

Outils CAO pour le calcul de l'homogénéisation des matériaux composites et des polycristaux.

Vincent François¹, Adrien Couture^{1,2}, Pierre Nadeau¹, Jean-Christophe Cuillière¹, Philippe Pilvin².

1. ERICCA, Université du Québec à Trois-Rivières, Trois Rivières, Canada, francois@uqtr.ca

2. IRDL UMR CNRS 6027, Université de Bretagne sud, Lorient, France

Résumé — Cet article propose une méthodologie pour homogénéiser le comportement de matériaux par simulations numériques. Cette méthode repose sur l'utilisation des différents outils de modélisation intégrés les uns avec les autres. L'utilisation astucieuse de la CAO, des mailleurs adaptatifs éléments finis et d'un solveur éléments finis permet de créer des échantillons virtuels de matériaux et de les simuler de manière complètement automatique pour obtenir une estimation des caractéristiques mécaniques des matériaux. Nous appliquons nos travaux à des matériaux composites à fibres courtes et à des polycristaux.

Mots clefs — Homogénéisation, CAO, simulations numériques

1. Introduction

Depuis plusieurs années, des nouveaux matériaux composites à base de fibres naturelles sont produits afin de remplacer les matériaux composites à base de fibres synthétiques. L'objectif est de réduire l'empreinte écologique. La première chose à vérifier est que les nouveaux composites construits aient minimalement les mêmes propriétés que ceux qu'on utilise déjà. Pour déterminer l'équivalence des propriétés, il y a plusieurs façons. La manière la plus classique est de construire des éprouvettes de ces matériaux et d'effectuer un ensemble de tests mécaniques. Une autre solution est de tenter de le faire virtuellement en utilisant les simulations numériques [1, 2]. L'idée est de reproduire l'ensemble des tests pratiques par des tests numériques. Cet article montre les outils développés pour effectuer des simulations numériques de manière complètement automatique. Nous démontrons que l'utilisation d'une intégration étroite entre CAO et calcul par éléments finis permet de construire automatiquement un grand nombre de modèles numériques optimisés pour la prédiction numérique des propriétés de matériaux.

2. Méthodologie

Pour reproduire numériquement l'expérimentation, il faut construire automatiquement une série d'éprouvettes numériques de forme cubique (figure 1) représentative du matériau à une échelle de distance donnée pour obtenir un Volume Élémentaire Représentatif (VER). Chaque éprouvette constitue un Volume Élémentaire Statistique (VES) [3]. Plus les VES sont de petite taille, plus on doit utiliser un grand nombre de VES pour avoir une distribution statistique représentative du matériau. Sur chaque VES des simulations par éléments finis sont effectuées pour déterminer les propriétés mécaniques et ou thermiques homogénéisées du matériau composite (figure 2)

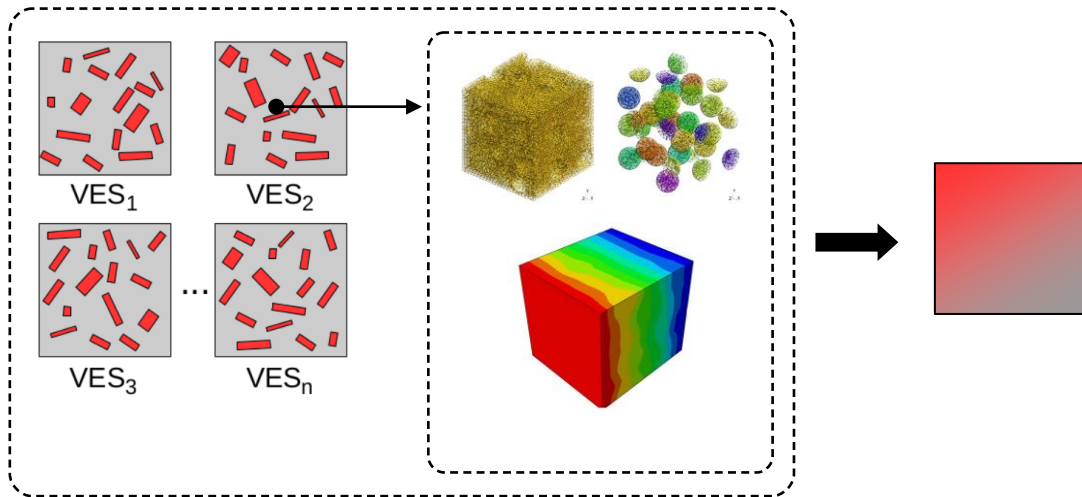


Figure 1 – Série d'échantillons numériques

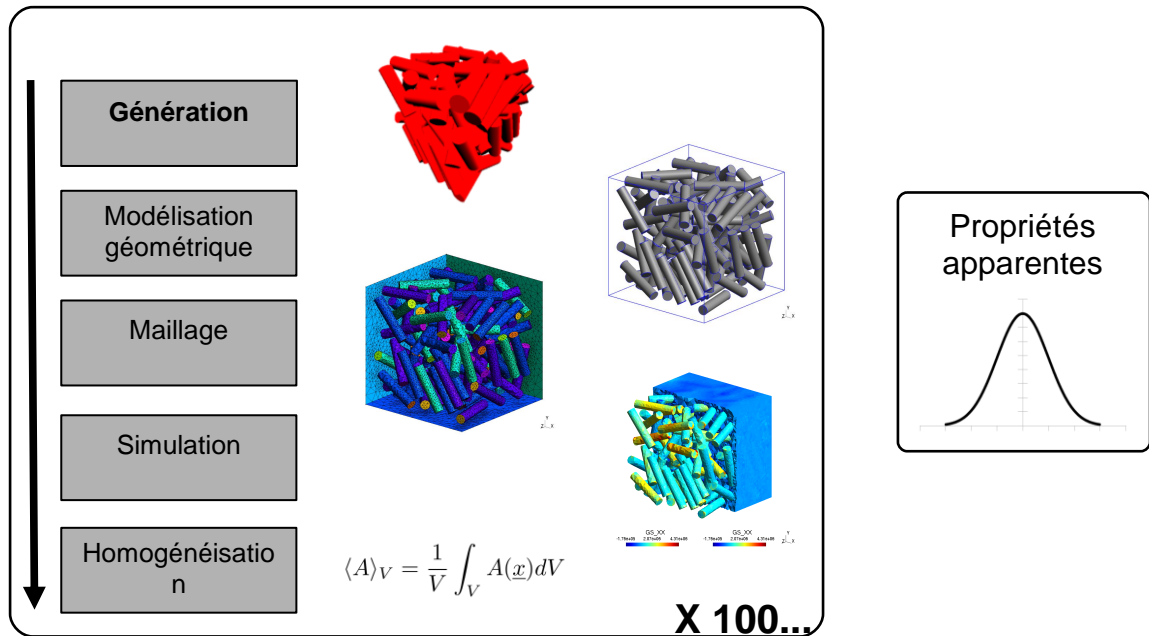


Figure 2 – Calcul d'un VES

L'ensemble du processus est basé sur un modèle de topologie unifiée[4] qui permet d'effectuer des calculs éléments finis en intégrant les données éléments finis et les données CAO. Ainsi il est possible de profiter de la meilleure information possible pour modéliser parfaitement la microstructure du matériau composite. Au niveau pratique, ce modèle de topologie intègre la CAO Opencascade avec le code éléments finis Code Aster (figure 3).

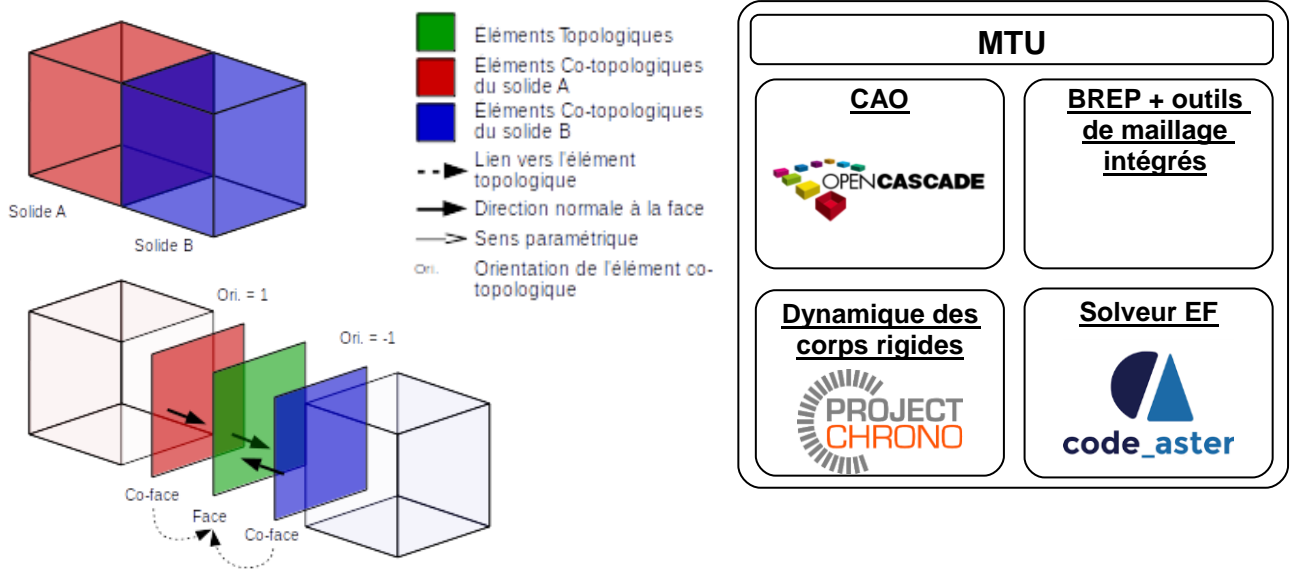


Figure 3 – Modèle de Topologie Unifiée

L'utilisation de ce modèle permet de modéliser la microstructure de manière la plus exacte possible et permet aussi d'adapter le maillage éléments finis a priori afin de construire un modèle numérique le plus précis possible tout en minimisant sa complexité. Ainsi la forme des inclusions du matériau composite peut être modélisée de manière très précises, ce qui ouvre de nouvelles perspectives de recherche dans ce domaine. Trois aspects importants et originaux de notre intégration CAO/Calcul sont utilisés dans ce cadre :

- L'utilisation de la cotopologie[4] assure une interface unique entre les différentes entités CAO et donc entre les différentes particules et la matrice du matériau composite (figure 3).
- L'adaptation de maillage[5] permet d'adapter directement la taille de maille à la densité d'informations géométriques (figure 4)

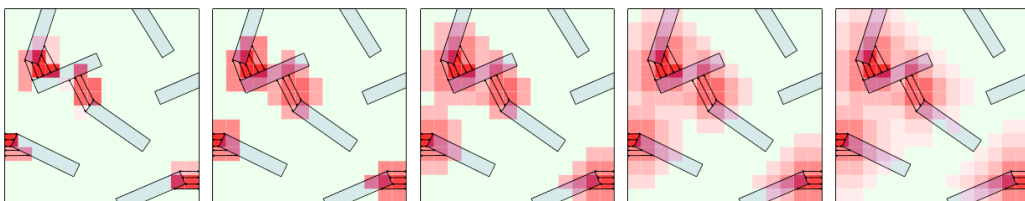


Figure 4 – Taille de maille en fonction de la densité d'informations géométriques

- La quadratisation des mailles éléments finis permet de respecter beaucoup plus précisément la géométrie des inclusions lorsqu'elles comportent des surfaces courbes (figure 5)

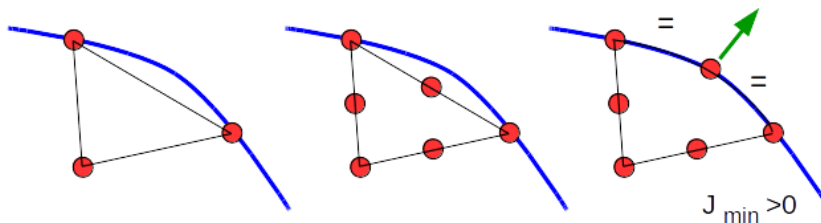


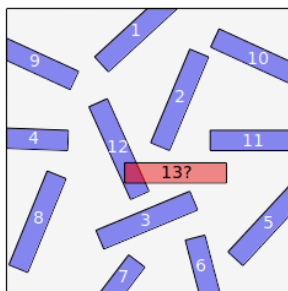
Figure 5 – Quadratisation du maillage avec positionnement du noeud milieu sur la géométrie

3. Application des outils CAO à l'homogénéisation des matériaux composites

Les outils CAO sont utilisés pour générer des formes de fibres les plus réalistes possibles. L'insertion des fibres dans la matrice peut être réalisée de deux manières :

- En utilisant l'algorithme Random Sequential Adsorption (RSA) qui tire aléatoirement l'orientation et la position des fibres de manière séquentielle. Le tirage d'une fibre est éliminé si cette fibre interfère avec une fibre précédemment tirée. Cette approche permet de simuler des composites allant jusqu'à une fraction volumique d'environ 20% de fibres (figure 6)

« Random Sequential Adsorption »
(RSA)



Dynamique des corps rigides (DCR)

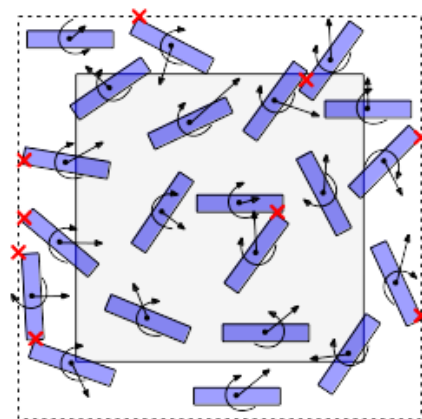


Figure 6 – Répartition des fibres en utilisant les approches RSA et DCR

- En utilisant la dynamique des corps rigides (DCR). Toutes les fibres sont placées aléatoirement en même temps et la position des fibres est ensuite ajustée par un calcul de mouvement de corps

rigides afin que toutes les fibres trouvent leur place. Cette approche permet de simuler des composites allant jusqu'à une fraction volumique d'environ 40% de fibres.

On obtient ainsi un modèle géométrique du matériau (figure 7).

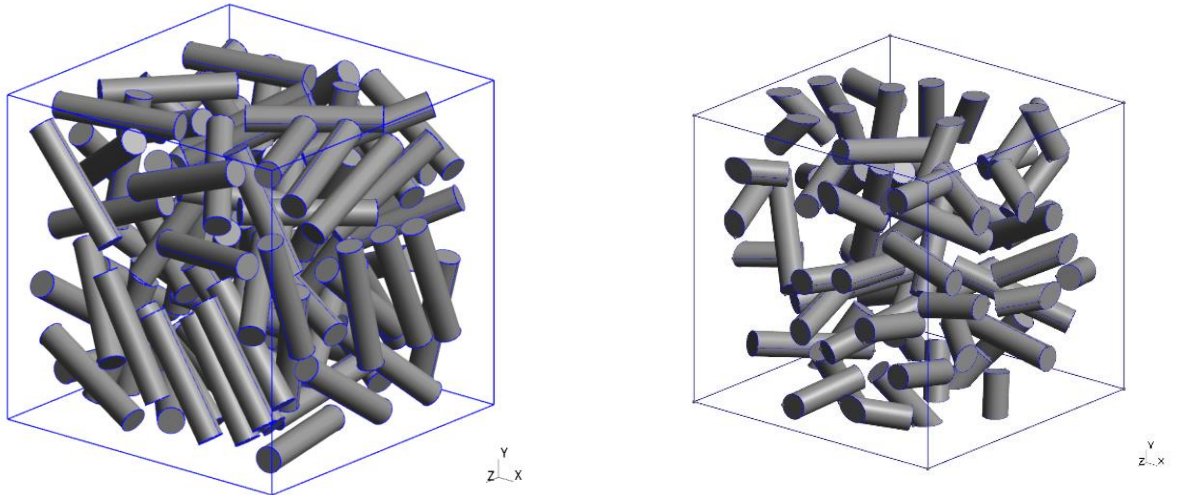


Figure 7 – Modèle géométrique d'un matériau comportant 20% et 10% en volume de fibres cylindriques.

À l'aide des outils de maillage intégré à la CAO de notre modèle de topologie unifiée, nous obtenons le maillage adapté (figure 8). Des calculs éléments finis (figure 8) peuvent ensuite être menés afin de déterminer les caractéristiques du matériau (figure 9).

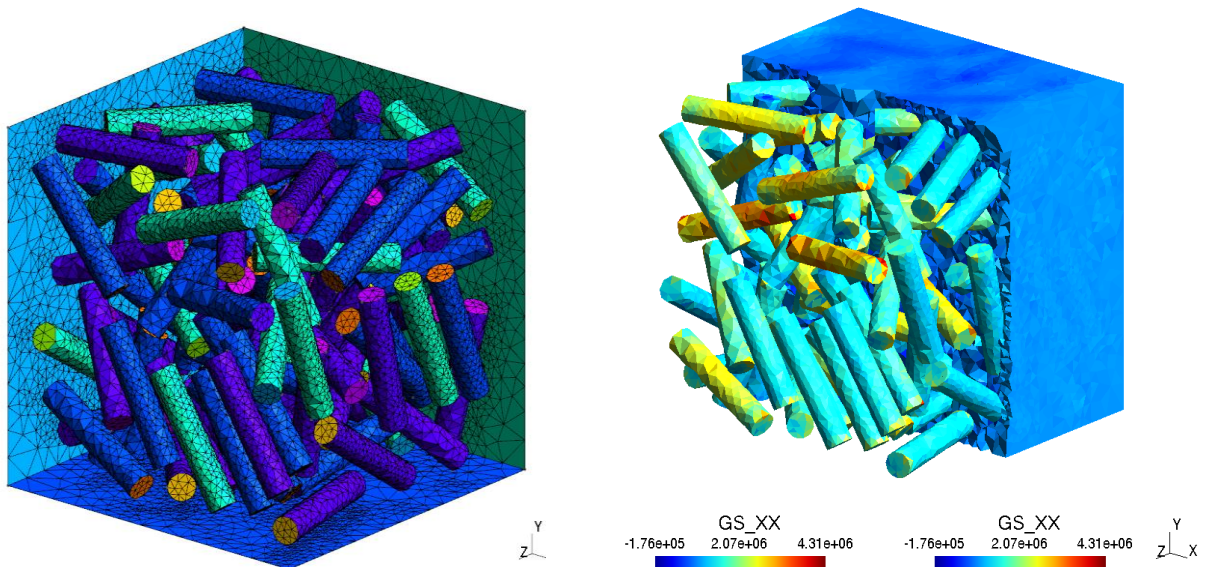


Figure 8 – Maillage et résultat de contraintes d'un matériau comportant 20% en volume de fibres cylindriques.

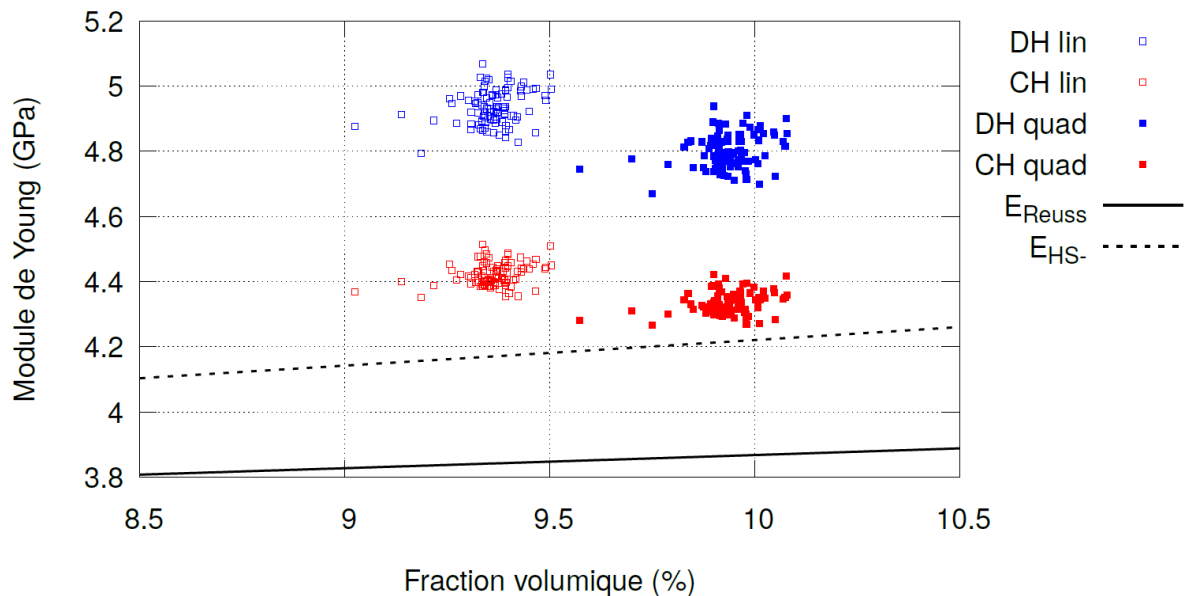


Figure 9 – Calcul du module de Young pour un matériau isotrope comportant 10% en volume de fibres cylindriques. Les simulations ont été faites avec un maillage linéaire ou quadratique. Des conditions aux limites en contraintes homogènes (CH) ou en déformations homogènes (DH) sont utilisées.

4. Application des outils CAO à l'homogénéisation des polycristaux

Les mêmes outils ont été utilisés pour prédire les caractéristiques en élasticité des matériaux polycristallins. Chaque grain est modélisé par un volume CAO pour obtenir une représentation CAO d'un matériau polycristallin. Un ensemble de points est tiré aléatoirement pour simuler la position des germes des cristaux. Les grains sont modélisés en créant une cellule de Voronoi autour de ce germe à l'aide des outils de CAO (figure 10).

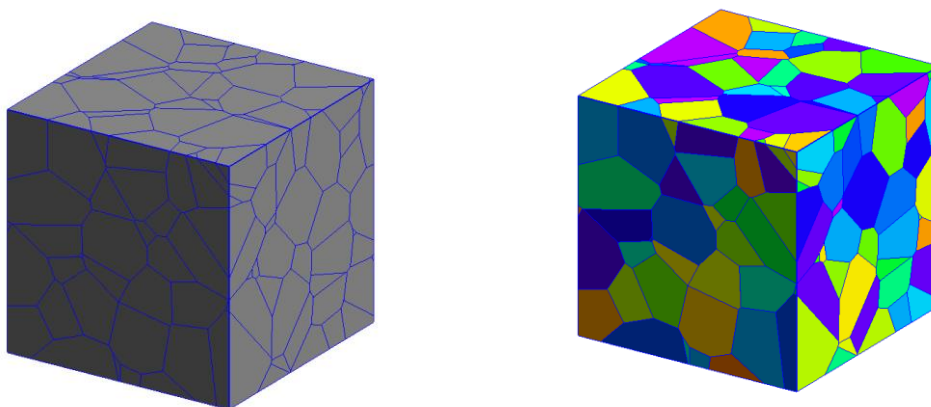


Figure 10 – Modèle géométrique d'un matériau polycristallin.

Le résultat donne un modèle géométrique fidèle à la réalité (figure 11). Les outils de maillage intégrés permettent d'obtenir un maillage adapté de polycristal (figure 12).

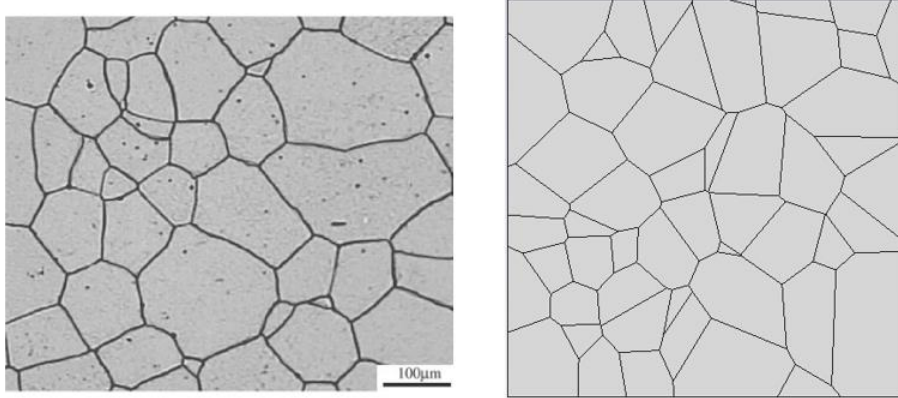


Figure 11 – Coupe d'un matériau polycristallin (ZnO) et coupe d'un modèle CAO du matériau.

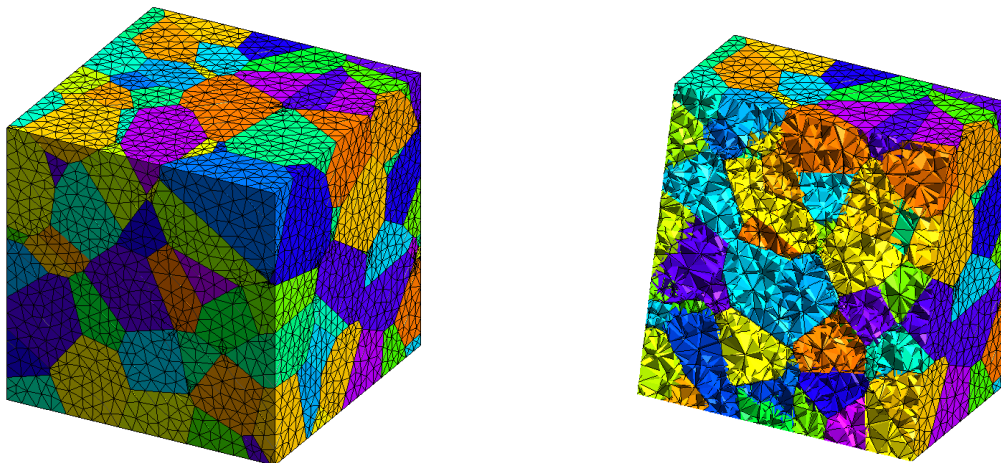


Figure 12 – Maillage d'un matériau polycristallin

De la même manière que pour les matériaux composites, des simulations numériques par éléments finis peuvent être effectuées pour déterminer les propriétés macroscopiques du matériau à partir des caractéristiques anisotropes des cristaux[6]. Nous avons appliqué ce modèle aux matériaux présentant une symétrie cubique pour obtenir les caractéristiques isotropes de plusieurs agrégats de cristaux (figure 13). Les directions d'anisotropie sont également choisies aléatoirement pour chaque cristal.

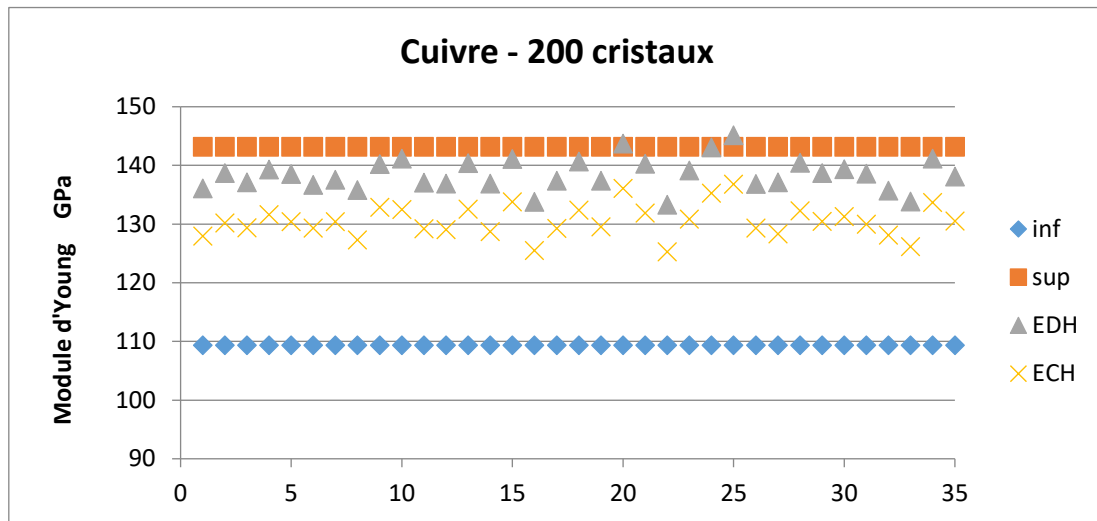


Figure 13 – Homogénéisation en élasticité du cuivre basée sur des agrégats de 200 cristaux. Chaque cristal de symétrie cubique a pour caractéristique anisotrope $E=66.95\text{GPa}$ $G=75.4\text{ GPa}$ et $\nu=0.4185$. Les calculs présentés sont réalisés en déformations homogènes (DH) et en contraintes homogènes (CH). On obtient un module d'Young moyen de 132GPa alors que la valeur estimée par le modèle auto-cohérent est de 130GPa.

5. Conclusion

La puissance des outils CAO permet de construire des modèles de matériaux hétérogènes assez proches de la réalité. L'intégration du calcul par éléments finis permet de simuler ces modèles automatiquement. L'ensemble permet de faire une homogénéisation des propriétés de matériaux de manière virtuelle, ce qui permet de prédire le comportement de ces matériaux en réduisant considérablement le recours à des essais réels.

6. Références

1. Ogierman, W. and G. Kokot, *Generation of the representative volume elements of composite materials with misaligned inclusions*. Composite Structures, 2018. **201**: p. 636-646.
2. Tian, W., et al., *Representative volume element for composites reinforced by spatially randomly distributed discontinuous fibers and its applications*. Composite Structures, 2015. **131**: p. 366-373.
3. Di Paola, F., *Modélisation multi-échelles du comportement thermo-élastique de composites à particules sphériques*. 2010, Ecole Centrale: Paris.
4. Cuillière, J.C. and V. Francois, *Integration of CAD, FEA and topology optimization through a unified topological model*. Computer-Aided Design and Applications, 2014. **11**(5): p. 1-15.
5. Cuillière, J.C. and V. Francois, *Towards quantitative mesh pre-optimization for finite element analysis*. Computer-Aided Design and Applications, 2017. **14**(4): p. 392-407.
6. DeWit, R., *Elastic constants and thermal expansion averages of a nontextured polycrystal*. Journal of Mechanics of Materials and Structures, 2008. **3**(2): p. 195-212.