopiques prédites pour le bois initial et le bois final sont très proches du modèle parallèle dans la direction longitudinale. Cela s'explique par la morphologie de l'épicéa qui présente des trachéides parallèles les unes aux autres dans la direction longitudinale. De plus, les dimensions dans la direction longitudinale des volumes d'épicéa sélectionnés sont plus petites que les longueurs des trachéides ce qui réduit le nombre de jonctions présentes dans le volume simulé et amplifie

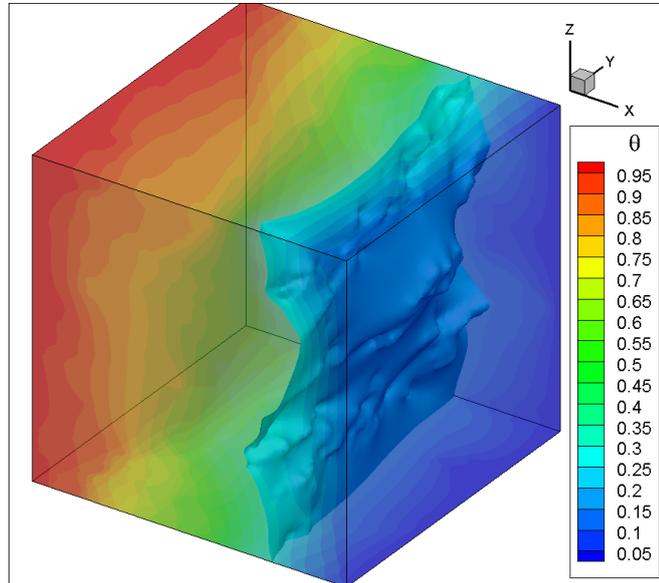
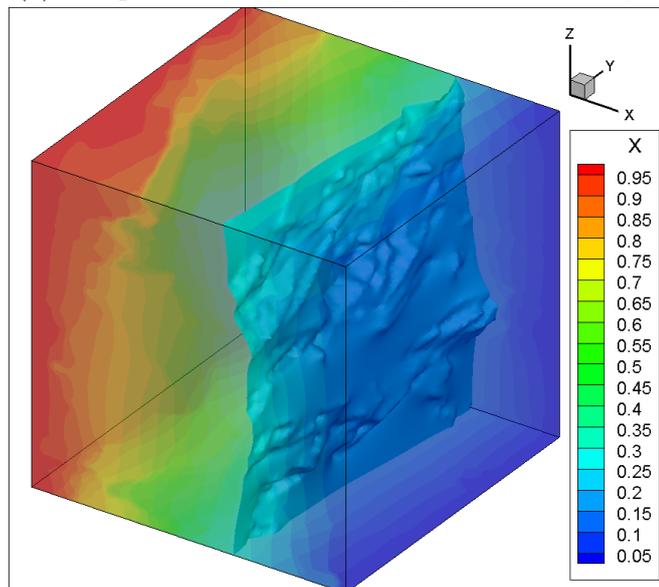
(a) Température normalisée θ , iso-surface $\theta = 0,29$ (b) Masse normalisée X , iso-surface $X = 0,29$

FIGURE 6.9 – Champs normalisés de température θ et de masse X obtenus en régime permanent dans le cas de la diffusion (thermique ou massique respectivement) dans la direction p_1 de l'échantillon LDF3 ($x = p_1$, $y = p_2$ et $z = t$).

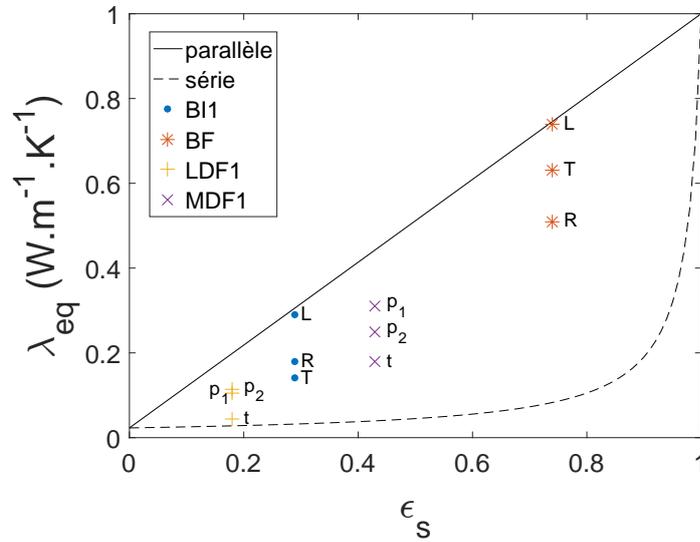


FIGURE 6.10 – Conductivité thermique équivalente λ_{eq} en fonction de la fraction solide ϵ_s dans trois directions des bois initial et final d'épicéa, du LDF et du MDF. Les modèles théoriques série (ligne pointillée) et parallèle (ligne pleine) sont représentés.

la proximité avec le modèle parallèle.

À l'inverse, le LDF qui est un excellent matériau isolant possède une conductivité thermique transversale λ_t très proche du modèle série. Cela s'explique encore par la morphologie du matériau qui est directement liée à la technique de fabrication des panneaux. Comme l'épaisseur finale est obtenue par compression d'un amas de fibres bien plus épais, les fibres sont orientées principalement dans le plan du panneau et sont donc orthogonales à la direction transversale. À cela s'ajoute le fait que le LDF présente une faible fraction solide, les fibres sont donc peu en contact. Par conséquent, les possibilités de ponts thermiques dans l'épaisseur du panneau sont très limitées ce qui conduit à une faible conductivité thermique équivalente transversale. Les différentes sélections de LDF présentent ainsi un λ_t proche de $0,04 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Cela correspond bien aux valeurs fournies par les fabricants et à celles que l'on peut trouver dans la littérature. Dans le cadre du projet ANR HygroBat (Vers une méthode de conception HYGRO-thermique des BATiments performants), le panneau de LDF utilisé dans ce travail de thèse a été caractérisé thermiquement. À 25°C , la conductivité thermique transversale mesurée en régime stationnaire par la méthode de la plaque chaude gardée est égale à $0,042 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ [LaSIE, 2015] ce qui est proche des valeurs calculées. Cela confirme que notre approche de modélisation à partir de morphologies réelles est prédictive.

Le MDF présente une morphologie proche de celle du LDF mais avec une

fraction solide plus élevée, les fibres sont alors plus en contact les unes aux autres que dans le LDF : la phase conductrice est bien plus connectée, y compris dans la direction normale au panneau. Malgré la position des fibres dans le plan du panneau, la conductivité thermique transversale du MDF s'éloigne donc du modèle série.

Par ailleurs, dans le bois initial, la conductivité thermique est plus grande dans la direction radiale que dans la direction tangentielle. Cela est dû à l'alignement des parois des cellules dans la direction radiale qui est une conséquence des divisions cellulaires survenant lors de l'activité cambiale des arbres. Cet alignement des lumens dans le bois initial est illustré sur la figure 6.11a. La diffusion de chaleur dans la direction radiale se fait donc plus facilement que dans la direction tangentielle où les parois ne sont pas alignées. À l'inverse, dans le bois final, la conductivité thermique tangentielle est plus élevée que la conductivité radiale. En effet, les trachéides du bois final sont aplatis dans la direction radiale et les lumens présentent alors une large extension tangentielle. Ceci est illustré sur la figure 6.11b. Les cellules sont également alignées dans la direction tangentielle, en raison d'une lignification sans extension radiale. Les phases sont donc plutôt disposées en série dans la direction radiale et plutôt disposées en parallèle dans la direction tangentielle. Les inclusions ayant une faible conductivité, elles bloquent le flux thermique principalement dans la direction radiale, ce qui explique l'inversion du rapport d'anisotropie entre bois initial et bois final. Ces résultats sont en accord avec ce que Perré *et al* [Perré *et al.*, 2015] ont constaté avec des simulations réalisées sur des morphologies 2D d'épicéa.

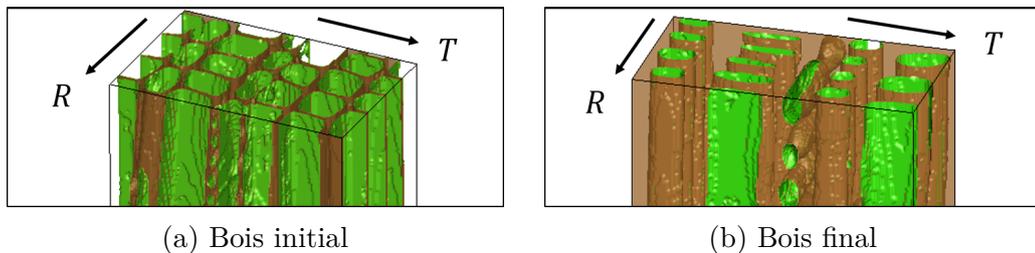


FIGURE 6.11 – Différences de morphologies entre bois initial et bois final d'épicéa dans les directions radiale (R) et tangentielle (T).

6.5.2 Diffusion massique

Pour analyser les résultats de diffusion massique, on présente sur la figure 6.12 la diffusivité adimensionnée équivalente D_{eq}^* en fonction de la fraction solide ϵ_s pour les différents matériaux biosourcés étudiés. Comme pour la diffusion thermique, on compare les valeurs calculées aux valeurs les plus petites et les plus grandes possibles à travers les modèles série et parallèle.

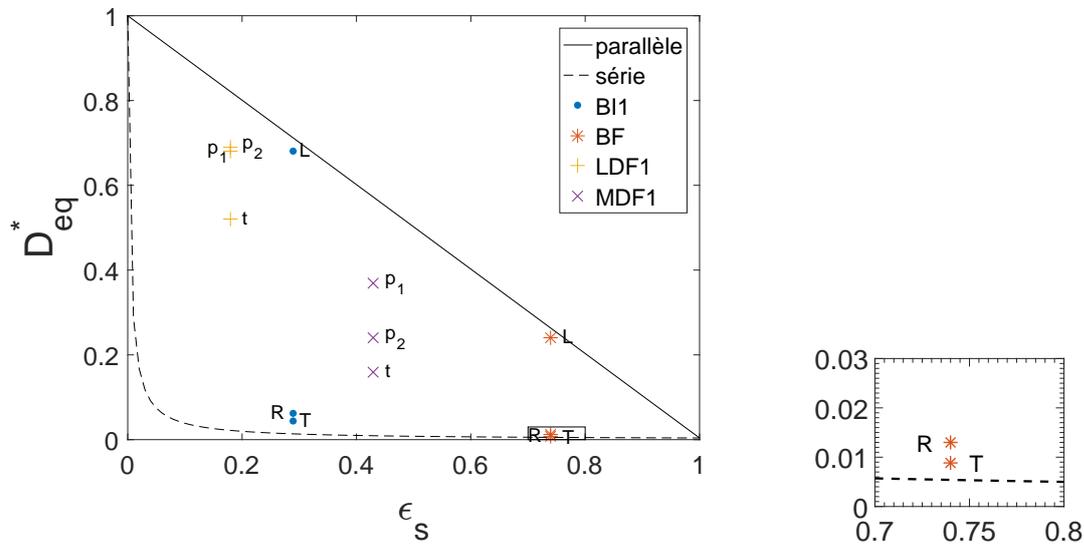


FIGURE 6.12 – Diffusivité massique adimensionnée équivalente D_{eq}^* en fonction de la fraction solide ϵ_s dans trois directions des bois initial et final d'épicéa, du LDF et du MDF. Les modèles théoriques série (ligne pointillée) et parallèle (ligne pleine) sont représentés. L'insert représente les diffusivités radiale et tangentielle pour le bois final à une échelle plus grande.

Dans le cas de la diffusivité massique, la situation est inversée pour l'épicéa par rapport à la conduction thermique parce que la phase connectée – la phase solide – a une faible diffusivité. Par conséquent, les valeurs macroscopiques dans les directions radiales et tangentielle sont proches du modèle série.

Contrairement à ce qui a été observé en 2D pour les diffusivités radiale et tangentielle [Perré *et al.*, 2015], le rapport d'anisotropie n'est pas inversé entre le bois initial et le bois final. Ceci est dû à la présence de rayons dans la direction radiale que l'on peut observer sur la figure 6.11b et qui sont considérés comme du bois plein en 2D. Ces rayons présentent une porosité élevée et sont alignés dans la directions radiale, ils favorisent ainsi significativement la diffusion de vapeur dans cette direction. Cette contribution est entièrement prise en compte grâce à la morphologie 3D à haute résolution. Cela confirme l'intérêt d'une approche 3D, y compris dans le plan transverse du bois qui possède visuellement une morphologie pratiquement indépendante de la direction longitudinale.

Dans la direction longitudinale, les résultats pour le bois initial et le bois final sont toujours très proches du modèle parallèle à cause de la structure interne du bois.

La situation est également inversée pour le LDF par rapport à la diffusion thermique puisque la phase diffusive – la phase gazeuse – est cette fois-ci connectée. Les diffusivités massiques du LDF sont donc beaucoup plus proches du modèle

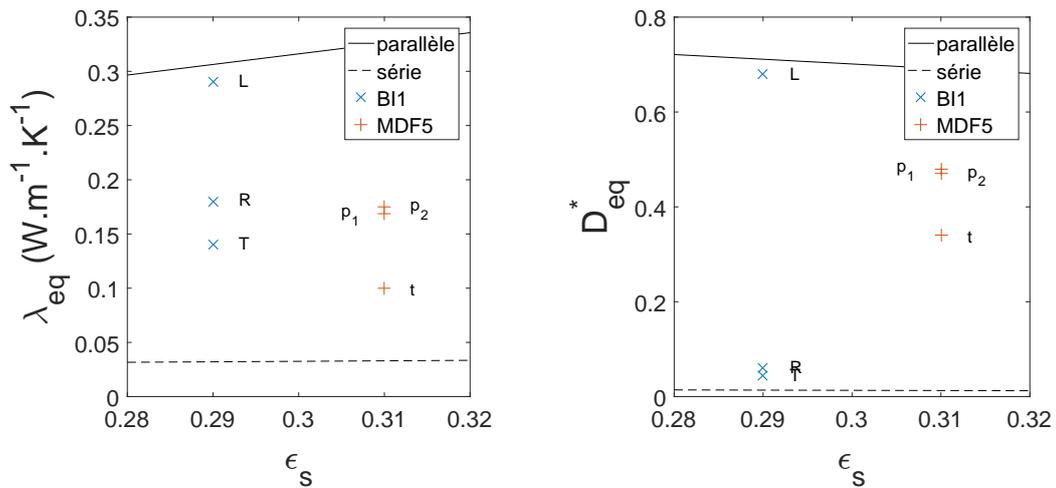
parallèle que du modèle série.

Concernant les résultats du MDF, ses diffusivités massiques équivalentes se situent environ à égale distance des modèles série et parallèle, de la même façon que ses conductivités thermiques.

On remarque également que les diffusivités transversales du LDF et du MDF sont plus faibles que les diffusivités calculées dans le plan des panneaux. Comme mentionné précédemment, les fibres sont plutôt orientées dans l'épaisseur du panneau. Cela augmente la tortuosité de la phase gazeuse diffusive dans la direction normale, ce qui limite la diffusivité massique par rapport aux deux autres directions.

Remarque sur les morphologies BI1 et MDF5

Pour souligner encore l'influence de la structure sur les résultats de diffusion, on compare les conductivités et diffusivités des sélections BI1 et MDF5 sur la figure 6.13. En effet, ces deux morphologies sont très différentes mais leurs fractions solides sont presque les mêmes ce qui va permettre d'étudier l'influence de la structure sans prendre en compte la densité.



(a) Conductivité thermique équivalente λ_{eq} en fonction de la fraction solide ϵ_s .

(b) Diffusivité massique adimensionnée équivalente D_{eq}^* en fonction de la fraction solide ϵ_s .

FIGURE 6.13 – Comparaison des résultats entre les morphologies BI1 et MDF5. Les modèles théoriques série (ligne pointillée) et parallèle (ligne pleine) sont représentés.

On observe que les propriétés équivalentes de ces deux matériaux prennent des valeurs très différentes que ce soit dans le cas thermique ou massique. Certaines propriétés sont en effet proches du modèle série tandis que d'autres sont

proches du modèle parallèle. Il y a par exemple un rapport 3 entre la conductivité thermique transversale de MDF5 et celle longitudinale de BI1. L'influence de la micro-structure du matériau est ainsi mise en évidence.

6.5.3 Familles de morphologies

Afin de tenter de séparer l'effet de la fraction solide de l'effet de la morphologie (forme des différentes phases), nous analysons les différents résultats obtenus pour les panneaux de LDF et de MDF. Pour distinguer ces deux effets, on choisit une loi de mélange de la forme suivante :

$$\Gamma_\mu = (\epsilon_g \Gamma_g^\mu + \epsilon_s \Gamma_s^\mu)^{1/\mu} \quad (6.8)$$

avec ϵ_g la fraction volumique de la phase gazeuse, Γ_g la propriété de la phase gazeuse, ϵ_s la fraction volumique de la phase solide, Γ_s la propriété de la phase solide et μ un facteur dépendant de la morphologie du milieu. On remarque que cette loi permet de retrouver les modèles analytiques parallèle ($\mu = 1$) et série ($\mu = -1$). La sélection LDF4 (cf. figure 3.8d) est exclue de l'étude car cette morphologie, qui contient un gros morceau de bois non défibré, n'est pas du tout représentative d'un panneau de fibres.

Pour chaque sélection et chaque phénomène physique (thermique et massique), deux valeurs sont étudiées : la propriété de diffusion transversale Γ_t et la moyenne des propriétés dans les deux directions tangentielles au plan du panneau $\Gamma_p = (\Gamma_{p1} + \Gamma_{p2})/2$. L'objectif est d'identifier des facteurs μ de façon à ce que les propriétés associées Γ_μ représentent le plus fidèlement possible les propriétés considérées. Pour cela, le facteur μ de l'équation (6.8) est déterminé en minimisant, au sens des moindres carrés, la différence entre les valeurs calculées Γ_i ($i = t$ ou p) et les valeurs Γ_μ prédites par l'équation (6.8).

Les résultats sont présentés sur les figures 6.14 et 6.15 où les propriétés équivalentes Γ_t et Γ_p des quatre sélections de LDF et des cinq sélections de MDF sont tracées en fonction de la fraction solide ϵ_s . Sur chaque figure, quatre groupes de points apparaissent donc : les Γ_p de LDF (LDF_p), les Γ_t de LDF (LDF_t), les Γ_p de MDF (MDF_p) et les Γ_t de MDF (MDF_t). Les modèles analytiques série et parallèle sont également représentés.

En diffusion massique, toutes les valeurs peuvent être prédites de façon satisfaisante en utilisant une seule famille de morphologies, quelle que soit la densité du panneau, comme montré sur la figure 6.14 :

- $\mu_t = 0,18$ dans la direction transversale ;
- $\mu_p = 0,43$ dans le plan du panneau.

Ce résultat est remarquable car il prouve que, du point de vue du transfert massique, la morphologie de tous les panneaux est identique malgré un rapport de densité de l'ordre de 4.

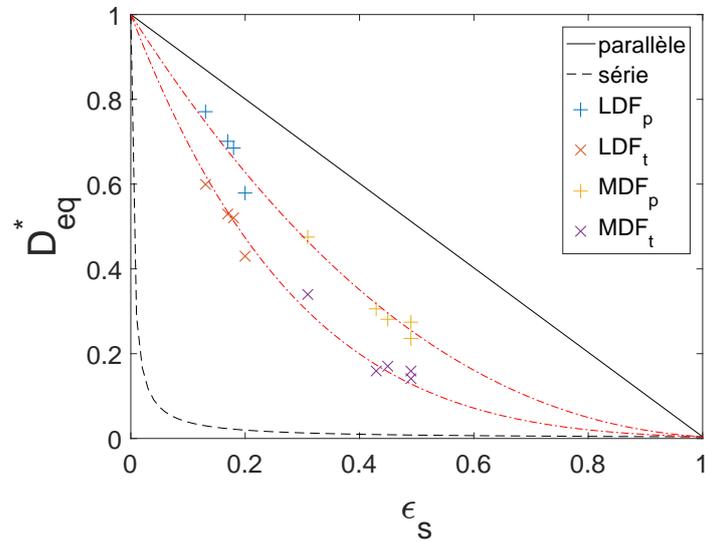


FIGURE 6.14 – Identification de familles de morphologies pour des panneaux de fibres en diffusion massive selon la direction considérée. Deux courbes $D_{\mu}^*(\epsilon_s)$ sont tracées avec $\mu_t = 0,18$ et $\mu_p = 0,43$.

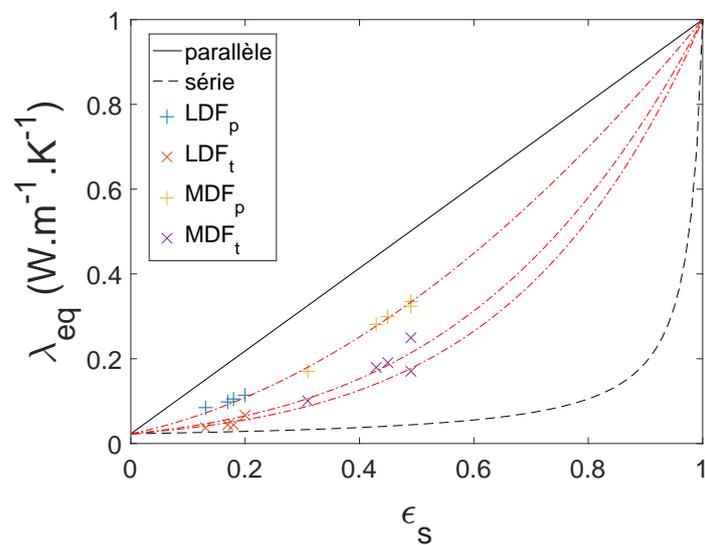


FIGURE 6.15 – Identification de familles de morphologies pour des panneaux de fibres en diffusion thermique selon la direction considérée. Trois courbes $\lambda_{\mu}(\epsilon_s)$ sont tracées avec $\mu_t(\text{LDF}) = 0,11$; $\mu_t(\text{MDF}) = 0,22$ et $\mu_p = 0,53$.

En diffusion thermique, la situation est plus complexe car trois facteurs μ sont nécessaires pour décrire les morphologies, comme montré sur la figure 6.15 :

- $\mu_p = 0,53$ dans le plan du panneau, quelle que soit la densité des panneaux ;
- $\mu_t = 0,11$ dans la direction transversale pour le LDF ;
- $\mu_t = 0,22$ dans la direction transversale pour le MDF.

Ceci s'explique par un effet de percolation : dans le LDF, les contacts entre fibres (la phase conductrice en diffusion thermique) sont inefficaces parce que la faible densité impose une très forte tortuosité de cette phase conductrice ; à l'inverse, dans le cas du MDF, la densité plus élevée impose de nombreux contacts entre les fibres dans la direction transversale ce qui réduit drastiquement la tortuosité de la phase conductrice. Ainsi, la morphologie de LDF en diffusion thermique dans la direction transversale ne peut être considérée comme identique à celle du MDF.

Cette analyse prouve qu'il est possible de définir une variable synthétique (le facteur μ) caractérisant – au niveau macroscopique et pour la propriété considérée (transversale ou tangentielle au plan) – la morphologie d'un milieu hétérogène. Ceci est particulièrement utile pour les codes de simulation puisque, une fois le paramètre μ connu, la propriété du matériau dans une direction donnée est simplement prédite par sa densité.

6.6 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté les résultats fournis par le couplage entre la méthode Lattice Boltzmann et des morphologies réelles pour calculer des propriétés équivalentes de matériaux biosourcés. Nous avons commencé par expliciter les caractéristiques du code Lattice Boltzmann 3D développé pour ces calculs : conditions aux limites 3D, données d'entrée, calculs complémentaires (modèles série et parallèle) et temps de calcul. Nous avons également étudié l'influence de la taille des volumes sélectionnés pour vérifier que les volumes élémentaires choisis étaient bien représentatifs. Nous avons ensuite exposé et commenté les résultats de diffusion dans l'épicéa (dans le bois initial et dans le bois final) puis dans les panneaux de fibres (LDF et MDF). Pour chaque morphologie présentée au chapitre 3, les conductivités thermiques et diffusivités massiques sont calculées dans trois directions. Ces calculs mettent en évidence l'anisotropie des matériaux puisque les propriétés varient fortement selon la direction. L'analyse des résultats a également permis de souligner l'influence de la structure interne des matériaux sur les propriétés équivalentes. Enfin, nous avons pu caractériser la morphologie des panneaux de fibres par une variable synthétique qui permet de dissocier l'effet de la masse volumique (quantité de la fraction solide) de l'effet de la morphologie (répartition spatiale de cette phase solide) en diffusion thermique et massique.

Chapitre 7

Conclusion

Dans ce travail de thèse, nous nous sommes intéressés à la prédiction de propriétés équivalentes de matériaux biosourcés en utilisant conjointement la microtomographie et la méthode Lattice Boltzmann. Nous avons étudié trois matériaux : l'épicéa (bois initial et bois final) et des panneaux de fibres de bois de densités faible (LDF) et moyenne (MDF).

Dans le chapitre 2, nous avons présenté le contexte dans lequel s'inscrit ce travail : l'augmentation de l'usage des matériaux biosourcés dans le bâtiment et la nécessité de caractériser leurs propriétés, notamment hygrothermiques. Le changement d'échelle permet de prédire de façon rigoureuse des propriétés équivalentes de matériaux hétérogènes à partir de la microstructure du matériau, de la connaissance des propriétés des phases et d'une méthode de résolution numérique. Nous avons alors présenté la littérature relative à la micro-tomographie aux rayons X et à la méthode Lattice Boltzmann en montrant que ce sont des outils adaptés à notre étude pour, d'une part, décrire la micro-structure des matériaux biosourcés et, d'autre part, résoudre un problème de diffusion et estimer ainsi des propriétés de diffusion équivalentes.

Dans le chapitre 3, nous avons présenté la méthodologie employée pour obtenir les morphologies 3D des matériaux étudiés. Nous avons décrit la méthode de préparation des échantillons et avons présenté les résultats de la micro-tomographie synchrotron aux rayons X. Nous avons également détaillé le traitement d'images qui a permis de segmenter la phase gazeuse et la phase solide. Enfin, nous avons sélectionné plusieurs volumes de matériaux biosourcés pour calculer leurs propriétés équivalentes ultérieurement. Les masses volumiques estimées sont en accord avec la littérature et les mesures effectuées ce qui a permis de valider la méthodologie.

Dans le chapitre 4, nous avons exposé les aspects théoriques de la méthode Lattice Boltzmann en présentant son principe général avec la description discrète du milieu. Nous nous sommes ensuite intéressés à la modélisation de l'équation de la diffusion avec la méthode LB, sujet central de ce travail de thèse. Les liens entre les échelles mésoscopique et macroscopique ont été exposés avec notamment

la relation entre diffusivité et facteur de relaxation (démontrée dans l'annexe A). Enfin, différentes méthodes pour imposer des conditions aux limites de Dirichlet et Neumann ont été expliquées.

Dans le chapitre 5, nous avons détaillé l'implémentation notre code reposant sur la méthode LB : choix des conditions aux limites, calcul de propriétés équivalentes, définition d'un critère de convergence et méthodologie pour réduire le temps de calcul. Nous avons notamment testé différentes conditions aux limites pour fixer un flux normal nul ce qui a conduit à choisir la condition de glissement et avons porté un soin particulier au traitement des coins. Nous avons pu valider le code sur des géométries simples puis nous avons étudié l'influence de la résolution du réseau et du facteur de relaxation sur la précision des résultats. Un compromis entre précision et temps de calcul a été obtenu pour $\omega_{min}^{opt} = 1,4$. En outre, la parallélisation du code en *Open MP* et l'utilisation de facteurs de relaxation successifs ($\omega_{min} = \{0,1; 0,3; 0,5; 1; 1,4\}$) nous a permis de diviser le temps de calcul d'un facteur 56.

Dans le chapitre 6, nous avons présenté les résultats fournis par le couplage entre la méthode Lattice Boltzmann et des morphologies réelles pour calculer des propriétés équivalentes d'épicéa et de panneaux de fibres. L'influence de la taille des volumes sélectionnés sur les résultats est d'abord étudiée pour s'assurer que les volumes choisis sont représentatifs. Les conductivités thermiques et diffusivités massiques équivalentes sont alors calculées dans trois directions orthogonales pour chaque morphologie déterminée au chapitre 3. Les résultats témoignent de l'effet de la disposition des phases sur l'anisotropie des propriétés équivalentes, les propriétés variant significativement d'une direction à l'autre (rapport 2 entre les directions tangentielle et longitudinale d'épicéa en thermique et environ 30 en massique). Enfin, nous avons pu caractériser la morphologie de matériaux hétérogènes par une variable synthétique qui permet de dissocier l'effet de la masse volumique de l'effet de la morphologie dans les cas thermique et massique.

Ces résultats satisfaisants fournissent de nouvelles données sur l'épicéa et les panneaux de fibres et ouvrent de multiples perspectives à ce travail de thèse. La même méthodologie pourrait être appliquée à d'autres matériaux biosourcés pour les caractériser : autres essences de bois (chêne, pin, peuplier,...), autres matériaux faits de fibres végétales (panneaux OSB, laine de chanvre,...) mais aussi matériaux composites ciment/bois, béton de chanvre, etc. Le code Lattice Boltzmann 3D développé peut aussi servir à estimer des propriétés de matériaux très différents tels que des mousses métalliques.

L'étude portant sur la définition d'un volume élémentaire représentatif, qui est un problème crucial du changement d'échelle, doit être approfondie pour analyser les directions et les matériaux qui n'ont pu l'être. Il faudrait également diminuer le temps nécessaire au traitement d'images et aux calculs de diffusion pour pouvoir traiter des volumes de LDF plus importants.

Enfin, comme les codes de simulation utilisés en conception de bâtiment

doivent intégrer les transferts couplés de chaleur et de masse, le code pourrait être amélioré pour prendre en compte ce couplage chaleur/masse. Une première étape devra être de modéliser la diffusion dans des matériaux hétérogènes (avec un facteur ρc_p différent en diffusion thermique) en régime transitoire.

Bibliographie

- [Ademe, 2013] ADEME (2013). *Les chiffres clés du bâtiment*, agence de l'environnement et de la maîtrise de l'énergie.
- [Agoua *et al.*, 2001] AGOUA, E., ZOHOUN, S. et PERRÉ, P. (2001). Utilisation d'une double enceinte pour déterminer le coefficient de diffusion d'eau liée dans le bois en régime transitoire : recours à la simulation numérique pour valider la méthode d'identification : A double climatic chamber used to measure the diffusion coefficient of water in wood in unsteady-state conditions : determination of the best fitting method by numerical simulation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44(19):3731–3744.
- [Almeida *et al.*, 2014] ALMEIDA, G., HUBER, F. et PERRÉ, P. (2014). Free shrinkage of wood determined at the cellular level using an environmental scanning electron microscope. *Maderas Ciencia y Tecnología*, 16:187–198.
- [APT, 2016] APT (2016). La structure du bois influence les propriétés du matériau - cours agroparistech.
- [Axelsson, 2009] AXELSSON, M. (2009). *Image analysis for volumetric characterization of microstructure*. Thèse de doctorat, Swedish University of Agricultural Sciences.
- [Baruchel *et al.*, 2006] BARUCHEL, J., BUFFIERE, J.-Y., CLOETENS, P., DI MICHEL, M., FERRIE, E., LUDWIG, W., MAIRE, E. et SALVO, L. (2006). Advances in synchrotron radiation microtomography. *Scripta Materialia*, 55(1): 41–46.
- [Bastoul, 2016] BASTOUL, C. (2016). Cours openmp.
- [Belytschko *et al.*, 1996] BELYTSCHKO, T., KRONGAUZ, Y., ORGAN, D., FLEMING, M. et KRYSL, P. (1996). Meshless methods : An overview and recent developments. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139(1):3 – 47.
- [Bhatnagar *et al.*, 1954] BHATNAGAR, P. L., GROSS, E. P. et KROOK, M. (1954). A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. *Physical Review*, 94(3):511–525.

- [Bouguerra *et al.*, 2001] BOUGUERRA, A., AIT-MOKHTAR, A., AMIRI, O. et DIOP, M. (2001). Measurement of thermal conductivity, thermal diffusivity and heat capacity of highly porous building materials using transient plane source technique. *International communications in heat and mass transfer*, 28(8):1065–1078.
- [Buchanan et Levine, 1999] BUCHANAN, A. H. et LEVINE, S. B. (1999). Wood-based building materials and atmospheric carbon emissions. *Environmental Science & Policy*, 2(6):427–437.
- [Buffiere *et al.*, 2010] BUFFIERE, J.-Y., MAIRE, E., ADRIEN, J., MASSE, J.-P. et BOLLER, E. (2010). In situ experiments with x ray tomography : an attractive tool for experimental mechanics. *Experimental mechanics*, 50(3):289–305.
- [Carmeliet *et al.*, 2005] CARMELIET, J., DE WIT, M. et JANSSEN, H. (2005). Hysteresis and moisture buffering of wood. In *Symposium of Building Physics in the Nordic Countries*, pages 55–62. Citeseer.
- [Chen *et al.*, 1996] CHEN, S., MARTINEZ, D. et MEI, R. (1996). On boundary conditions in lattice boltzmann methods. *Physics of Fluids (1994-present)*, 8(9):2527–2536.
- [Chergui et Lavallée, 2015] CHERGUI, J. et LAVALLÉE, P.-F. (2015). Openmp - parallélisation multitâches pour machines à mémoire partagée.
- [Cnudde et Boone, 2013] CNUDDE, V. et BOONE, M. N. (2013). High-resolution x-ray computed tomography in geosciences : A review of the current technology and applications. *Earth-Science Reviews*, 123:1–17.
- [Comstock, 1968] COMSTOCK, G. L. (1968). *Physical and structural aspects of the longitudinal permeability of wood*. Thèse de doctorat, State University of New-York.
- [Conseils Thermiques, 2016] CONSEILS THERMIQUES, A. (2016). Comparatif des matériaux isolants.
- [Cripps, 2004] CRIPPS, A. (2004). *Crops in construction handbook*. CIRIA.
- [CSTB, 2006] CSTB (2006). *Le bois dans la construction - Étude bibliographique*, centre scientifique et technique du bâtiment.
- [CSTB, 2016] CSTB (2016). Les économies d'énergie dans le bâtiment.
- [Davis et Wells, 1992] DAVIS, J. et WELLS, P. (1992). Computed tomography-measurements on wood. *Industrial Metrology*, 2(3-4):195–218.
- [Decoux *et al.*, 2004] DECOUX, V., VARCIN, É. et LEBAN, J.-M. (2004). Relationships between the intra-ring wood density assessed by x-ray densitometry and optical anatomical measurements in conifers. consequences for the cell wall apparent density determination. *Annals of Forest Science*, 61(3):251–262.
- [Degiovanni et Laurent, 1986] DEGIOVANNI, A. et LAURENT, M. (1986). Une nouvelle technique d'identification de la diffusivité thermique pour la méthode «flash». *Revue de physique Appliquée*, 21(3):229–237.

- [Delgado *et al.*, 2010] DELGADO, J., RAMOS, N. M., BARREIRA, E. et DE FREITAS, V. (2010). A critical review of hygrothermal models used in porous building materials. *Journal of Porous Media*, 13(3).
- [Dodoo *et al.*, 2012] DODOO, A., GUSTAVSSON, L. et SATHRE, R. (2012). Effect of thermal mass on life cycle primary energy balances of a concrete-and a wood-frame building. *Applied Energy*, 92:462–472.
- [D’Orazio *et al.*, 2004] D’ORAZIO, A., CORCIONE, M. et CELATA, G. P. (2004). Application to natural convection enclosed flows of a lattice boltzmann bgk model coupled with a general purpose thermal boundary condition. *International Journal of Thermal Sciences*, 43(6):575–586.
- [EDF, 2015] EDF (2015). Il était une fois les réglementations thermiques.
- [Elmoutaouakkil *et al.*, 2003] ELMOUTAOUAKKIL, A., FUCHS, G., BERGOUNHON, P., PERES, R. et PEYRIN, a. (2003). Three-dimensional quantitative analysis of polymer foams from synchrotron radiation x-ray microtomography. *Journal of physics D : applied physics*, 36(10A):A37.
- [Fang *et al.*, 2016] FANG, W.-Z., CHEN, L., GOU, J.-J. et TAO, W.-Q. (2016). Predictions of effective thermal conductivities for three-dimensional four-directional braided composites using the lattice Boltzmann method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 92:120–130.
- [Farruggia, 1998] FARRUGGIA, F. (1998). Détermination du comportement élastique d’un ensemble de fibres de bois à partir de son organisation cellulaire et d’essais mécaniques sous microscope. *These de Doctorat-ENGREF, Nancy, France*.
- [Feldkamp *et al.*, 1984] FELDKAMP, L., DAVIS, L. et KRESS, J. (1984). Practical cone-beam algorithm. *JOSA A*, 1(6):612–619.
- [Frank et Perré, 2010] FRANK, X. et PERRÉ, P. (2010). The potential of meshless methods to address physical and mechanical phenomena involved during drying at the pore level. *Drying Technology*, 28(8):932–943.
- [Garboczi, 1998] GARBOCZI, E. J. (1998). *Finite element and finite difference programs for computing the linear electric and elastic properties of digital images of random materials*. Building and Fire Research Laboratory, National Institute of Standards and Technology.
- [Glass, 2007] GLASS, S. V. (2007). Measurements of moisture transport in wood-based materials under isothermal and nonisothermal conditions. *In Research-Gate*.
- [Gonçales *et al.*, 1996] GONÇALES, J., KELLER, R. et PERRÉ, P. (1996). Mesure de la densité des bois sur coupe microscopique par analyse d’image : application quelques essences de la forêt amazonienne. *Bois et Forêts des Tropiques*, 250: 31–45.

- [Grosser, 1977] GROSSER, D. (1977). Die holzer mitteleuropas. *Berlin. : Ein mikrophotographischer Lehratlas. Springer-Verlag 208pp.. c*, 70.
- [Guitard, 1987] GUITARD, D. (1987). Mécanique du bois et composites. *Editions Cepadues, Toulouse*.
- [Harada *et al.*, 1998] HARADA, T., HATA, T. et ISHIHARA, S. (1998). Thermal constants of wood during the heating process measured with the laser flash method. *Journal of wood science*, 44(6):425–431.
- [Herman, 1979] HERMAN, G. T. (1979). Image reconstruction from projections. *Image Reconstruction from Projections : Implementation and Applications*, 1.
- [Higuera, 1990] HIGUERA, F. J. (1990). Lattice gas method based on the chapman–enskog expansion. *Physics of Fluids A*, 2(6):1049–1051.
- [Hollister *et Kikuchi*, 1994] HOLLISTER, S. et KIKUCHI, N. (1994). Homogenization theory and digital imaging : a basis for studying the mechanics and design principles of bone tissue. *Biotechnology and bioengineering*, 43(7):586–596.
- [Holmstad *et al.*, 2006] HOLMSTAD, R., GOEL, A., RAMASWAMY, S., GREGERSEN, O. W. *et al.* (2006). Visualization and characterization of high resolution 3d images of paper samples. *Appita Journal : Journal of the Technical Association of the Australian and New Zealand Pulp and Paper Industry*, 59(5):370.
- [Jeong *et al.*, 2008] JEONG, N., CHOI, D. H. et LIN, C.-L. (2008). Estimation of thermal and mass diffusivity in a porous medium of complex structure using a lattice Boltzmann method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(15–16):3913–3923.
- [Kanouté *et al.*, 2009] KANOUTÉ, P., BOSO, D., CHABOCHE, J. et SCHREFLER, B. (2009). Multiscale methods for composites : a review. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 16(1):31–75.
- [Koivu *et al.*, 2009] KOIVU, V., DECAIN, M., GEINDREAU, C., MATTILA, K., BLOCH, J.-F. et KATAJA, M. (2009). Transport properties of heterogeneous materials. Combining computerised X-ray micro-tomography and direct numerical simulations. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 23(10):713–721.
- [Künzel *et al.*, 2005] KÜNZEL, H., HOLM, A., ZIRKELBACH, D. et KARAGIOZIS, A. (2005). Simulation of indoor temperature and humidity conditions including hygrothermal interactions with the building envelope. *Solar Energy*, 78(4):554–561.
- [Kuo *et Chen*, 2009] KUO, L.-S. et CHEN, P.-H. (2009). Numerical implementation of thermal boundary conditions in the lattice Boltzmann method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52(1–2):529–532.
- [Kyrieleis *et al.*, 2011] KYRIELEIS, A., TITARENKO, V., IBISON, M., CONNOLLEY, T. et WITHERS, P. (2011). Region-of-interest tomography using filtered backprojection : assessing the practical limits. *Journal of microscopy*, 241(1):69–82.

- [Lagüela *et al.*, 2015] LAGÜELA, S., BISON, P., PERON, F. et ROMAGNONI, P. (2015). Thermal conductivity measurements on wood materials with transient plane source technique. *Thermochimica Acta*, 600:45–51.
- [Landis et Keane, 2010] LANDIS, E. N. et KEANE, D. T. (2010). X-ray microtomography. *Materials characterization*, 61(12):1305–1316.
- [LaSIE, 2015] LASIE (2015). Caractérisation de la métrologie des matériaux.
- [Lawrence, 2014] LAWRENCE, M. (2014). The use of bio-based materials to reduce the environmental impact of construction. In *International Congress on Materials and Structural Stability*, page 136. University of Bath.
- [Lelievre *et al.*, 2014] LELIEVRE, D., COLINART, T. et GLOUANNEC, P. (2014). Hygrothermal behavior of bio-based building materials including hysteresis effects : Experimental and numerical analyses. *Energy and Buildings*, 84:617 – 627.
- [Lindgren *et al.*, 1992] LINDGREN, O., DAVIS, J., WELLS, P. et SHADBOLT, P. (1992). Non-destructive wood density distribution measurements using computed tomography. *Holz als Roh-und Werkstoff*, 50(7-8):295–299.
- [Lux *et al.*, 2006a] LUX, J., AHMADI, A., GOBBÉ, C. et DELISÉE, C. (2006a). Macroscopic thermal properties of real fibrous materials : Volume averaging method and 3d image analysis. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(11):1958–1973.
- [Lux *et al.*, 2006b] LUX, J., DELISÉE, C. et THIBAUT, X. (2006b). 3d characterization of wood based fibrous materials : an application. *Image Anal Stereol*, 25(1):25–35.
- [Maire *et al.*, 2001] MAIRE, E., BUFFIERE, J.-Y., SALVO, L., BLANDIN, J. J., LUDWIG, W. et LETANG, J. (2001). On the application of x-ray microtomography in the field of materials science. *Advanced Engineering Materials*, 3(8):539–546.
- [Maire *et al.*, 2003] MAIRE, E., FAZEKAS, A., SALVO, L., DENDIEVEL, R., YOUSSEF, S., CLOETENS, P. et LETANG, J. M. (2003). X-ray tomography applied to the characterization of cellular materials. related finite element modeling problems. *Composites science and technology*, 63(16):2431–2443.
- [Maire et Withers, 2014] MAIRE, E. et WITHERS, P. (2014). Quantitative x-ray tomography. *International materials reviews*, 59(1):1–43.
- [Malmberg *et al.*, 2011] MALMBERG, F., LINDBLAD, J., ÖSTLUND, C., ALMGREN, K. M. et GAMSTEDT, E. K. (2011). Measurement of fibre–fibre contact in three-dimensional images of fibrous materials obtained from x-ray synchrotron microtomography. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 637(1):143–148.

- [Mayo *et al.*, 2010] MAYO, S., CHEN, F. et EVANS, R. (2010). Micron-scale 3d imaging of wood and plant microstructure using high-resolution x-ray phase-contrast microtomography. *Journal of structural biology*, 171(2):182–188.
- [Mohammad, 2007] MOHAMMAD, A. (2007). *Applied Lattice Boltzmann Method for Transport Phenomena, Momentum, Heat and Mass Transfer*. Sure Print.
- [Momose, 1995] MOMOSE, A. (1995). Demonstration of phase-contrast x-ray computed tomography using an x-ray interferometer. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 352(3):622–628.
- [Mothe *et al.*, 1998] MOTHE, F., DUCHANOIS, G., ZANNIER, B. et LEBAN, J.-M. (1998). Analyse microdensitométrique appliquée au bois : méthode de traitement des données utilisée à l'inra-erqb (programme cerd). In *Annales des sciences forestières*, volume 55, pages 301–313. EDP Sciences.
- [Olek *et al.*, 2005] OLEK, W., PERRÉ, P. et WERES, J. (2005). Inverse analysis of the transient bound water diffusion in wood. *Holzforschung*, 59(1).
- [Osanyintola et Simonson, 2006] OSANYINTOLA, O. F. et SIMONSON, C. J. (2006). Moisture buffering capacity of hygroscopic building materials : experimental facilities and energy impact. *Energy and Buildings*, 38(10):1270–1282.
- [Parker *et al.*, 1961] PARKER, W., JENKINS, R., BUTLER, C. et ABBOTT, G. (1961). Flash method of determining thermal diffusivity, heat capacity, and thermal conductivity. *Journal of applied physics*, 32(9):1679–1684.
- [Pedersen, 1990] PEDERSEN, C. R. (1990). *Combined heat and moisture transfer in building constructions*, volume 214. Thermal Insulation Laboratory, Technical University of Denmark.
- [Perré, 2011] PERRÉ, P. (2011). A Review of Modern Computational and Experimental Tools Relevant to the Field of Drying. *Drying Technology*, 29(13):1529–1541.
- [Perré *et al.*, 2015] PERRÉ, P., ALMEIDA, G., AYOUB, M. et FRANK, X. (2015). New modelling approaches to predict wood properties from its cellular structure : image-based representation and meshless methods. *Annals of Forest Science*, 73(1):147–162.
- [Perré et Turner, 2005] PERRÉ, P. et TURNER, I. (2005). Determination of the Material Property Variations Across the Growth Ring of Softwood for Use in a Heterogeneous Drying Model. Part 2. Use of Homogenisation to Predict Bound Liquid Diffusivity and Thermal Conductivity. *Holzforschung*, 55(4):417–425.
- [Perré, 2007] PERRÉ, P. (2007). Multiscale aspects of heat and mass transfer during drying. *Transport in Porous Media*, 66(1-2):59–76.
- [Perré, 2010] PERRÉ, P. (2010). Multiscale modeling of drying as a powerful extension of the macroscopic approach : application to solid wood and biomass processing. *Drying Technology*, 28(8):944–959.

- [Perré *et al.*, 2015] PERRÉ, P., PIERRE, F., CASALINHO, J. et AYOUB, M. (2015). Determination of the mass diffusion coefficient based on the relative humidity measured at the back face of the sample during unsteady regimes. *Drying Technology*, 33(9):1068–1075.
- [Perre et Turner, 2002] PERRE, P. et TURNER, I. W. (2002). A heterogeneous wood drying computational model that accounts for material property variation across growth rings. *Chemical Engineering Journal*, 86(1):117–131.
- [Pierre *et al.*, 2014] PIERRE, T., COLINART, T. et GLOUANNEC, P. (2014). Measurement of thermal properties of biosourced building materials. *International Journal of Thermophysics*, 35(9-10):1832–1852.
- [Piot *et al.*, 2011] PIOT, A., WOLOSZYN, M., BRAU, J. et ABELE, C. (2011). Experimental wooden frame house for the validation of whole building heat and moisture transfer numerical models. *Energy and Buildings*, 43(6):1322–1328.
- [Qadri, 2008] QADRI, J.-P. (2008). Thermodynamique : Introduction et théorie cinétique du gaz parfait.
- [Radon, 1917] RADON, J. (1917). Über die Bestimmung von Funktionen durch ihre Integralwerte längs gewisser Mannigfaltigkeiten. *Akad. Wiss.*, 69:262–277.
- [Salvo *et al.*, 2003] SALVO, L., CLOETENS, P., MAIRE, E., ZABLER, S., BLANDIN, J. J., BUFFIÈRE, J. Y., LUDWIG, W., BOLLER, E., BELLET, D. et JOSSEROND, C. (2003). X-ray micro-tomography an attractive characterisation technique in materials science. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 200:273–286.
- [Sánchez-Hubert et Sánchez-Palencia, 1992] SÁNCHEZ-HUBERT et SÁNCHEZ-PALENCIA (1992). *Introduction aux méthodes asymptotiques et à l'homogénéisation : application à la mécanique des milieux continus*. Masson.
- [Sánchez-Palencia, 1980] SÁNCHEZ-PALENCIA, E. (1980). Non-homogeneous media and vibration theory. *In Non-homogeneous media and vibration theory*, volume 127.
- [Scaffidi-Argentina *et al.*, 2001] SCAFFIDI-ARGENTINA, F., PIAZZA, G., GORAIEB, A., BOLLER, E., ELMOUTAOUAKKIL, A., FERRERO, C. et BARUCHEL, J. (2001). Non destructive three dimensional analysis of the packing of a binary beryllium pebble bed. *Fusion engineering and design*, 58:707–712.
- [Siau, 1984] SIAU, J. F. (1984). Permeability. *In Transport Processes in Wood*, pages 73–104. Springer.
- [SOeS, 2016] SOES (2016). *Repères - Chiffres clés de l'énergie, Édition 2015, Commissariat général au développement durable – Service de l'Observation et des Statistiques*.
- [Spitz *et al.*, 2012] SPITZ, C., MORA, L., WURTZ, E. et JAY, A. (2012). Practical application of uncertainty analysis and sensitivity analysis on an experimental house. *Energy and Buildings*, 55:459–470.

- [Stamm, 1959] STAMM, A. J. (1959). Bound-water diffusion into wood in the fiber direction. *Forest products journal*, 9:27–32.
- [Stamm et Hansen, 1937] STAMM, A. J. et HANSEN, L. A. (1937). The bonding force of cellulosic materials for water (from specific volume and thermal data). *Journal of Physical Chemistry*, 41(7):1007–1016.
- [Standfest et al., 2010] STANDFEST, G., KRANZER, S., PETUTSCHNIGG, A. et DUNKY, M. (2010). Determination of the microstructure of an adhesive-bonded medium density fiberboard (mdf) using 3-d sub-micrometer computer tomography. *Journal of Adhesion Science and Technology*, 24(8-10):1501–1514.
- [Succi, 2001] SUCCI, S. (2001). *The Lattice Boltzmann Equation : For Fluid Dynamics and Beyond*. Clarendon Press.
- [Suleiman et al., 1999] SULEIMAN, B., LARFELDT, J., LECKNER, B. et GUSTAVSSON, M. (1999). Thermal conductivity and diffusivity of wood. *Wood Science and Technology*, 33(6):465–473.
- [Suquet, 1987] SUQUET, P. (1987). Elements of homogenization for inelastic solid mechanics. *Homogenization techniques for composite media*, 272:193–278.
- [Takano et al., 2003] TAKANO, N., ZAKO, M., KUBO, F. et KIMURA, K. (2003). Microstructure-based stress analysis and evaluation for porous ceramics by homogenization method with digital image-based modeling. *International Journal of Solids and Structures*, 40(5):1225–1242.
- [Tarmian et al., 2012] TARMIAN, A., REMOND, R., DASHTI, H. et PERRÉ, P. (2012). Moisture diffusion coefficient of reaction woods : compression wood of *Picea abies* L. and tension wood of *Fagus sylvatica* L. *Wood Science and Technology*, 46(1-3):405–417.
- [Thibault et al., 2002] THIBAUT, X., BLOCH, J.-F. et BOLLER, E. (2002). Felt structure characterised by synchrotron microtomography. *Appita journal*, 55(2):145–148.
- [Thiery, 2013] THIERY, C. (2013). Tomographie à rayon x. Techniques de l'Ingénieur.
- [Thoemen et al., 2008] THOEMEN, H., WALTHER, T. et WIEGMANN, A. (2008). 3d simulation of macroscopic heat and mass transfer properties from the microstructure of wood fibre networks. *Composites science and technology*, 68(3):608–616.
- [Torquato, 2000] TORQUATO, S. (2000). Modeling of physical properties of composite materials. *International Journal of Solids and Structures*, 37(1):411–422.
- [Trtik et al., 2007] TRTIK, P., DUAL, J., KEUNECKE, D., MANNES, D., NIEMZ, P., STÄHLI, P., KAESTNER, A., GROSO, A. et STAMPANONI, M. (2007). 3d imaging of microstructure of spruce wood. *Journal of Structural Biology*, 159(1):46 – 55.

- [Van den Bulcke *et al.*, 2009] VAN DEN BULCKE, J., BOONE, M., VAN ACKER, J., STEVENS, M. et VAN HOOREBEKE, L. (2009). X-ray tomography as a tool for detailed anatomical analysis. *Annals of Forest Science*, 66(5):508–508.
- [Walther, 2016] WALTHER, E. (2016). *Lattice Boltzmann Method applied to Building Physics*. Theses, Université Paris-Saclay.
- [Walther *et al.*, 2015] WALTHER, E., BOGDAN, M., BENNACER, R. et SA, C. D. (2015). Cement paste morphologies and effective diffusivity : using the Lattice Boltzmann method. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, 0(0):1–13.
- [Walther et Thoemen, 2009] WALTHER, T. et THOEMEN, H. (2009). Synchrotron x-ray microtomography and 3d image analysis of medium density fiberboard (mdf). *Holzforschung*, 63(5):581–587.
- [Wang *et al.*, 2007] WANG, M., HE, J., YU, J. et PAN, N. (2007). Lattice Boltzmann modeling of the effective thermal conductivity for fibrous materials. *International Journal of Thermal Sciences*, 46(9):848–855.
- [Wang et Pan, 2008] WANG, M. et PAN, N. (2008). Predictions of effective physical properties of complex multiphase materials. *Materials Science and Engineering : R : Reports*, 63(1):1–30.
- [Woloszyn et Rode, 2008] WOLOSZYN, M. et RODE, C. (2008). Tools for performance simulation of heat, air and moisture conditions of whole buildings. In *Building Simulation*, volume 1, pages 5–24. Springer.
- [Xiao *et al.*, 2007] XIAO, X., DE CARLO, F. et STOCK, S. (2007). Practical error estimation in zoom-in and truncated tomography reconstructions. *Review of scientific instruments*, 78(6):063705.
- [Xuan *et al.*, 2010] XUAN, Y. M., ZHAO, K. et LI, Q. (2010). Investigation on mass diffusion process in porous media based on Lattice Boltzmann method. *Heat and Mass Transfer*, 46(10):1039–1051.
- [Yablecki *et al.*, 2012] YABLECKI, J., NABOVATI, A. et BAZYLAK, A. (2012). Modeling the Effective Thermal Conductivity of an Anisotropic Gas Diffusion Layer in a Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell. *Journal of The Electrochemical Society*, 159(6):B647–B653.
- [Youssef *et al.*, 2005] YOUSSEF, S., MAIRE, E. et GAERTNER, R. (2005). Finite element modelling of the actual structure of cellular materials determined by x-ray tomography. *Acta Materialia*, 53(3):719–730.
- [Zhang, 2012] ZHANG, T. (2012). *Imaging multi-resolution by the X-ray tomography : application to the local tomography in materials science*. Theses, Université Grenoble Alpes.
- [Zhao *et al.*, 2009] ZHAO, K., LI, Q. et XUAN, Y. (2009). Investigation on the three-dimensional multiphase conjugate conduction problem inside porous wick

- with the lattice boltzmann method. *Science in China Series E : Technological Sciences*, 52(10):2973–2980.
- [Zienkiewicz *et al.*, 1977] ZIENKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L., ZIENKIEWICZ, O. C. et TAYLOR, R. L. (1977). *The finite element method*, volume 3. McGraw-hill London.
- [Zou et He, 1997] ZOU, Q. et HE, X. (1997). On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. *Physics of Fluids (1994-present)*, 9(6):1591–1598.

Table des figures

2.1	Consommation d'énergie en France par secteur d'activité en 2014	16
2.2	Évolution de l'humidité de l'air intérieur simulée et mesurée lors d'un cycle diurne dans une pièce test dont les murs et le plafond sont recouverts de panneaux de bois [Künzel <i>et al.</i> , 2005].	18
2.3	Directions d'anisotropie et plans d'étude du bois [Guitard, 1987]. .	21
2.4	Organisation cellulaire d'un bois de conifère [Grosser, 1977]. . . .	22
2.5	Exemple d'isothermes de sorption [Siau, 1984].	23
2.6	Principe du changement d'échelle : à l'échelle microscopique, le milieu est hétérogène et doit être défini par sa morphologie et les propriétés de ses différentes phases. Ces informations permettent de prédire les propriétés macroscopiques qui peuvent être validées expérimentalement. Dans cet exemple, l'échelle microscopique correspond aux tissus du bois et l'échelle macroscopique correspond à un cerne annuel [Perré, 2010].	28
2.7	Maillage par éléments finis d'une microstructure d'os obtenue par micro-tomographie (taille d'un élément : 50 μm) [Hollister et Kikuchi, 1994].	29
2.8	La méthode de prise de moyenne suppose l'existence d'un volume élémentaire représentatif, assez grand pour que les quantités moyennées soient définies et assez petit pour éviter les variations macroscopiques et les effets de non-équilibre. Deux courbes sont représentées sur ce schéma : le point 1 est situé dans la phase pour laquelle la propriété considérée est grande, le point 2 dans la phase pour laquelle la propriété est petite (nulle dans cet exemple). . . .	29
2.9	Schéma illustrant les différents milieux représentés par une même cellule unitaire selon les conditions aux limites imposées.	31

2.10	Illustration schématique des opérations d'acquisition et de reconstruction de la micro-tomographie aux rayons X. Un faisceau de rayons X permet d'obtenir une série de projections de l'échantillon considéré. Ces projections sont reconstruites mathématiquement en une cartographie 3D traduisant l'absorption des rayons X dans le volume. L'image 3D est généralement présentée comme une série de coupes 2D. Image issue de [Landis et Keane, 2010].	32
2.11	Historique de la tomographie aux rayons X : évolution de la résolution spatiale avec le temps d'acquisition. Les symboles vides désignent des sources synchrotron alors que ceux pleins indiquent des sources de laboratoire. Les carrés rouges représentent des faisceaux blancs et les cercles noirs des scanners à faisceau monochromatique. Cette figure est issue de [Maire et Withers, 2014].	33
2.12	Maillage d'une mousse de polyuréthane par la méthode des éléments finis [Youssef <i>et al.</i> , 2005].	36
2.13	Reconstruction 3D d'un échantillon d'épicéa d'environ 200 μm de hauteur [Trtik <i>et al.</i> , 2007].	36
2.14	Exemple de sous-volume de MDF de taille $256 \times 256 \times 256$ voxels où les fibres sont marquées individuellement [Walther et Thoemen, 2009].	38
3.1	Un panneau de MDF (a) est usiné par machine de découpe laser. Le cylindre obtenu (b) a un diamètre de 5 mm.	43
3.2	Observation au microscope confocal de l'échantillon de MDF découpé au laser. À gauche, toute la surface de l'échantillon est présentée. À droite, un zoom sur le bord du cylindre est réalisé pour mesurer la zone endommagée.	43
3.3	Usinage du LDF. De gauche à droite : le support en aluminium contenant le cylindre de LDF pré-découpé ; le montage placé sous la tête de découpe laser ; la machine de découpe laser. Le tuyau visible sur les trois images permet d'alimenter le récipient en azote.	44
3.4	Un panneau de LDF (a) est usiné par une machine de découpe laser. Le panneau de LDF est pré-découpé à la scie cloche pour obtenir un cylindre de 2 cm de diamètre (b). Le cylindre obtenu par découpe laser est de 10 mm de diamètre (c).	44
3.5	Exemples d'images 2D reconstruites par Novitom. L'ensemble des coupes de chaque échantillon forme des volumes de dimension $2186 \times 2186 \times 4230$ voxels et $4538 \times 4538 \times 2160$ voxels dans les directions x , y et z , respectivement. La coupe d'épicéa présente la limite d'un cerne annuel (en haut à droite).	46

3.6	Exemple de traitement d'images 2D avec <i>Fiji</i> . Une rotation de 40° est effectuée sur une coupe initiale d'épicéa (a) afin que les directions x et y correspondent aux directions radiale et tangentielle respectivement (b). Une zone de bois initial est sélectionnée (c). Enfin un seuillage est réalisé (d) pour déterminer les pixels appartenant à la phase gazeuse (noir) et les pixels appartenant à la phase solide (blanc).	47
3.7	Histogramme répertoriant les pixels de la figure 3.6c selon leur niveau de gris. La limite entre les pixels appartenant à la phase gazeuse et ceux appartenant à la phase solide est déterminée par <i>Fiji</i> avec la méthode des moments.	48
3.8	Reconstruction 3D de zones réduites du LDF scanné par microtomographie aux rayons X. Pour toutes ces sélections, la taille est de $605 \times 605 \times 605 \mu\text{m}^3$, le nombre de voxels est de $200 \times 200 \times 200$ et la fraction solide ϵ_s est donnée pour chacune.	49
3.9	Reconstruction 3D de zones réduites du MDF scanné par microtomographie aux rayons X. Pour toutes ces sélections, la taille est de $195 \times 195 \times 195 \mu\text{m}^3$, le nombre de voxels est de $200 \times 200 \times 200$ et la fraction solide ϵ_s est donnée pour chacune.	50
3.10	Reconstruction 3D de zones réduites de l'épicéa scanné par microtomographie aux rayons X. La taille, le nombre de voxels et la fraction solide ϵ_s sont donnés pour chacune des sélections.	51
3.11	Densitométrie aux rayons X d'un cerne d'épicéa. Les valeurs tracées sont issues de [Decoux <i>et al.</i> , 2004]. On définit généralement la limite entre bois initial et bois final à l'endroit du cerne où la masse volumique est égale à la moyenne entre les masses volumiques minimale et maximale le long du cerne.	53
4.1	Domaines d'études, équations et méthodes de résolution suivant les différentes échelles (figure adaptée de [Walther, 2016]).	58
4.2	Schémas de vitesse utilisés.	60
4.3	Les principales étapes de la LBM dans le cas d'un schéma D_2Q_9 . L'épaisseur des flèches schématise la valeur des fonctions de distribution f_k	62
4.4	Contributions positives et négatives aux flux macroscopiques ϕ_x et ϕ_y pour un schéma D_2Q_9 . Les f_k à contribution positive sont en vert, les f_k à contribution négative sont en rouge.	64
4.5	Fonctions de distribution connues par la propagation (bleu) et inconnues (rouge) qu'il faut implémenter lors de l'application des conditions aux limites	66
4.6	Illustration de la méthode du <i>bounce-back</i> . Seules les fonctions de distribution d'intérêt sont représentées.	68

4.7	Illustration de la condition de glissement. Seules les fonctions de distribution d'intérêt sont représentées.	69
5.1	Conditions aux limites dans le cas d'un schéma D_2Q_9 . Les flèches bleues pleines représentent les f_k connues par propagation, les flèches en pointillé représentent les f_k inconnues, les flèches rouges et vertes sont déterminées différemment, l'épaisseur d'une flèche verte opposée à une flèche bleue traduit l'égalité entre deux f_k . Les fonctions de distribution f_0 ne sont pas représentées.	76
5.2	Flux en régime permanent au coin <i>nord-ouest</i> obtenus avec la méthode des différences finies. Schéma D_2Q_9 , $\lambda = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ }^{-1}\text{K}$, $\omega = 0,5$, $L_x = L_y = 1 \text{ m}$, $m = n = 100$	78
5.3	Flux en régime permanent obtenus avec la méthode du <i>bounce-back</i> . Schéma D_2Q_9 , $\lambda = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ }^{-1}\text{K}$, $\omega = 0,5$, $L_x = L_y = 1 \text{ m}$, $m = n = 100$	79
5.4	Flux en régime permanent au coin <i>nord-ouest</i> obtenus avec la condition de glissement. Schéma D_2Q_9 , $\lambda = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ }^{-1}\text{K}$, $\omega = 0,5$, $L_x = L_y = 1 \text{ m}$, $m = n = 100$	80
5.5	Flux en régime permanent au coin <i>nord-ouest</i> obtenus avec la condition de glissement aux frontières <i>nord</i> et <i>sud</i> et la méthode combinée Dirichlet/Neumann aux coins. Schéma D_2Q_9 , $\lambda = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ }^{-1}\text{K}$, $\omega = 0,5$, $L_x = L_y = 1 \text{ m}$, $m = n = 100$	81
5.6	Surface allouée à un nœud selon sa position sur un réseau 2D. . .	82
5.7	Mise en évidence d'un problème de flux avec le schéma D_2Q_9 sur une géométrie parallèle. $\omega_{min} = 1,3$, $m = 100$, $\lambda_1 = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ }^{-1}\text{K}$ et $\lambda_2 = 0,1 \text{ W m}^{-1} \text{ }^{-1}\text{K}$, $\rho c_p = 3,62 \cdot 10^6 \text{ W s m}^{-3} \text{ }^{-1}\text{K}$	83
5.8	Géométrie du milieu (a) et maillage (b) réalisés sous <i>Comsol</i> . . .	85
5.9	<i>Comsol</i> : Convergence de λ_{eq} avec le raffinement du maillage. En utilisant des éléments quadratiques, la convergence est beaucoup plus rapide qu'avec des éléments linéaires.	85
5.10	Rapport entre le nombre de points appartenant à la phase gazeuse et le nombre de points appartenant à la phase solide selon le nombre de nœuds du réseau m . La valeur analytique est tracée en rouge. Les écarts à la valeur théorique restent inférieurs à 1 %. . .	86
5.11	Diffusion thermique dans une matrice solide avec une inclusion gazeuse. Schéma D_2Q_5 , $\lambda_s = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ }^{-1}\text{K}$, $\lambda_g = 0.023 \text{ W m}^{-1} \text{ }^{-1}\text{K}$	87
5.12	Conductivité thermique équivalente en fonction du facteur de relaxation ω_{min} , pour différentes résolutions du maillage m . Diffusion thermique dans une matrice gazeuse avec une inclusion solide. Schéma D_2Q_5 , $\lambda_s = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ }^{-1}\text{K}$, $\lambda_g = 0.023 \text{ W m}^{-1} \text{ }^{-1}\text{K}$	88

5.13	Conductivité thermique équivalente en fonction du facteur de relaxation ω_{min} , pour différentes résolutions du maillage m . Diffusion thermique dans une matrice solide avec une inclusion gazeuse. Schéma D_2Q_9 , $\lambda_s = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ }^{-1}\text{K}$, $\lambda_g = 0.023 \text{ W m}^{-1} \text{ }^{-1}\text{K}$	89
5.14	Temps CPU requis en fonction du facteur de relaxation ω_{min} , pour les schémas de vitesse D_2Q_5 et D_2Q_9 . Diffusion thermique dans une matrice solide avec une inclusion gazeuse. $m = 100$, $\lambda_s = 1 \text{ W m}^{-1} \text{ }^{-1}\text{K}$, $\lambda_g = 0.023 \text{ W m}^{-1} \text{ }^{-1}\text{K}$	89
5.15	Mise en évidence de la nécessité d'appliquer une pondération sur les flux aux frontières.	91
5.16	Calcul de l'erreur faite sur Γ_{eq} et du paramètre de convergence à différents pas de temps sur une morphologie d'épicéa. Pour la diffusion thermique, un point est tracé toutes les 2×10^4 itérations, pour la diffusion massique, un point est tracé toutes les 12×10^4 itérations.	93
5.17	Un programme <i>OpenMP</i> est une succession de régions parallèles et séquentielles.	94
5.18	Schéma de l'algorithme utilisé.	97
6.1	Conditions aux limites imposées en 3D. Les conditions aux limites de Dirichlet sont imposées sur deux faces opposées (rouge), les conditions aux limites de Neumann (flux normal nul) sur les quatre autres faces (bleu). Certaines arêtes sont soumises aux conditions de Neumann (bleu), d'autres sont soumises à des conditions combinées Dirichlet/Neumann (violet). Les huit coins sont soumis à des conditions combinées Dirichlet/Neumann (violet).	100
6.2	Schéma de vitesse D_3Q_7	101
6.3	Directions dans lesquelles sont réalisés les calculs : directions radiale (R), tangentielle (T) et longitudinale (L) pour l'épicéa ; deux directions orthogonales situées dans le plan du panneau (p_1 et p_2) et direction transversale (t) pour les panneaux de fibres.	103
6.4	Calcul de propriétés équivalentes dans la direction radiale de sous-volumes de la sélection BI2.	105
6.5	Calcul de propriétés équivalentes dans la direction transversale de sous-volumes de la sélection MDF1.	105
6.6	Champs normalisés de température et lignes de courant dans le cas de la diffusion de chaleur dans les directions radiale et tangentielle dans du bois final d'épicéa ($x = R$ et $y = T$). On représente uniquement un plan transversal. Seule la moitié de l'échantillon est montrée dans la direction tangentielle.	107

6.7	Lignes de courant obtenues en régime permanent dans le cas de la simulation de la diffusion massique dans la direction p_1 de la morphologie LDF1 ($x = p_1$, $y = p_2$ et $z = t$). Seul un huitième du volume calculé est représenté pour une meilleure visibilité.	109
6.8	Flux selon x obtenu en régime permanent, Φ_x (W m^{-2}). Simulation de la diffusion thermique dans la direction p_1 de la morphologie LDF1 ($x = p_1$ et $y = p_2$). Seul un plan (p_1, p_2) est représenté.	110
6.9	Champs normalisés de température θ et de masse X obtenus en régime permanent dans le cas de la diffusion (thermique ou massique respectivement) dans la direction p_1 de l'échantillon LDF3 ($x = p_1$, $y = p_2$ et $z = t$).	111
6.10	Conductivité thermique équivalente λ_{eq} en fonction de la fraction solide ϵ_s dans trois directions des bois initial et final d'épicéa, du LDF et du MDF. Les modèles théoriques série (ligne pointillée) et parallèle (ligne pleine) sont représentés.	112
6.11	Différences de morphologies entre bois initial et bois final d'épicéa dans les directions radiale (R) et tangentielle (T).	113
6.12	Diffusivité massique adimensionnée équivalente D_{eq}^* en fonction de la fraction solide ϵ_s dans trois directions des bois initial et final d'épicéa, du LDF et du MDF. Les modèles théoriques série (ligne pointillée) et parallèle (ligne pleine) sont représentés. L'insert représente les diffusivités radiale et tangentielle pour le bois final à une échelle plus grande.	114
6.13	Comparaison des résultats entre les morphologies BI1 et MDF5. Les modèles théoriques série (ligne pointillée) et parallèle (ligne pleine) sont représentés.	115
6.14	Identification de familles de morphologies pour des panneaux de fibres en diffusion massique selon la direction considérée. Deux courbes $D_\mu^*(\epsilon_s)$ sont tracées avec $\mu_t = 0,18$ et $\mu_p = 0,43$	117
6.15	Identification de familles de morphologies pour des panneaux de fibres en diffusion thermique selon la direction considérée. Trois courbes $\lambda_\mu(\epsilon_s)$ sont tracées avec $\mu_t(\text{LDF}) = 0,11$; $\mu_t(\text{MDF}) = 0,22$ et $\mu_p = 0,53$	117

Liste des tableaux

2.1	Énergie nécessaire à la fabrication, carbone émis et stocké et part de bois de bâtiments fabriqués avec différents matériaux [Buchanan et Levine, 1999].	19
2.2	Analyse de cycle de vie de bâtiments situés à Växjö (Suède), la durée de vie supposée des bâtiments est de 50 ans [Dodoo <i>et al.</i> , 2012].	19
2.3	Énergie grise de différents isolants [Conseils Thermiques, 2016]. . .	19
3.1	Fraction solide, porosité et masse volumique des différentes sélections de matériaux.	52
4.1	Caractéristiques des schémas de vitesse utilisés, $c = \frac{\delta x}{\delta t} = \frac{\delta y}{\delta t} = \frac{\delta z}{\delta t}$	60
5.1	Conductivités thermiques équivalentes, nombre d'itérations, erreur sur λ_{eq} et facteur de gain de temps obtenus pour deux critères de convergence et pour différents ω_{min} . La référence pour le calcul de l'erreur et du gain de temps est donnée par le cas $\omega_{min} = 1, 4$. . .	96
6.1	Conductivités thermiques et diffusivités massiques équivalentes de bois initial et de bois final d'épicéa dans les directions radiale (R), tangentielle (T) et longitudinale (L).	106
6.2	Conductivités thermiques et diffusivités massiques équivalentes de LDF et de MDF dans les directions incluses dans le plan du panneau (p_1) et (p_2) et dans la direction transversale (t).	108

Annexe A

Développement de Chapman-Enskog

A.0.1 Le modèle Lattice Boltzmann pour la diffusion

Dans cette annexe, on cherche à démontrer que l'équation de la diffusion peut être retrouvée à partir du modèle Lattice Boltzmann que l'on a utilisé dans ce travail de thèse. Pour cela on utilise un développement asymptotique.

L'équation de la diffusion est la suivante :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \alpha \nabla^2 \Psi \quad (\text{A.1})$$

avec α le coefficient de diffusion thermique et Ψ la variable macroscopique.

L'équation de Lattice Boltzmann qui correspond à l'évolution de la fonction d'équilibre est donnée (avec l'approximation BGK présentée au chapitre 4) par :

$$f_k(\vec{x} + \vec{c}_k \delta t, t + \delta t) - f_k(\vec{x}, t) = -\frac{\delta t}{\tau} [f_k(\vec{x}, t) - f_k^{eq}(\vec{x}, t)] \quad (\text{A.2})$$

avec $\frac{\delta t}{\tau} = \omega$.

Dans le modèle Lattice Boltzmann utilisé dans ce travail de thèse pour modéliser la diffusion, la fonction de distribution d'équilibre est donnée par :

$$f_l^{eq} = w_l \Psi \quad (\text{A.3})$$

où les w_l sont les facteurs de pondération relatifs à la direction de propagation, tels que $\sum_l w_l = 1$.

A.0.2 Analyse de Chapman-Enskog

Pour réaliser une analyse de Chapman-Enskog [Higuera, 1990] de l'équation (A.2), on développe la fonction de distribution et les dérivées temporelle

et spatiale de la façon suivante :

$$f_k \approx f_k^{(0)} + \epsilon f_k^{(1)} + \epsilon^2 f_k^{(2)}, \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \approx \epsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2}, \quad (\text{A.5})$$

$$\vec{\nabla} \approx \epsilon \vec{\nabla}_1, \quad (\text{A.6})$$

où ϵ est un paramètre d'expansion petit.

Le développement de Taylor de la fonction de distribution donne au deuxième ordre :

$$f_k(\vec{x} + \vec{c}_k \delta t, t + \delta t) = f_k(\vec{x}, t) + \delta t \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla} \right) f_k(\vec{x}, t) + \frac{\delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla} \right)^2 f_k(\vec{x}, t). \quad (\text{A.7})$$

En injectant cette expression dans l'équation (A.2) et en divisant par δt , on obtient :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla} \right) f_k(\vec{x}, t) + \frac{\delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla} \right)^2 f_k(\vec{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_k(\vec{x}, t) - f_k^{eq}(\vec{x}, t)]. \quad (\text{A.8})$$

En utilisant les équations (A.4), (A.5) et (A.6), on a alors :

$$\begin{aligned} & \left(\epsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \epsilon \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla}_1 \right) (f_k^{(0)} + \epsilon f_k^{(1)} + \epsilon^2 f_k^{(2)}) \\ & + \frac{\delta t}{2} \left(\epsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \epsilon \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla}_1 \right)^2 (f_k^{(0)} + \epsilon f_k^{(1)} + \epsilon^2 f_k^{(2)}) \\ & = -\frac{1}{\tau} [f_k^{(0)} + \epsilon f_k^{(1)} + \epsilon^2 f_k^{(2)} - f_k^{eq}]. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Comme $(a + b + c)^2 = a^2 + b^2 + c^2 + 2ab + 2ac + 2bc$, on a :

$$\begin{aligned} & \left(\epsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \epsilon \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla}_1 \right) (f_k^{(0)} + \epsilon f_k^{(1)} + \epsilon^2 f_k^{(2)}) \\ & + \frac{\delta t}{2} \left(\epsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial t_1^2} + \epsilon^4 \frac{\partial^2}{\partial t_2^2} + \epsilon^2 \vec{c}_k^2 \vec{\nabla}_1^2 + 2\epsilon^3 \frac{\partial}{\partial t_1} \frac{\partial}{\partial t_2} + 2\epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_1} \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla}_1 + 2\epsilon^3 \frac{\partial}{\partial t_2} \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla}_1 \right)^2 \\ & \quad \times (f_k^{(0)} + \epsilon f_k^{(1)} + \epsilon^2 f_k^{(2)}) \\ & = -\frac{1}{\tau} [f_k^{(0)} + \epsilon f_k^{(1)} + \epsilon^2 f_k^{(2)} - f_k^{eq}]. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

En traitant séparément les termes d'ordre 0, 1 et 2 en ϵ , on obtient :

— à l'ordre 0 en ϵ :

$$0 = -\frac{1}{\tau} [f_k^{(0)} - f_k^{eq}], \quad (\text{A.11})$$

d'où :

$$\boxed{f_k^{(0)} = f_k^{eq}} \quad (\text{A.12})$$

— à l'ordre 1 en ϵ :

$$\boxed{\left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla}_1 \right) f_k^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_k^{(1)}} \quad (\text{A.13})$$

— à l'ordre 2 en ϵ :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla}_1 \right) f_k^{(1)} + \frac{\partial}{\partial t_2} f_k^{(0)} + \frac{\delta t}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} + \vec{c}_k^2 \vec{\nabla}_1^2 + 2 \frac{\partial}{\partial t_1} \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla}_1 \right) f_k^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_k^{(2)} \quad (\text{A.14})$$

soit :

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t_2} f_k^{(0)} + \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla}_1 \right) f_k^{(1)} + \frac{\delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla}_1 \right)^2 f_k^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_k^{(2)}} \quad (\text{A.15})$$

En injectant l'équation (A.13) dans l'équation (A.15), on a :

$$\frac{\partial}{\partial t_2} f_k^{(0)} + \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla}_1 \right) f_k^{(1)} - \frac{\delta t}{2\tau} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla}_1 \right) f_k^{(1)} = -\frac{1}{\tau} f_k^{(2)} \quad (\text{A.16})$$

soit :

$$\frac{\partial}{\partial t_2} f_k^{(0)} + \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla}_1 \right) f_k^{(1)} = -\frac{1}{\tau} f_k^{(2)}. \quad (\text{A.17})$$

En sommant sur l'ensemble des fonctions de distribution, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t_2} \sum_k f_k^{(0)} + \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau} \right) \sum_k \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \vec{c}_k \cdot \vec{\nabla}_1 \right) f_k^{(1)} = -\frac{1}{\tau} \sum_k f_k^{(2)}. \quad (\text{A.18})$$

Or, en sommant sur l'ensemble des fonctions de distribution, l'équation (A.4), on a :

$$\sum_k f_k = \sum_k f_k^{(0)} + \epsilon \sum_k f_k^{(1)} + \epsilon^2 \sum_k f_k^{(2)}. \quad (\text{A.19})$$

En identifiant les termes selon l'ordre de ϵ , on obtient donc :

$$\sum_k f_k = \sum_k f_k^{(0)}, \quad (\text{A.20})$$

$$\sum_k f_k^{(1)} = 0, \quad (\text{A.21})$$

$$\sum_k f_k^{(2)} = 0. \quad (\text{A.22})$$

De plus, comme $f_k^{(0)} = f_k^{eq}$ et que $\sum_k f_k^{eq} = \Psi$, on obtient des équations (A.18), (A.21) et (A.22) :

$$\boxed{\frac{\partial \Psi}{\partial t_2} + \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau}\right) \vec{\nabla}_1 \cdot \sum_k \vec{c}_k f_k^{(1)} = 0} \quad (\text{A.23})$$

A.0.3 Utilisation du schéma D_2Q_5

Il reste à montrer que les schémas de vitesse que l'on utilise permettent de remonter à l'équation de la diffusion à partir de l'équation (A.23). Montrons cela dans le cas du schéma D_2Q_5 dont les facteurs de pondération w_k et les vitesses \vec{c}_k sont les suivants :

$$w_k = \begin{cases} w_0 = 1/3 \\ w_1 = 1/6 \\ w_2 = 1/6 \\ w_3 = 1/6 \\ w_4 = 1/6 \end{cases} \quad \text{et} \quad \vec{c}_k = \begin{cases} c_0 = (0,0)c \\ c_1 = (1,0)c \\ c_2 = (-1,0)c \\ c_3 = (0,1)c \\ c_4 = (0,-1)c \end{cases} \quad (\text{A.24})$$

avec $c = \frac{\delta x}{\delta t}$.

On a alors :

$$\sum_k \vec{c}_k f_k^{(1)} = (c f_1^{(1)} - c f_2^{(1)}) \vec{e}_x + (c f_3^{(1)} - c f_4^{(1)}) \vec{e}_y \quad (\text{A.25})$$

avec \vec{e}_x et \vec{e}_y les vecteurs unitaires dans les directions x et y respectivement.

De plus, l'équation (A.13) fournit :

$$\begin{cases} f_1^{(1)} = -\tau \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + c \frac{\partial}{\partial x_1} \right) f_1^{(0)} \\ f_2^{(1)} = -\tau \left(\frac{\partial}{\partial t_1} - c \frac{\partial}{\partial x_1} \right) f_2^{(0)} \\ f_3^{(1)} = -\tau \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + c \frac{\partial}{\partial y_1} \right) f_3^{(0)} \\ f_4^{(1)} = -\tau \left(\frac{\partial}{\partial t_1} - c \frac{\partial}{\partial y_1} \right) f_4^{(0)} \end{cases} \quad (\text{A.26})$$

et comme $\forall k, f_k^{(0)} = \Psi/6$, on a :

$$\begin{cases} f_1^{(1)} - f_2^{(1)} = -\frac{\tau}{3} c \frac{\partial}{\partial x_1} \Psi \\ f_3^{(1)} - f_4^{(1)} = -\frac{\tau}{3} c \frac{\partial}{\partial y_1} \Psi \end{cases} \quad (\text{A.27})$$

L'équation (A.23) devient donc :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t_2} + \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau}\right) \left[-\frac{\tau}{3} \left(c^2 \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \Psi + c^2 \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \Psi \right) \Psi \right] = 0 \quad (\text{A.28})$$

soit :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t_2} = \frac{\tau}{3} \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau} \right) c^2 \vec{\nabla}_1^2 \Psi. \quad (\text{A.29})$$

En réalisant le changement de variable avec les équations (A.5) et (A.6) et en identifiant les termes en ϵ^2 , on obtient :

$$\boxed{\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{c^2}{3} \left(\tau - \frac{\delta t}{2} \right) \vec{\nabla}^2 \Psi} \quad (\text{A.30})$$

Le facteur $1/3$ dépend du schéma de vitesse utilisé. On retrouve ainsi l'équation de la diffusion avec :

$$\boxed{\alpha = \frac{c^2}{3} \left(\tau - \frac{\delta t}{2} \right)} \quad (\text{A.31})$$

Avec $c = \delta x / \delta t$, $\omega = \delta t / \tau$ et en réarrangeant l'équation, on trouve :

$$\alpha = \frac{\delta x^2}{3\delta t} \left(\frac{1}{\omega} - \frac{1}{2} \right) \quad (\text{A.32})$$

ce qui correspond à l'équation (4.12) donnée dans le chapitre 4 dans le cas d'un schéma D_2Q_5 .

En appliquant la même méthodologie aux autres schémas de vitesse, D_2Q_9 et D_3Q_7 , on retrouve également l'équation (4.12). On a ainsi démontré que le modèle Lattice Boltzmann utilisé pour ce travail de thèse permettait bien de modéliser l'équation de la diffusion.

Titre : Modélisation par la méthode Lattice Boltzmann de la diffusion de chaleur et d'humidité dans des matériaux biosourcés à partir de leur morphologie 3D

Mots clefs : bois, panneau de fibres, micro-tomographie X, anisotropie, calcul parallèle

Résumé : Avec la performance thermique croissante des bâtiments, les codes de simulation utilisés en conception requièrent des données de plus en plus précises sur les matériaux de construction. De plus, l'utilisation de matériaux biosourcés qui sont hygroscopiques (leur teneur en eau s'équilibre avec l'air humide ambiant) est en pleine expansion. Leur conductivité thermique et leur diffusivité massique doivent ainsi être caractérisées précisément. Un facteur essentiel affectant ces propriétés est la microstructure des matériaux.

Ce travail de thèse propose de prédire les propriétés macroscopiques d'épicéa et de panneaux de fibres de bois (matériaux hétérogènes et anisotropes) à partir de leur morphologie réelle 3D. Celle-ci est obtenue par micro-tomographie synchrotron aux rayons X, outil très performant pour caractériser

la structure interne d'un matériau de façon non destructive. Un traitement d'images permet de segmenter les phases solide et gazeuse. La méthode numérique choisie pour modéliser la diffusion de chaleur et de masse est la méthode Lattice Boltzmann car elle est simple à implémenter et à paralléliser et qu'elle peut facilement traiter des morphologies complexes.

Les conductivités thermiques et diffusivités massiques équivalentes sont calculées dans trois directions orthogonales pour chaque matériau. Les résultats mettent en évidence l'influence de la structure interne et la forte anisotropie des matériaux étudiés (rapport 2 entre les directions tangentielle et longitudinale du bois en thermique et 30 en massique). La conductivité thermique transversale du panneau léger est de $0,04 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

Title: Heat and moisture diffusion in bio-based materials from their 3D morphology using Lattice Boltzmann method

Keywords: wood, fibreboard, X-ray microtomography, anisotropy, parallel computing

Abstract: As thermal performance of buildings is increasing, the simulation codes used during design require more accurate construction material data. Moreover, the use of bio-based materials which are hygroscopic (their moisture content balances with the ambient moist air) is booming. Their thermal conductivity and mass diffusivity must therefore be accurately characterized. A key factor affecting these properties is the microstructure of the materials.

This work is dedicated to the prediction of macroscopic properties of spruce and fibreboards (heterogeneous and anisotropic materials) from their real 3D morphology. This is obtained by synchrotron X-ray microtomography, a powerful and non-destructive technique to characterize the internal

structure of materials. Image processing allows the segmentation of the solid and gaseous phases. To model heat and mass diffusion, we choose the Lattice Boltzmann method because of its simple numerical development, suitability for parallel computing and easy processing of complex morphologies.

The equivalent thermal conductivity and mass diffusivity are calculated in three orthogonal directions for each material. The results highlight the influence of the internal structure and the strong anisotropy of the materials studied (ratio of 2 between tangential and longitudinal directions of wood for heat diffusion and of 30 for mass diffusion). The transverse thermal conductivity of the lightweight board is about $0,04 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

