

Simulation du comportement thermo-élastique et de l'endommagement induit par le différentiel de dilatation thermique dans un milieu continu hétérogène par la MED

G. Alhajj Hassan, W. Leclerc, C. Pélegris, M. Guessasma, E. Bellenger

Université de Picardie Jules Verne, équipe MIM, LTI-EA3899, 02315 Saint-Quentin

Résumé — Le présent papier propose de valider le modèle cohésif de type poutre, qui permet de simuler un milieu continu par la méthode des éléments discrets, dans le cadre de l'étude du comportement thermo-élastique de matériaux homogènes et hétérogènes. Dans ce but, des simulations sont réalisées via un modèle de dilatation thermique introduit au niveau du lien cohésif, et l'endommagement induit par le différentiel de dilatation est également étudié via un critère de rupture appliqué à l'échelle de la particule.

Mots clés — méthode des éléments discrets, comportement thermo-élastique, matériaux hétérogènes, endommagement, critère de rupture.

1 Introduction

Le travail est réalisé dans le cadre du projet de recherche CUBISM qui s'inscrit dans le programme de coopération transfrontalière INTERREG V France-Wallonie-Vlaanderen. Le projet a pour but de développer des capteurs d'humidité et de pression pour suivre le séchage de bétons réfractaires. Ces capteurs seront coulés dans le béton, ce qui nécessite qu'ils soient encapsulés pour résister aux conditions de séchage tout en permettant de faire des mesures. L'objectif de notre travail est d'étudier numériquement le comportement multi-physique par la Méthode des Éléments Discrets (MED) du matériau utilisé dans la fabrication de l'encapsulation du capteur de pression, pour des températures montant à près de 500°C et une pression jusqu'à 60 bars.

L'approche discrète est utilisée aujourd'hui dans de nombreux domaines, comme la géologie [1], le génie civil [2, 3] et les milieux granulaires en général. De plus, la MED a permis d'extraire une information électrique du roulement, corrélée à son état mécanique, en dynamique [4] et de décrire les phénomènes thermiques dans un milieu malgré des discontinuités [5].

La modélisation discrète a aussi été développée pour les problèmes de matériaux continus. Récemment, elle a été appliquée dans l'étude de l'endommagement des matériaux hétérogènes comme les roches [6] et les bétons [7] et également celui des matériaux homogènes comme les céramiques [8]. Dans ces études, le matériau est modélisé par un ensemble d'éléments discrets en interaction, où la cohésion du milieu est assurée par l'intermédiaire d'interactions bilatérales entre éléments discrets. Un modèle hybride lattice-particulaire utilisant un lien cohésif de type poutre [5, 9] est développé au sein de l'équipe Mécanique et Ingénierie des Matériaux (MIM) du Laboratoire des Technologies Innovantes (LTI). Il permet de simuler un milieu continu en utilisant des empilements granulaires générés par l'algorithme de Lubachevsky-Stillinger [10]. Dans cette approche, un milieu discret caractérise un matériau continu effectif, dont les paramètres mécaniques macroscopiques sont identifiés à partir des paramètres microscopiques utilisés dans la modélisation. Le code MULTICOR3D++ développé au sein du LTI, étudie les milieux continus via le modèle hybride lattice-particulaire, où le milieu discret est composé de particules de forme sphérique et les liens cohésifs sont des poutres de type Euler-Bernoulli reliant les particules en contact.

L'organisation du travail est comme suit. Le modèle cohésif de type poutre est présenté, et une étude de validation du modèle est décrite dans la section suivante. Ensuite, nous avons mis en oeuvre un modèle de dilatation thermique pour simuler le comportement thermo-mécanique d'un milieu continu homogène, et également celui d'un milieu hétérogène. De plus, nous avons introduit un critère de rupture afin d'étudier la fissuration induite par le différentiel de dilatation thermique, dans le cas du milieu continu hétérogène.

2 Modèle de liaison cohésive de type poutre

Le modèle cohésif 3D de type poutre (FIG. 1) proposé par Leclerc [9] diffère de celui développé par André [11] par le couplage des termes des efforts tangentiels et de flexion dans la matrice de rigidité de la poutre. Dans ce modèle hybride, chaque poutre possède ses propres caractéristiques : une longueur L_μ , un module de Young E_μ , un module de cisaillement G_μ , une section droite A_μ et un moment d'inertie I_μ . La section droite et le moment quadratique de la poutre reliant deux éléments discrets de rayons R_i et R_j , peuvent être exprimés en fonction du rayon adimensionné de la poutre r_μ comme ci-après :

$$A_\mu = \pi \frac{r_\mu^2}{4} (R_i + R_j)^2 \quad I_\mu = \pi \frac{r_\mu^4}{64} (R_i + R_j)^4 \quad (1)$$

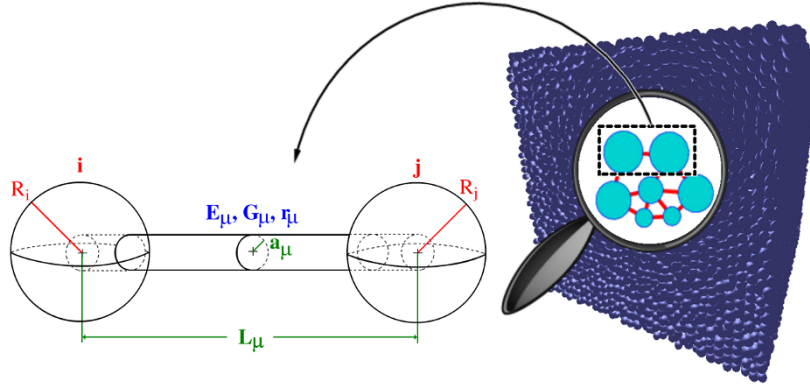


FIGURE 1 – Liaison cohésive de type poutre au sein d'un domaine discret

Les expressions des efforts locaux sont données par la théorie des poutres d'Euler-Bernoulli [12] où la traction, la flexion et la torsion sont prises en compte. Le système ci-après (2) permet de calculer les interactions entre deux particules i et j , exprimées dans le repère local $(\vec{n}, \vec{t}, \vec{b})$ associé à chaque contact :

$$\begin{bmatrix} F_n^{j \rightarrow i} \\ F_t^{j \rightarrow i} \\ F_b^{j \rightarrow i} \\ M_n^{j \rightarrow i} \\ M_t^{j \rightarrow i} \\ M_b^{j \rightarrow i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_n & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k_t & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{k_t L_\mu}{2} & \frac{k_t L_\mu}{2} \\ 0 & 0 & k_t & 0 & -\frac{k_t L_\mu}{2} & -\frac{k_t L_\mu}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_n & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{k_t L_\mu}{2} & 0 & \frac{k_t L_\mu^2}{3} & \frac{k_t L_\mu^2}{6} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{k_t L_\mu}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{k_t L_\mu^2}{3} & \frac{k_t L_\mu^2}{6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_n^i - u_n^j \\ u_t^i - u_t^j \\ u_b^i - u_b^j \\ \theta_n^i - \theta_n^j \\ \theta_t^i \\ \theta_t^j \\ \theta_b^i \\ \theta_b^j \end{bmatrix} \quad (2)$$

avec

- \vec{n} le vecteur normal suivant la direction de la poutre, \vec{t} et \vec{b} deux vecteurs tangents au plan de contact,
- $\vec{F}^{j \rightarrow i} (F_n, F_t, F_b)$, $\vec{M}^{j \rightarrow i} (M_n, M_t, M_b)$ les forces et les moments d'interaction exercés par l'élément j sur l'élément i exprimés dans le repère local $(\vec{n}, \vec{t}, \vec{b})$,
- $u_n^{i,j}$ et $u_{t,b}^{i,j}$ respectivement les déplacements normaux et tangentiels associés aux particules i et j ,
- $\theta_n^{i,j}$ et $\theta_{t,b}^{i,j}$ les composantes de rotation respectivement en torsion et en flexion associées aux éléments i et j ,
- k_n, k_t les raideurs classiques normale et tangentielle, et S_n un paramètre associé à la torsion :

$$k_n = \frac{E_\mu A_\mu}{L_\mu} \quad k_t = \frac{12 E_\mu I_\mu}{L_\mu^3} \quad S_n = \frac{2 G_\mu I_\mu}{L_\mu} \quad (3)$$

La procédure présentée par Leclerc [9], a permis d'identifier les propriétés macroscopiques d'un échantillon en réalisant un essai de traction sur un domaine discret de forme cubique. Un processus de

calibration a été mis en œuvre pour identifier les paramètres locaux (E_μ et r_μ) qui correspondent aux propriétés du matériau étudié. D'après ses travaux, le nombre minimal d'éléments discrets requis pour représenter un milieu homogène continu à l'aide d'un élément représentatif cubique est de 700 000 particules.

3 Validation du modèle

Dans l'objectif d'étudier la validité du modèle cohésif de type poutre, plusieurs essais mécaniques numériques ont été réalisés sur un empilement granulaire de forme cubique composé de 700 000 éléments discrets. Dans un premier temps, des essais de traction et de torsion ont été effectués sur des échantillons numériques en imposant des déplacements sur les particules des parois, avec des conditions aux limites de symétrie périodiques (FIG. 2). La réaction sur la face opposée au chargement, en force (FIG. 3(a)) ou en moment (FIG. 3(b)), et l'énergie de déformation totale de l'échantillon (FIG. 3(c)) sont calculées au cours du temps pour vérifier le principe d'action-réaction et la conservation d'énergie du système. Le temps est représenté par le nombre d'itérations imposé par le schéma de discrétisation temporel. On définit l'énergie macroscopique par l'énergie imposée à l'échantillon, et l'énergie microscopique par la somme des énergies engendrées par tous les contacts.

Dans un second temps, nous avons réalisé des essais de traction, de torsion et de flexion, en appliquant des forces ou des moments sur deux faces opposées de l'échantillon modélisé. Afin de mieux visualiser les champs de déplacement des éléments discrets, des portions du domaine cubique ont été extraites. La figure (4) illustre les champs de déplacement pour ces trois essais sur les portions extraites de l'empilement cubique initial.

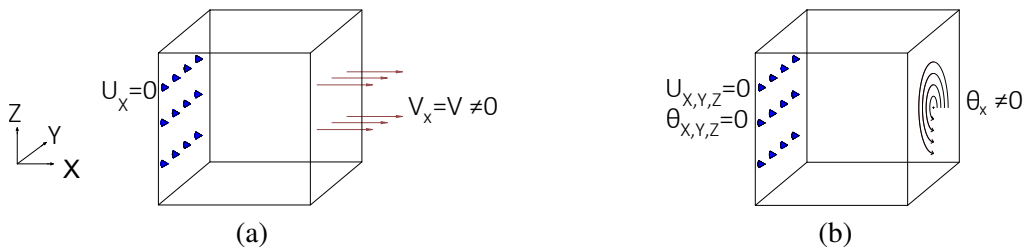


FIGURE 2 – Volume élémentaire représentatif avec les conditions aux limites pour réaliser l'essai de (a) traction et (b) torsion

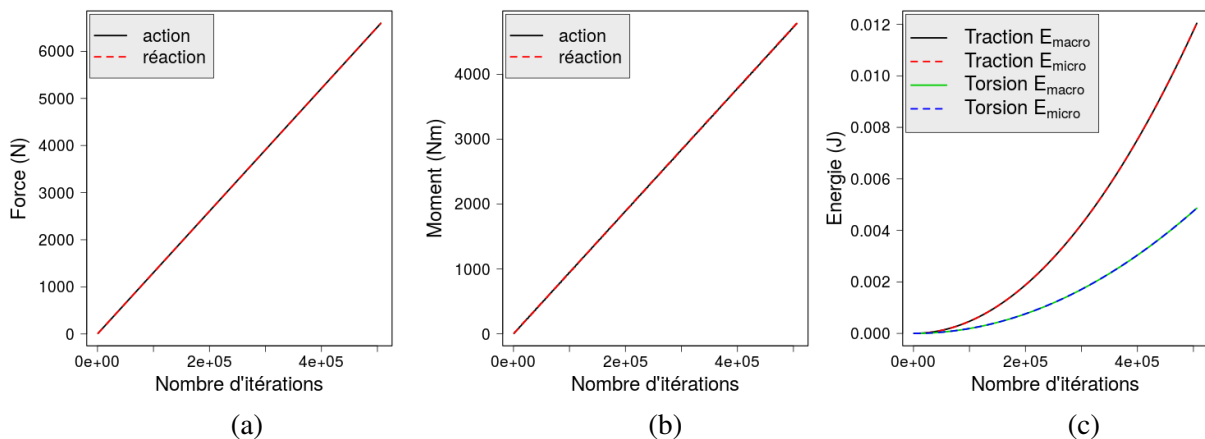


FIGURE 3 – Variation de la réaction (a) en force, (b) en moment (c) et des énergies, en fonction du nombre d'itérations durant les essais de traction et de torsion

4 Comportement thermo-élastique d'un milieu continu homogène

4.1 Modèle de dilatation thermique

Dans le but d'étudier le comportement thermo-mécanique des matériaux continus, la dilatation thermique linéaire est prise en compte dans la modélisation discrète en se basant sur un modèle de dilatation

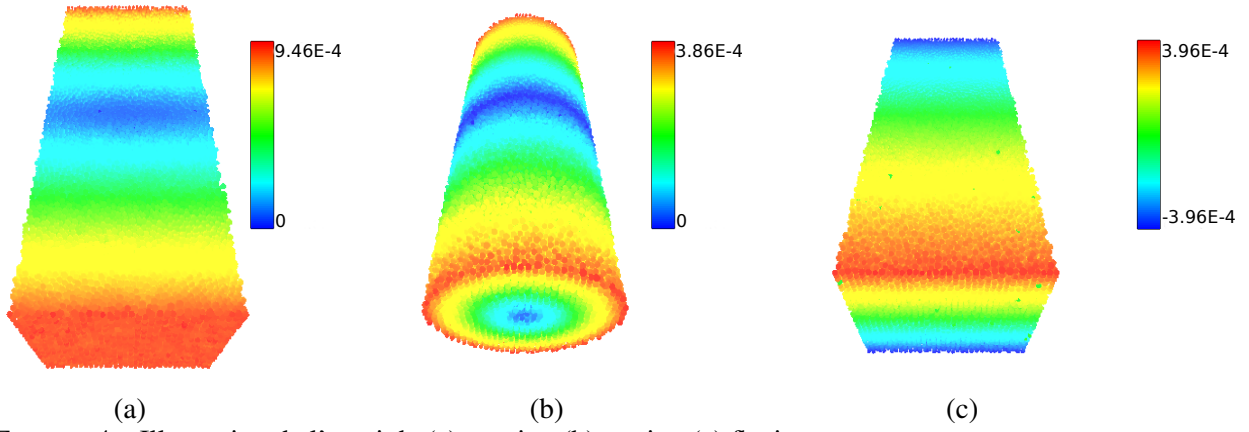


FIGURE 4 – Illustration de l’essai de (a) traction (b) torsion (c) flexion

(a) et (b) Le code couleur correspond à l’intensité des vecteurs déplacements des éléments discrets (m)
(c) Le code couleur correspond au vecteur déplacement longitudinal des éléments discrets (m)

tiré de la littérature et utilisé récemment par André [13] et Leclerc [14]. Dans cette étude, le lien cohésif change de longueur en fonction de la température. Il subit une extension dans le cas d’une augmentation de la température du matériau et une contraction dans le cas de sa diminution (FIG. 5), selon l’équation suivante :

$$l(T) = l^{initiale} (1 + \Delta T \times \alpha) \quad (4)$$

avec

- $l^{initiale}$ la longueur de la poutre cohésive à la température initiale T_0
- $l(T)$ la longueur de la poutre cohésive à la température T
- ΔT la variation de température
- α le coefficient de dilatation thermique

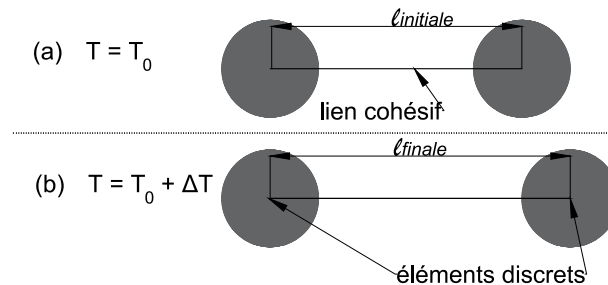


FIGURE 5 – Modèle de dilatation thermique

4.2 Étude des paramètres

Dans cette étude, un échantillon de silice de forme cubique composé de 700 000 éléments discrets (ED) a été généré avec un module de Young macroscopique $E_M = 71$ GPa, un coefficient de Poisson $\nu_M = 0.15$ et un coefficient de dilatation microscopique $\alpha_\mu = 2.25 \times 10^{-5} K^{-1}$ associé aux liens cohésifs. Pour information, ces propriétés macroscopiques correspondent à des paramètres locaux $E_\mu = 220$ GPa et $\nu_\mu = 0.722$. Un chargement thermique (FIG. 6(a)) est imposé à ce milieu homogène, avec des conditions aux limites de symétrie. Ensuite, les coefficients de dilatation macroscopiques α_x , α_y et α_z du domaine discret ont été déterminés dans les trois directions x , y et z , à travers les déplacements des faces libres de l’échantillon. A partir de la figure 6(b), on peut tirer deux conclusions importantes. D’abord, le coefficient de dilatation macroscopique est indépendant de la direction considérée, ce qui vérifie l’isotropie du système. De plus, le coefficient de dilatation macroscopique converge vers celui associé au lien cohésif, donc, le processus de calibration pour la dilatation thermique paraît inutile.

A des fins de comparaison, la même étude a été réalisée par la Méthode des Eléments Finis (MEF), avec les mêmes propriétés du matériau, et le même pas de temps $dt = 1.3e^{-5}$ s. Les figures 7(a) et

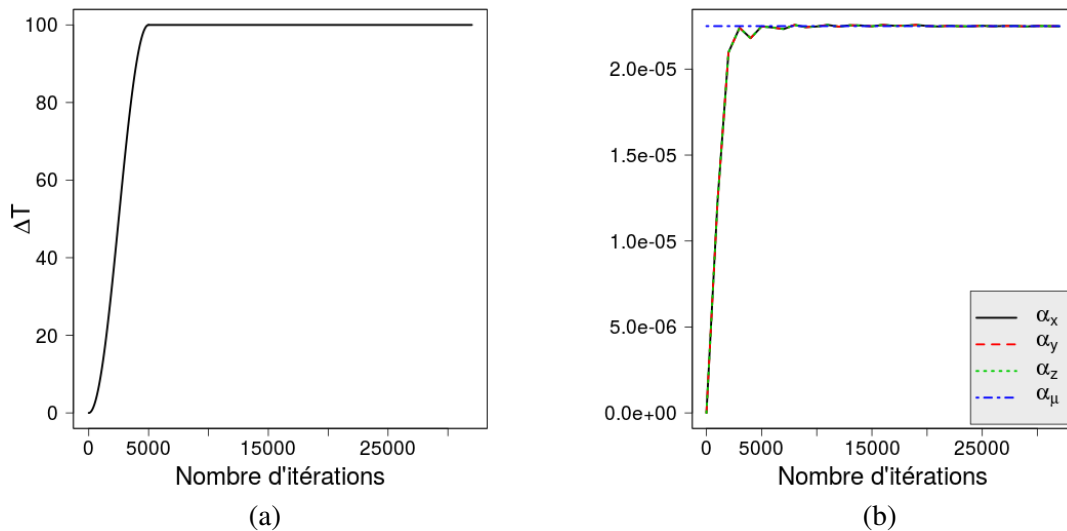


FIGURE 6 – Variation (a) de la température et (b) des coefficients de dilatation thermique macroscopiques en fonction du nombre d'itérations

7(b) montrent l'évolution du déplacement des particules d'une face libre, et de la réaction de la face opposée où les conditions de symétrie ont été imposées, en fonction du nombre d'itérations, dans les deux approches.

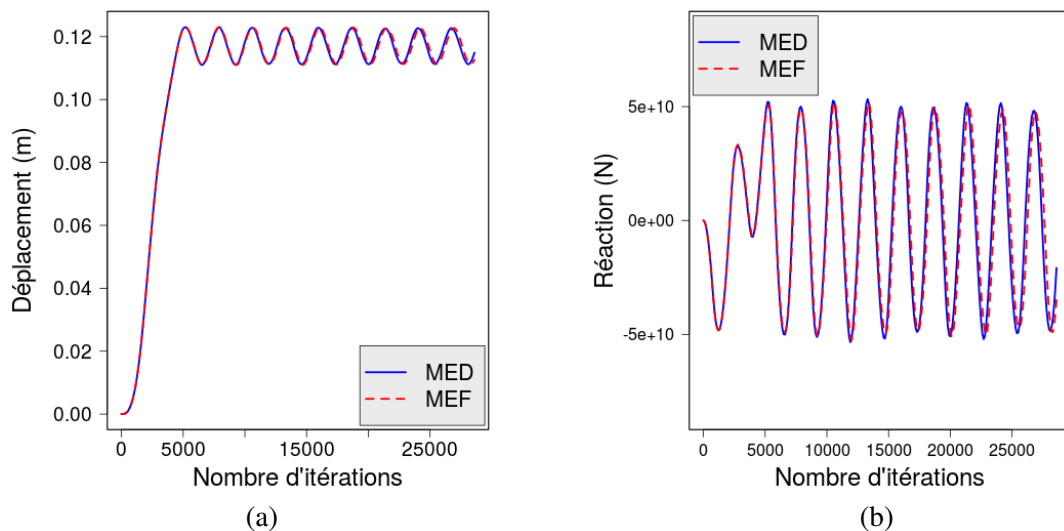


FIGURE 7 – Variation (a) du déplacement de la face libre et (b) de la réaction de la face opposée en fonction du nombre d'itérations

5 Application au cadre d'un milieu continu hétérogène

5.1 Coefficient de dilatation thermique effectif

Afin de vérifier le modèle de dilatation thermique en modélisation discrète dans le cas d'un milieu hétérogène, un domaine cubique de 2 000 000 ED d'arête L composé d'une matrice d'alumine ($E_m = 350$ GPa, $\nu_m = 0.22$, densité $\rho_m = 3900 \text{ kg/m}^3$) et d'une inclusion métallique de forme sphérique ($E_i = 69$ GPa, $\nu_i = 0.28$, densité $\rho_i = 2700 \text{ kg/m}^3$), a été modélisé (FIG. 8) avec des conditions aux limites de symétrie. L'inclusion a une fraction volumique $f_v = 6.5\%$ pour un rayon $R = L/4$. Pour une variation du contraste c_α entre le coefficient de dilatation de l'inclusion α_i et celui de la matrice α_m , le coefficient effectif du composite α_e est calculé via l'approche analytique d'Hashin-Shtrikman basée sur la formule de Levin [15] et par les méthodes numériques MED et MEF. Les figures 9(a) et 9(b) montrent les coefficients effectifs en variant c_α entre 1/100 et 100. Pour information, l'erreur relative entre la MED et la MEF est au plus de 2% pour $c_\alpha = 100$.

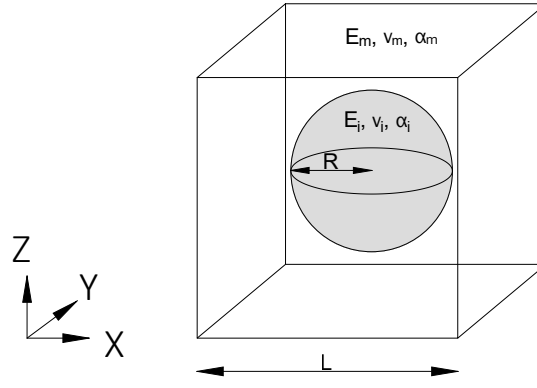


FIGURE 8 – Domaine cubique d’arête L avec une inclusion sphérique

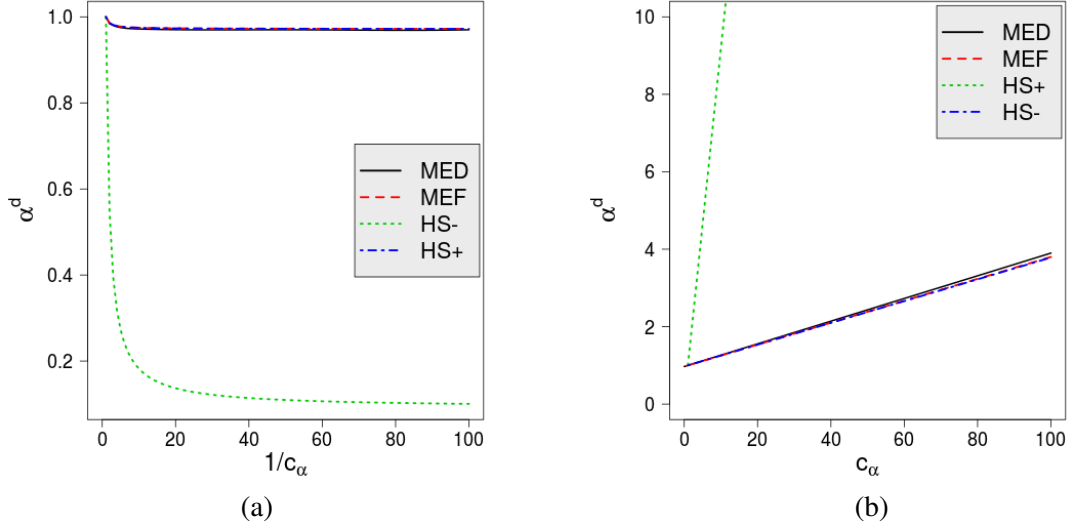


FIGURE 9 – Coefficient effectif du composite en fonction du contraste c_α avec $\alpha^d = \frac{\alpha_e}{\alpha_m}$ (a) cas $c_\alpha < 1$ (b) cas $c_\alpha > 1$

5.2 Champs de contraintes

Dans cette section, nous cherchons à déterminer les champs de contraintes par la MED dans le cas du composite sous une variation de température $\Delta T = 10 K$ et à confronter les résultats numériques de la MED à ceux de la MEF. Dans cette étude, les conditions aux limites de symétrie sont imposées et le contraste c_α entre les coefficients de dilatation thermique de la matrice et de l’inclusion est fixé à 3, avec $\alpha_m = 7.5 \times 10^{-6} K^{-1}$ et $\alpha_i = 2.25 \times 10^{-5} K^{-1}$. La formule donnée par Zhou [16] est utilisée pour calculer le tenseur des contraintes à l’échelle de la particule i :

$$\bar{\bar{\sigma}}_i = \frac{1}{2\Omega_i} \left(\frac{1}{2} \sum_j r_{ij} \otimes f_{ij} + f_{ij} \otimes r_{ij} \right) \quad (5)$$

où $\bar{\bar{\sigma}}_i$ est le tenseur des contraintes de l’ED i , Ω_i représente le volume de l’ED i , f_{ij} est la force exercée sur l’ED i par l’ED j à travers le lien cohésif, et r_{ij} représente le vecteur de position relative entre les deux ED i et j . Veuillez noter que la symétrie du tenseur est imposée par le double produit vectoriel entre la force et la position relative. La figure (10) illustre la contrainte hydrostatique dans le plan $y = L/2$, où le résultat de la MED représente une variabilité de la contrainte à l’échelle locale. Dans le but de confronter la MED à la MEF, des indicateurs ont été placés aux positions A(0.5L;0.5L;0.875L), B(0.5L;0.5L;0.5L) et C(0.875L;0.5L;0.875L) (voir Tab. 1).

5.3 Fissuration induite

Afin de simuler la fissuration du milieu hétérogène, le critère de rupture RDEF (Removed Discrete Element Failure) est introduit au niveau des particules. Ce dernier a permis, dans certains types de pro-

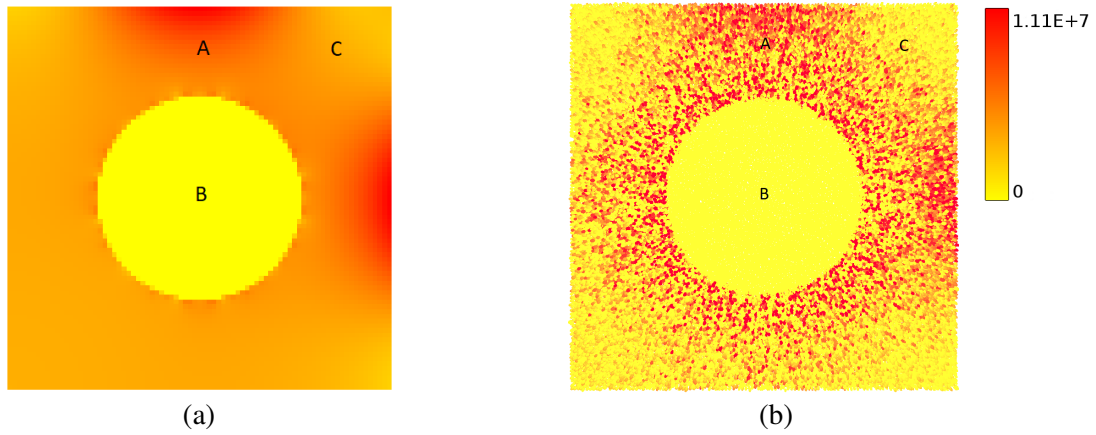


FIGURE 10 – Contrainte hydrostatique (Pa) par les deux approches (a) MEF (b) MED, où la valeur maximale de l'échelle des isovaleurs est celle calculée par la MEF

TABLE 1 – Contrainte hydrostatique aux positions A, B et C par la MED et la MEF

		position A	position B	position C
σ_{hydro} (MPa)	MED	8.3	-57.5	3.7
	MEF	6.5	-53.3	3.7

blèmes [13] de trouver le motif de fissuration, là où le critère de Rankine ne le permettait pas. Le critère RDEF consiste à enlever la particule et à casser tous ses liens lorsqu'une certaine contrainte limite est atteinte. Les particules enlevées sont exclues du modèle et n'agissent plus sur le système, ce qui aboutit à une perte de masse. Cependant, cette perte n'affecte pas la modélisation du processus d'endommagement du fait qu'elle est très faible par rapport à la masse totale du système. Dans cette étude, on considère la rupture fragile de matériaux tels que l'alumine et la silice. Due à leur résistance élevée en compression, la rupture apparaît lorsque ces matériaux sont sollicités en traction. C'est pourquoi, le choix du critère de rupture est basé sur la contrainte hydrostatique, à l'échelle de la particule, qui est positive pour des sollicitations locales en traction. La contrainte hydrostatique limite est telle que $\sigma_{limite} = 200$ MPa. La figure (11) illustre l'application de cette méthode pour un problème de rupture du composite sous un chargement thermique linéaire dont la variation de température est positive ($\Delta T > 0$), dans un état du système libre sans aucune condition aux limites sur les particules des parois. La fissuration s'initie à l'interface et se propage dans la matrice radialement, ce qui est en accord avec les attentes théoriques [17].

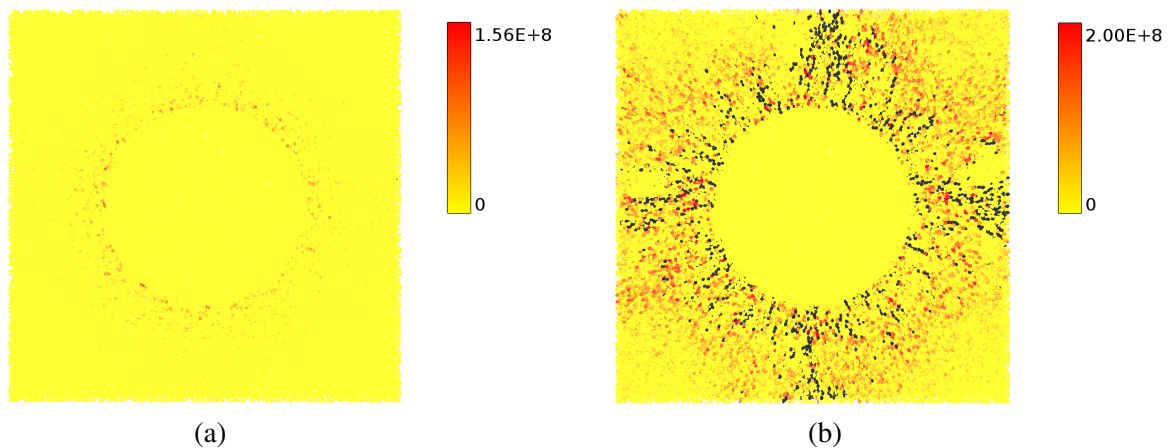


FIGURE 11 – Contrainte hydrostatique (Pa) (a) avant et (b) après fissuration (b) La couleur noire correspond aux particules enlevées du système

6 Conclusion et perspective

Le modèle de lien cohésif a été validé dans le cadre de l'étude du comportement de milieux continus par comparaison avec l'approche analytique et la méthode des éléments finis. Il a également permis de retrouver le motif de fissuration induite par un chargement thermique sur un modèle académique de milieu continu hétérogène. Nous travaillons actuellement sur l'implémentation d'un modèle hydrique dans l'optique de pouvoir prendre en compte le couplage thermo-hydro-mécanique dans notre simulation, et ainsi intégrer l'influence conjuguée des transferts thermique et de masse sur la durabilité mécanique de milieux continus homogène et hétérogène.

Références

- [1] I. Sanni, E. Bellenger, J. Fortin, and P. Coorevits. A reliable algorithm to solve 3d frictional multi-contact problems : Application to granular media. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, (4) :1161 – 1171, 2010.
- [2] I-W. Chen. Grain boundary kinetics in oxide ceramics with the cubic fluorite crystal structure and its derivatives. *Interface Science*, 8(2) :147–156, 2000.
- [3] P. Pizette, C.L. Martin, G. Delette, P. Sornay, and F. Sans. Compaction of aggregated ceramic powders : From contact laws to fracture and yield surfaces. *Powder Technology*, 198(2) :240 – 250, 2010.
- [4] C. Machado, M. Guessasma, and V. Bourny. Electromechanical prediction of the regime of lubrication in ball bearings using discrete element method. *Tribology International*, 127 :69 – 83, 2018.
- [5] H. Haddad. *Modélisation du comportement thermomécanique de l'interface de contact par une approche couplée MED-MEF*. Thèse de l'UPJV, 2013.
- [6] A. Bobet, A. Fakhimi, S. Johnson, J. Morris, F. Tonon, and M. Ronald Yeung. Numerical models in discontinuous media : Review of advances for rock mechanics applications. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 135(11) :1547–1561, 2009.
- [7] S. Hentz, F. V. Donzé, and L. Daudeville. Discrete element modelling of concrete submitted to dynamic loading at high strain rates. *Computers & Structures*, 82(29) :2509 – 2524, 2004.
- [8] Y. Tan, D. Yang, and Y. Sheng. Discrete element method modeling of fracture and damage in the machining process of polycrystalline sic. *Journal of the European Ceramic Society*, 29(6) :1029 – 1037, 2009.
- [9] W. Leclerc. Discrete element method to simulate the elastic behavior of 3d heterogeneous continuous media. *International Journal of Solids and Structures*, 121 :86 – 102, 2017.
- [10] B. D. Lubachevsky and F. H. Stillinger. Geometric properties of random disk packings. *Journal of Statistical Physics*, 60(5) :561–583, 1990.
- [11] D. André, I. Iordanoff, J. L. Charles, and J. Néauport. Discrete element method to simulate continuous material by using the cohesive beam model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 213-216 :113 – 125, 2012.
- [12] J. S. Przemieniecki. *Theory of Matrix Structural Analysis*. McGraw-Hill, 1968.
- [13] D. André, B. Levraut, N. Tessier-Doyen, and M. Huger. A discrete element thermo-mechanical modelling of diffuse damage induced by thermal expansion mismatch of two-phase materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 318 :898 – 916, 2017.
- [14] W. Leclerc, H. Haddad, and M. Guessasma. On a discrete element method to simulate thermal-induced damage in 2d composite materials. *Computers & Structures*, 196 :277 – 291, 2018.
- [15] V.M. Levin. *Thermal Expansion Coefficients of Heterogeneous Materials*. 1992.
- [16] M. Zhou. A new look at the atomic level virial stress : on continuum-molecular system equivalence. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 459(2037) :2347–2392, 2003.
- [17] G. Briche, N. Tessier-Doyen, M. Huger, and T. Chotard. Investigation of the damage behaviour of refractory model materials at high temperature by combined pulse echography and acoustic emission techniques. *Journal of the European Ceramic Society*, 28(15) :2835 – 2843, 2008.