

# De la microstructure à la conductivité thermique dans des céramiques $\text{UO}_2$ , par une technique mathématique originale

## From $\text{UO}_2$ ceramics microstructure to thermal conductivity using an original mathematical technique

Etienne Delobre<sup>1</sup>, Renaud Masson<sup>1</sup>, Marc Josien<sup>1</sup> et Michel Bornert<sup>1</sup>

<sup>1</sup>CEA, DES, IRESNE, DEC, Cadarache F-13018 Saint-Paul-lez-Durance, France

<sup>2</sup>Laboratoire Navier, Ecole des ponts et chaussées, Institut Polytechnique de Paris, Univ. Gustave Eiffel, CNRS, 6-8 avenue Blaise Pascal, Champs-sur-Marne, 77455 Marne-la-Vallée

**Résumé** - On considère une microstructure diphasique, dont la géométrie est figée, mais le contraste des propriétés matériaux est variable. Est-il possible, à partir des valeurs de conductivités effectives calculées pour quelques contrastes, de déduire une densité spectrale caractéristique de la microstructure et un modèle réduit de propriété effective ? En partant de la représentation de la conductivité par une intégrale de Stieltjes, notre méthode alternative propose d'approcher cette conductivité par une fraction rationnelle barycentrique à l'aide de l'algorithme AAA. Avec quelques simulations, cette méthode permet d'obtenir une loi de comportement thermique condensée. Testée sur le modèle analytique de Bruggeman, puis pour estimer la conductivité d'une céramique d' $\text{UO}_2$  dotée d'un réseau poreux complexe, cette méthode se révèle très performante.

**Abstract** - We consider a two-phase microstructure with a fixed geometry, but variable contrast in material properties. Is it possible, based on the effective conductivity values calculated for a few contrasts, to deduce a characteristic spectral density of the microstructure and a reduced model of effective property ? Our method offers an alternative approach : it is based on representing conductivity through Stieltjes's integral, approximated using a barycentric rational fraction coupled with the AAA algorithm. With only a few simulations, this approach enables the derivation of a compact thermal behavior law. Initially tested on Bruggeman's analytical model and later applied to estimate the conductivity of  $\text{UO}_2$  ceramic with a complex porous network, this method has proven to be highly effective.

## 1 Introduction

Le matériau considéré ici est une céramique de dioxyde d'uranium ( $\text{UO}_2$ ) abritant une distribution de porosités sphériques à petite échelle et un réseau poreux interconnecté à une échelle plus grande. Des travaux précédents, [1] et [2], s'appuyant sur la fabrication de microstructures modèles, leur caractérisation et leur modélisation ont montré le rôle déterminant du degré d'interconnexion du réseau poreux sur la conductivité effective de la céramique. Le modèle, validé par comparaison à des mesures expérimentales [3], s'appuie sur une modélisation morphologique 3D du réseau poreux affectant la microstructure. Des simulations à champ complet de la réponse thermique de ces microstructures virtuelles donnent la conductivité thermique équivalente. Mais ce modèle complexe de conductivité est trop lourd pour être utilisé directement dans une simulation à une échelle supérieur. Tabuler des valeurs de conductivité thermique pour différents jeux de

paramètres serait possible mais limité. C'est pourquoi, nous proposons ici de revisiter les résultats théoriques afin de proposer une loi (et non une corrélation) dépendant de la morphologie du réseau poreux et de la conductivité de la phase matrice et gazeuse.

Dans le cas considéré ici, celui d'un matériau isotrope diphasique à géométrie fixée, la conductivité effective peut être représentée théoriquement par une intégrale de Stieljes. Son intégrande dépend de façon distincte du contraste et d'une fonction scalaire, la densité spectrale de la microstructure, voir [4]. Nous revenons sur ce résultat théorique en section 2. Connaissant la conductivité effective en fonction de quelques contrastes (dans notre cas grâce à des résultats de simulation à champ complet), est-il possible de déterminer cette densité spectrale de la microstructure et de déduire une expression analytique de la conductivité effective ? Dans la section 2, nous rappelons comment une représentation de la conductivité effective par des approximants de Padé permet à [5] d'estimer la densité spectrale d'une microstructure donnée. Dans cette même section 2, nous proposons une alternative basée sur la représentation barycentrique des fractions rationnelles et l'algorithme AAA proposé par [6]. Dans les sections 3 puis 4, nous appliquons cette approche au modèle analytique de Bruggeman [7] puis à des microstructures modèles des céramiques  $\text{UO}_2$  présentant un réseau poreux plus ou moins interconnecté.

## 2 Cadre théorique

On considère un matériau hétérogène constitué de deux phases, une phase inclusionnaire dispersée dans une matrice, dont les conductivités sont respectivement notées  $\lambda_p$  et  $\lambda_m$ . Dans ce qui suit, ces conductivités ne dépendent pas de la température (thermique linéaire). La conductivité effective de ce matériau, notée  $\tilde{\lambda}$ , est la conductivité du matériau homogène ayant le même comportement thermique moyen que le matériau hétérogène. Cette conductivité thermique effective dépend de la conductivité de ses constituants,  $\lambda_m$  et  $\lambda_p$ , et de l'organisation spatiale des deux phases aussi nommée microstructure. En définissant le contraste  $z$  par le rapport entre la conductivité des inclusions et de la matrice,  $z = \lambda_p/\lambda_m$ , la propriété de linéarité de la conductivité effective [8] (p. 372) vis à vis des conductivités de ses deux constituants est utilisée pour définir la conductivité thermique normalisée, notée  $\tilde{m}_m(z)$ , par :

$$\tilde{m}_m(z) = \frac{\tilde{\lambda}(\lambda_m, \lambda_p)}{\lambda_m} = \tilde{\lambda} \left( 1, \frac{\lambda_p}{\lambda_m} \right) = \tilde{\lambda}(1, z). \quad (1)$$

Pour une microstructure fixée, la conductivité effective, dont on cherche une estimation, ne dépend ainsi plus que d'une seule variable : le contraste  $z$ . Cette fonction est analytique sur le plan complexe privé de l'axe réel négatif, voir [8]. La fonction  $F$  dérivant de la conductivité effective, utilisée par la suite, est définie par :

$$F(s) = 1 - \tilde{m}_m(z), \quad \text{où} \quad s = \frac{1}{1-z}. \quad (2)$$

Par la transformation  $s = \frac{1}{1-z}$ , cette fonction est analytique sur tout le plan complexe privé de l'intervalle  $[0, 1]$ . Les auteurs de [4] ont montré que  $F(s)$  possède la représentation intégrale suivante :

$$F(s) = \int_0^1 \frac{f(x)dx}{s-x}, \quad (3)$$

où  $f$  est une fonction nommée densité spectrale dépendant uniquement de la microstructure. Cette représentation à l'avantage de découpler l'information de la microstructure – contenue dans  $f$  – des conductivités thermiques des deux constituants du milieu, portées par  $s$ .

## 2.1 Estimations de la conductivité effective sous la forme d'approximations algébriques

Si on cherche à approcher la densité spectrale par une somme de raies discrètes  $p_0 < \dots < p_N$  localisées dans l'intervalle  $[0, 1]$ , cela conduit à une approximation de  $F(s)$  sous forme d'une fraction rationnelle dont les pôles simples sont  $p_0 = 0 < p_1 < \dots < p_N < 1$  et les résidus sont  $r_0 \dots r_N$  selon :

$$F(s) \approx \frac{r_0}{s} + \sum_{i=1}^{i=N} \frac{r_i}{s - p_i}. \quad (4)$$

En introduisant les  $N$  réels négatifs  $q_i = 1 - 1/p_i$  ( $i = 1 \dots N$ ), on retrouve ainsi des résultats reportés dans les travaux de D. J. Bergman [9]. Ces travaux montrent que la conductivité thermique effective normalisée peut être approchée par une fraction rationnelle dépendant du contraste  $z$  et de la morphologie de la microstructure sous cette forme :

$$\tilde{m}_m(z) \approx a_0 + a_\infty z + \sum_{i=1}^{i=N} \frac{t_i}{z - q_i}, \quad (5)$$

où  $a_0 = 1 - r_0 + \sum_{i=1}^{i=N} r_i (1 - q_i)$ ,  $t_i = -r_i (1 - q_i)^2$  et  $a_\infty = r_0$ . Les  $N$  résidus et pôles  $t_i, q_i$  ( $i = 1 \dots N$ ) sont négatifs et strictement négatifs, respectivement.  $a_0$  est un coefficient réel positif tout comme  $a_\infty$  qui traduit le comportement thermique du milieu pour des inclusions infiniment plus conductrices que la matrice ( $z \rightarrow \infty$ ). Dans le cas où la phase inclusionnaire  $p$  n'est pas percolante,  $a_\infty = 0$ . Les éléments caractéristiques de la fraction rationnelle – les pôles, les résidus,  $a_\infty$  et  $a_0$  – dépendent donc uniquement de la morphologie de la microstructure. S'ils sont connus, une approximation analytique de  $\tilde{m}_m$  pour tout contraste réel positif est établie.

Inversement, connaissant soit par des mesures soit par simulation numérique la conductivité effective du milieu hétérogène considéré pour différentes valeurs du contraste, est-il possible d'identifier la densité spectrale caractéristique de la microstructure considérée ? Par la suite nous supposons connues les valeurs de la conductivité effective normalisée pour  $M$  valeurs du contraste ( $z_1, \dots, z_M$ ) et donc d'après la relation (2) de la fonction  $F(s)$  pour les  $M$  valeurs correspondantes de  $s$  notées  $s_k = 1/(1 - z_k)$  pour  $k = 1 \dots M$ .  $S$  désigne cet ensemble de points pour lesquels  $\forall s_k \in S$ , la fonction  $F(s_k)$  est connue. Nous cherchons une fraction rationnelle de la forme (4) approchant au mieux cette fonction  $F(s)$  et nous notons  $r(s)$  cette fraction rationnelle. Plusieurs méthodes existent pour retrouver les éléments caractéristiques de la fraction rationnelle, celle de [5] est résumée dans la section 2.2 et une méthode alternative est proposée en section 2.3.

## 2.2 Méthode proposée par D. Zhang et E. Cherkaev

Cette approche directe est adoptée dans [5] et [10] dans le cas de l'émissivité effective. En résumé, on cherche un approximant de Padé de la fonction  $F(s)$  calculée pour différentes valeurs de  $s$  notées,  $s_1, \dots, s_M$  de la forme :

$$F(s) \approx \frac{n_0 + n_1 s + \dots + n_{N_p+1} s^{N_p}}{d_0 + s + d_2 s^2 + \dots + d_{N_p} s^{N_p+1}}, \quad (6)$$

où les  $M = 2N_p + 2$  coefficients  $(n_0, \dots, n_{N_p}, d_0, d_2, \dots, d_{N_p+1})$  dépendent de la microstructure. À partir des points connus  $F(s_k) = F_k$  ( $k = 1 \dots 2N_p + 2$ ), la section 4 de [5] détaille le calcul de ces coefficients qui conduit au système linéaire suivant :

$$n_0 + n_1 s_k + \dots + n_{N_p+1} s_k^{N_p+1} - d_0 F_k - d_2 d_k^2 - \dots - b_{N_p} = F_k s_k, \quad (k = 1, \dots, 2N_p + 2). \quad (7)$$

Mais ce système étant mal conditionné, il lui est préféré une optimisation sous contrainte. Les couples pôle-résidu trouvés par la suite servent à calculer la fonction de densité spectrale  $f$  de (3) comme proposé dans [10].

### 2.3 Alternative proposée : fraction rationnelle barycentrique et algorithme AAA

Comme expliqué précédemment, la représentation classique de la fraction rationnelle (6), tout comme celle en (5) conduit à un problème de minimisation mal conditionné. C'est pourquoi nous proposons ici d'adopter la représentation en fraction rationnelle barycentrique donnée par :

$$F(s) \approx \frac{\sum_{k=1}^{N_b} \frac{w_k \bar{F}_k}{s - \bar{s}_k}}{\sum_{k=1}^{N_b} \frac{w_k}{s - \bar{s}_k}} = \frac{\text{num}(s)}{\text{den}(s)} = r(s), \quad (8)$$

où  $\bar{s}_k \in \bar{S} \subset S$  ( $k = 1 \dots N_b$ ) représente des nœuds d'interpolation parmi  $S$  pour lesquels la fonction  $F(s)$  est connue et notée  $\bar{F}_1 = 1 - \tilde{m}_m(\bar{z}_1)$ ,  $\dots$ ,  $\bar{F}_{N_b} = 1 - \tilde{m}_m(\bar{z}_{N_b})$ . Ainsi, les nœuds  $\bar{s}_k$  sont associés à des poids  $w_k$  non nuls qui sont des singularités apparentes dans (8) et l'approximation  $r$  vérifie bien  $r(\bar{s}_k) = \bar{F}_k$  pour  $k = 1 \dots N_b$ .

Parmi les méthodes permettant de trouver les coefficients du développement (8), l'algorithme adaptive Antoulas–Anderson (AAA) [6] est l'un des plus efficace. AAA est un algorithme itératif qui construit l'approximation  $r$  sous la forme d'une fraction rationnelle barycentrique (8) par ajout successif de termes  $\frac{w_k \bar{F}_k}{s - \bar{s}_k}$  et  $\frac{w_k}{s - \bar{s}_k}$ . Lors de l'initialisation, un élément de  $S = \{s_1, \dots, s_M\}$  – l'ensemble des points où la fonction  $F$  est connue – noté  $\bar{s}_1$  est sélectionné et son poids  $w_1$  associé est fixé à 1. On dit que  $\bar{s}_1$  est un nœud de  $r$  car  $r$  interpole  $F$  au point  $\bar{s}_1$ . L'itération  $n$  de la boucle qui suit l'initialisation de l'algorithme débute par le calcul de l'écart  $|F(s_j) - r(s_j)|$  pour tout  $s_j \in S^{(n-1)}$  où  $S^{(n)} = S \setminus \{\bar{s}_1, \dots, \bar{s}_n\}$  est l'ensemble des points qui ne sont pas des nœuds à l'itération  $n$ . Le point  $s_j$  pour lequel l'écart est le plus grand est choisi comme nœud et désormais noté  $\bar{s}_n$  puis les poids  $w_1, \dots, w_n$  sont choisis par optimisation sous contrainte tels que :

$$C_n(w_1, \dots, w_n) = \min_{w_k} (\|F \text{ den} - \text{num}\|_{S^{(n)}}), \quad \|w\|_n = 1, \quad (9)$$

où  $\|\cdot\|$  désigne la norme  $L_2$ . L'optimisation sous contrainte de [5] pose un problème de conditionnement selon les auteurs, ce qui n'est pas le cas ici, car pour un choix judicieux de points connus  $S$ , les nœuds d'interpolation  $\bar{S}$  sont assez indépendants des pôles de l'approximation  $r$  [6]. Les itérations s'arrêtent lorsque l'une des conditions d'arrêts suivantes est atteinte : 1.  $C_n(w_1, \dots, w_n)$  est inférieure à une tolérance donnée ; 2. le nombre d'itérations souhaité est atteint. Notons que tous les éléments de  $S$  peuvent ne pas être des nœuds d'interpolation et dans ce cas  $N_b < M$ . Les pôles et résidus trouvés par AAA sont ensuite utilisés, tout comme dans [10], pour approcher la densité spectrale et la conductivité effective.

### 3 Application au modèle de Bruggeman

La méthode alternative décrite dans la section 2.3 est appliquée au modèle analytique de Bruggeman [7] pour calculer une approximation de la densité spectrale  $f$ . Les résultats sont comparés à ceux de [10] qui utilise la méthode résumée dans la section 2.2. La fonction  $F$  est :

$$F(s) = 1 - \frac{1}{4} \left( \gamma + \sqrt{\gamma^2 + 8 \left( \frac{s-1}{s} \right)} \right), \quad \text{où } \gamma = (3c - 1) \left( \frac{s-1}{s} \right) + 2 - 3c, \quad (10)$$

où  $c$  désigne la fraction volumique d'inclusion. Dans [10] les auteurs montrent que la densité spectrale  $f$  contient une raie discrète en  $x = 0$  lorsque la fraction volumique  $c$  dépasse le seuil de percolation égal ici à  $\frac{1}{3}$  et un spectre continue  $f_c$  entre  $x_1$  et  $x_2$  donné par :

$$f_c(x) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi x} \sqrt{-9x^2 + 6(c+1)x - (3c-1)^2} & \text{si } x_1 < x < x_2, \\ 0 & \text{si } x \leq x_1 \text{ ou } x \geq x_2, \end{cases} \quad (11)$$

où  $x_1$  et  $x_2$  sont obtenus analytiquement. Deux cas sont étudiés ici : 1.  $c = 20 \%$ ; 2.  $c = 75 \%$ , cas où il y a percolation des deux phases qui se traduit par l'apparition d'un pôle isolé en  $s = 0$ .

Ici le nombre de points de contrastes pour lesquels la conductivité effective normalisée est calculé vaut  $M = 30$ . Ces points sont répartis pour des valeurs de  $z$  choisies sur un intervalle volontairement large :  $[10^{-4}, 10^4]$ . La liste des  $s$ , obtenue avec la relation (2) permet de constituer les 30 couples  $(s, F(s))$  qui sont donnés à AAA pour obtenir les pôles et résidus de l'approximation. La partie gauche des figures 1 et 2 montrent les pôles et les résidus donnés par AAA et [10]. Il est difficile de comparer deux courbes résidus(pôles) car la valeur des résidus varie en fonction du nombre de pôles. Le pôle attendu en  $s = 0$  et son résidu, qui ne varient pas avec le nombre de pôles cherché, sont retrouvés par AAA. La partie droite des figures 1 et 2 donnant la densité spectrale  $f$  montre une bonne adéquation entre les points obtenus avec AAA et les résultats analytiques calculés avec (11). À noter que dans [10], les points  $x_1$  et  $x_2$  (cf. (11)) calculés analytiquement sont utilisés pour approximer la densité spectrale, ce qui n'est pas le cas ici.

Notre méthode alternative se révèle efficace dans le cas du modèle de Bruggeman. Cependant, le pôle isolé en  $s = 0$  est connu *a priori* ici et il est donc possible de l'écarter au moment du calcul de la densité spectrale, ce qui n'est pas faisable lorsque le spectre discret est inconnu.

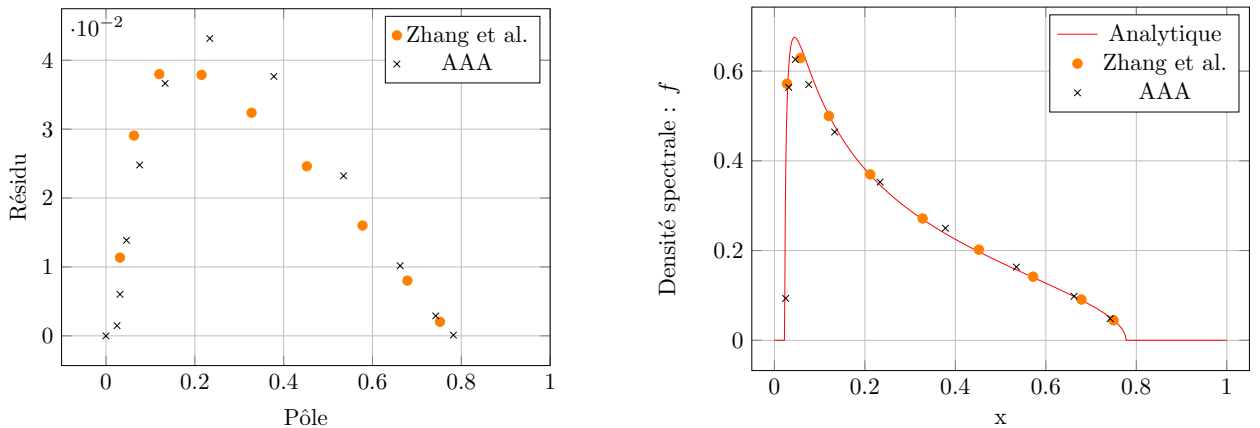


Figure 1 : Pôles et résidus à gauche et densité spectrale à droite dans le cas  $c = 20 \%$ .

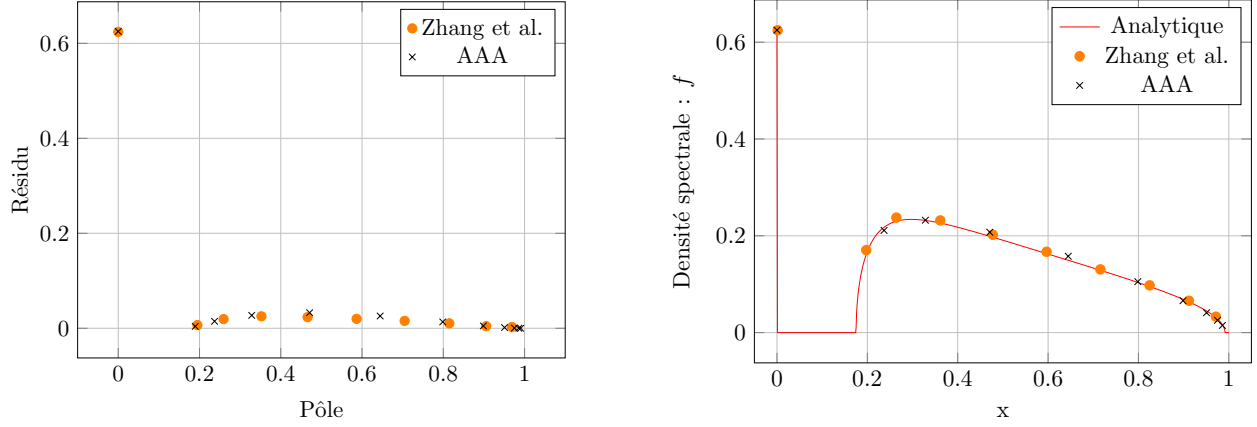


Figure 2 : Pôles et résidus à gauche et densité spectrale à droite dans le cas  $c = 75\%$ .

## 4 Application à des céramiques de dioxyde d'uranium ( $\text{UO}_2$ )

### 4.1 Microstructures étudiées

La méthodologie détaillée dans la section 2.3 est appliquée à deux microstructures virtuelles nommées  $\mathcal{M}_1$  et  $\mathcal{M}_2$  possédant un réseau poreux localisé aux joints inter-granulats visible en bleu sur la figure 3. Ces microstructures, dont la construction est détaillée dans [11], sont constituées de deux phases correspondant à des céramiques poreuses de dioxyde d'uranium "non standards" où à des CERMETS (céramiques avec additifs métalliques). Visuellement, la microstructure  $\mathcal{M}_2$  possède un réseau poreux plus étendu et interconnecté que  $\mathcal{M}_1$ , qui est un cas limite de percolation.

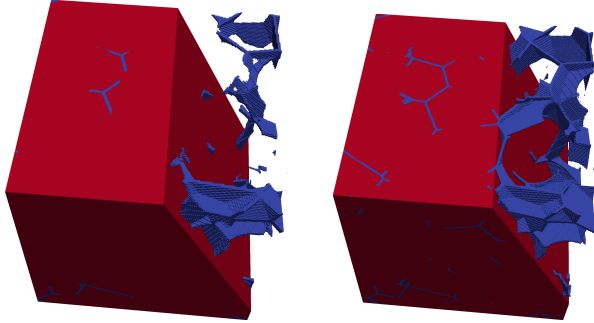


Figure 3 : Image des microstructures  $\mathcal{M}_1$  à gauche et  $\mathcal{M}_2$  à droite obtenues avec [12]. Une coupe laisse apparaître le réseau poreux.

À notre connaissance, il n'existe pas de méthodes analytiques permettant d'estimer la conductivité effective de tels matériaux composites. Les bornes et estimations classiques sont trop éloignées des résultats de calcul FFT sauf à considérer des cas extrêmes correspondant soit à une forte dilution de la phase inclusionnaire ou au contraire le cas de granulats complètement séparés par la phase métallique dans le cas de CERMETS.

### 4.2 Construction des deux fractions rationnelles

Pour les deux microstructures, la conductivité effective  $\tilde{n}_m$  est calculée par FFT pour 16 contrastes  $z$  dans  $[10^{-4}, 10^4]$ . Les couples  $(s, F(s))$  associés à ces calculs sont donnés à AAA qui renvoie des couples  $(p_i, r_i)$ . Le tableau 1 récapitule les éléments caractéristiques des fractions rationnelles (sous la forme de (5)) utilisés pour tracer la conductivité normalisée sur la figure 4.

$\mathcal{M}_1$		$\mathcal{M}_2$	
$a_0 = 14$	$a_\infty = 0$	$a_0 = 1.5$	$a_\infty = 6.1 \times 10^{-3}$
Pôles	Résidus	Pôles	Résidus
$q_1 = -9.0 \times 10^{-2}$	$t_1 = -4.9 \times 10^{-3}$	$q_1 = -1.5 \times 10^{-2}$	$t_1 = -1.6 \times 10^{-3}$
$q_2 = -11$	$t_2 = -0.91$	$q_2 = -7.8 \times 10^{-2}$	$t_2 = -7.4 \times 10^{-3}$
$q_3 = -160$	$t_3 = -70$	$q_3 = -8.6$	$t_3 = -0.67$
$q_4 = -1.2 \times 10^4$	$t_4 = -1.6 \times 10^5$	$q_4 = -98$	$t_4 = -53$

Tableau 1 : Valeurs de  $a_0$ ,  $a_\infty$ , des quatre premiers pôles et résidus des fractions rationnelles trouvées avec la méthode alternative pour  $\mathcal{M}_1$  et  $\mathcal{M}_2$ .

### 4.3 Analyse des approximations trouvées

Les arguments théoriques de [9] montrent que les pôles de la fonction rationnelle qui approxime la conductivité effective sont négatifs et les résidus sont strictement négatifs, ce qui, d'après le tableau 1 est vérifié. La figure 4 présente la conductivité normalisée et sa dérivée obtenue par FFT et par la méthode alternative. Les points oranges sont utilisés pour trouver les résidus et les pôles des approximations tandis que les points de vérifications verts sont calculés *a posteriori*. Les approximations de la conductivité effective sont très proches des points de vérifications, l'écart relatif maximum entre l'approximation et les points de vérification est de 0.10 %.

Disposer d'expressions analytiques et concises de la conductivité thermique effective de ces microstructures est d'un grand intérêt. En plus du comportement effectif, ces expressions permettent pour toute valeur du contraste d'estimer avec précision les statistiques des champs thermiques. Ainsi, on peut estimer les fluctuations par phase du champ d'intensité dans les porosités à partir de la dérivée de la conductivité effective par rapport au contraste (voir [9]) :

$$\langle e(z, \mathbf{x}) \cdot e(z, \mathbf{x}) \rangle_p = \frac{1}{c_p} \tilde{m}'_m(z) \bar{\mathbf{e}} \cdot \bar{\mathbf{e}}, \quad (12)$$

où  $\tilde{m}'_m(z) = \frac{d\tilde{m}_m}{dz}(z)$  et où  $\langle \cdot \rangle_p$  désigne la moyenne spatiale dans la phase  $p$ ,  $\mathbf{e} = -\nabla T$  le champ d'intensité,  $c_p$  la fraction de phase  $p$  et  $\bar{\mathbf{e}}$  le gradient d'intensité macroscopique. Or nous disposons avec les deux fractions rationnelles obtenues dans la section 4.2, d'expressions dérivables sur  $\mathbb{R}^+$  de la conductivité effective pour les deux microstructures considérées. Quelle précision peut-on attendre du calcul de ces dérivées ? Pour répondre à cette question, les dérivées de ces fractions rationnelles sont comparées pour différentes valeurs du contraste aux points obtenus par FFT sur la partie droite de la figure 4. Les points FFT ont été obtenus en calculant par post-traitement la moyenne  $\langle e(z, \mathbf{x}) \cdot e(z, \mathbf{x}) \rangle_p$  du champ d'intensité. Là encore, l'approximation est en très bon accord avec les points de vérification avec un écart relatif maximum de 4.3 %.

Le caractère percolant du réseau  $\mathcal{M}_2$  est matérialisé par une dérivée stationnaire non nulle aux forts contrastes, ce qui n'est pas le cas pour  $\mathcal{M}_1$  dont la dérivée de la conductivité normalisée semble tendre vers 0. Cela laisse penser que le réseau est non percolant, mais l'examen visuel de la connectivité du réseau poreux montre qu'un chemin de percolation existe. Ce chemin étant très étroit (quelques voxels), des contrastes qui nous sont inaccessibles seraient nécessaires pour observer les effets de cette percolation sur la conductivité. Nous considérons alors cette microstructure

comme non percolante et donc  $a_\infty = 0$ , ce qui explique les différences entre les pôles et résidus des deux microstructures. Pour toutes valeurs de contraste  $\tilde{m}'_{m,\mathcal{M}_1}(z) < \tilde{m}'_{m,\mathcal{M}_2}(z)$ , ce qui indique que l'effet du contraste sur le comportement thermique est plus important sur  $\mathcal{M}_2$  que sur  $\mathcal{M}_1$

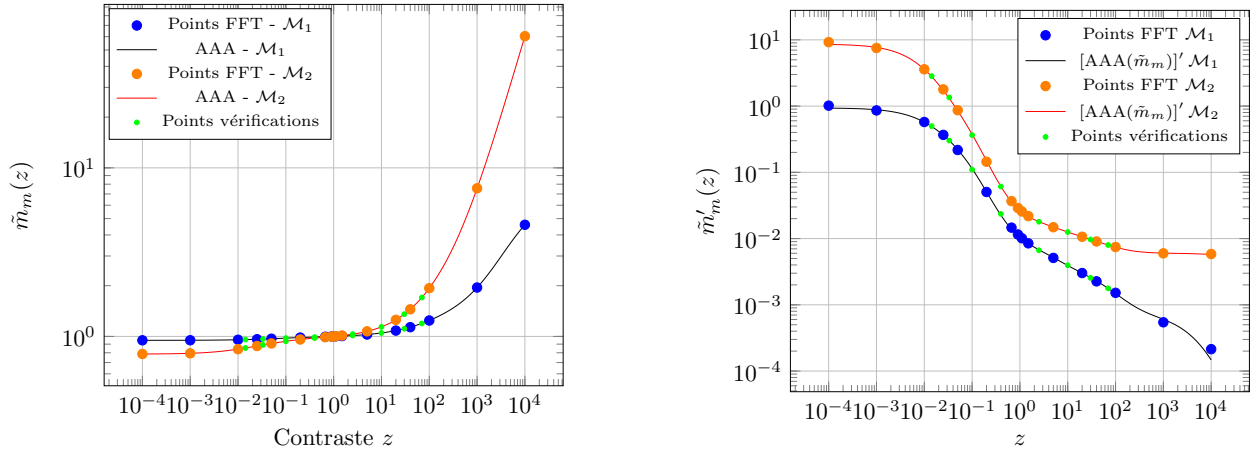


Figure 4 : Conductivité effective normalisée  $\tilde{m}_m$  à gauche et sa dérivée à droite pour  $\mathcal{M}_1$  et  $\mathcal{M}_2$ .

## 5 Conclusion

Dans cette article, nous proposons une méthode pour approcher plusieurs fonctions d'intérêts comme la conductivité thermique effective et la densité spectrale, qui porte l'information sur la microstructure. Connaissant la propriété effective pour plusieurs valeurs de contraste, on cherche à approcher la fonction  $F(s)$  par une fraction rationnelle. La représentation de la conductivité effective par une fraction rationnelle barycentrique couplée à l'utilisation de l'algorithme AAA conduit à un problème de minimisation mieux conditionné que [5] qui permet de trouver les pôles et les résidus de la microstructure. Dans le cas du modèle de Bruggeman où la densité spectrale est connue, cette méthode permet bien de reconstruire cette fonction. Appliquée par la suite à une microstructure 3D, la conductivité effective est reconstruite avec succès tout comme sa dérivée par rapport au contraste, ce qui permet aussi d'estimer les seconds moments par phase des champs.

## Références

- [ 1 ] J. Meynard, Thèse de doct. Aix-Marseille Université, (2019).
- [ 2 ] L. Moutin, Thèse de doct. Aix-Marseille Université, (2023).
- [ 3 ] L. Moutin *et al.*, *Journal of Nuclear Materials*, 599 (2024).
- [ 4 ] K. Golden *et al.*, *Communications in Mathematical Physics*, 90.4 (1983), p. 473-491.
- [ 5 ] D. Zhang *et al.*, *Inverse Problems in Science and Engineering*, 16.4 (2008), p. 425-445.
- [ 6 ] Y. Nakatsukasa *et al.*, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 40.3 (2018), A1494-A1522.
- [ 7 ] D. A. G. Bruggeman, *Annalen der Physik*, 416.7 (1935), p. 636-664.
- [ 8 ] G. W. Milton, *The Theory of Composites*, Milton & Patton Publishing, (2002).
- [ 9 ] D. J. Bergman, *Physics Reports*, 43.9 (1978).
- [ 10 ] D. Zhang *et al.*, *Applied Mathematics and Computation*, 217.17 (2011), p. 7092-7107.
- [ 11 ] L. Moutin *et al.*, *International Journal of Solids and Structures*, 275 (2023), p. 112249.
- [ 12 ] M. Josien, *Journal of Computational Science*, 81 (2024), p. 102359.