

Modélisation de l'effet de taille dans les nanocomposites par la méthode EFEM (Embedded Finite Element Method)

D.P. Bach¹, D. Brancherie¹, L. Cauvin¹,

¹ Laboratoire Roberval, Université de technologie de Compiègne, {dang-phong.bach,delphine.brancherie,ludovic.cauvin}@utc.fr

Résumé — Avec l'utilisation croissante des nanocomposites, la nécessité de développer des procédures de modélisation efficaces apparaît. Les modélisations issues de la mécanique des milieux continus introduisent cet effet de taille par la prise en compte d'une élasticité de surface à l'interface entre les nano-inclusions et la matrice. Afin de contourner les limites en termes de géométrie des inclusions associées aux modélisations analytiques, nous proposons ici une stratégie numérique basée sur la méthode Embedded FEM pour prédire le comportement mécanique des matériaux nano-renforcés, y compris en prenant en compte des comportements non linéaires pour les différentes phases.

Mots clés — Nanocomposite, FEM, Élasticité surfacique, Effet de taille.

1 Introduction

La popularité des nanocomposites ne cesse de croître en raison de leurs remarquables propriétés physiques (mécaniques, électriques, ...). Ainsi, la compréhension de leur comportement est devenue une question cruciale du point de vue expérimental mais également analytique et numérique. En présence de nano-renforts, les propriétés mécaniques ne dépendent pas seulement de la fraction volumique de renfort, mais également de la taille des renforts. Cet effet de taille est attribué aux phénomènes locaux induits à l'échelle atomique à l'interface matrice/renfort et est donc intimement lié à l'augmentation du rapport (interface) / (volume) lorsque la taille des renforts diminue. Afin de modéliser cet effet de taille, une interface cohérente au niveau de l'interface matrice-inclusion est généralement considérée. L'équilibre de cette interface élastique est traduit par l'équation de Young-Laplace généralisée et se traduit par une discontinuité du vecteur traction à travers l'interface. En termes de modélisation, la plupart des travaux s'appuient sur des développements analytiques et visent à estimer les propriétés mécaniques homogénéisées des nanocomposites [1–6]. Les principales limites de ces travaux sont associées à la forme des inclusions, en effet seuls des cas d'inclusions cylindriques ou sphériques peuvent être considérés. De plus, l'extension de ces développements à la prise en compte de comportements non-linéaires dans les différents constituants n'est pas aisée. Le développement d'approches numériques dédiées est donc nécessaire pour contourner ces limitations. Si nous omettons les travaux coûteux basés sur la dynamique moléculaire [7, 8], quelques approches numériques basées sur la mécanique des milieux continus sont proposées dans la littérature pour décrire le comportement des matériaux nano-renforcés. La première consiste à introduire des éléments de type interface dans un cadre standard d'éléments finis (FEM) pour tenir compte de l'élasticité de surface [9–11]. La seconde approche étudiée dans [12–14] consiste à prendre en compte l'effet de surface dans le cadre de la méthode XFEM (eXtended Finite Element Method). Dans ce travail, nous proposons d'utiliser la méthode EFEM (Embedded Finite Element Method) pour rendre compte des effets associés à l'interface. Dans un premier temps, nous comparons les performances numériques de la méthode EFEM aux approches de la littérature. Dans un second temps, nous présentons les résultats obtenus en termes de propriétés homogénéisées pour divers problèmes.

2 Définition du problème et formulations numériques associées

Nous considérons ici un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 2$ dans notre étude), composé de deux phases $\Omega^{(1)}$ et $\Omega^{(2)}$. Dans la suite, $\Omega^{(1)}$ désignera l'inclusion et $\Omega^{(2)}$ l'inclusion. Nous notons Γ l'interface entre les deux domaines $\Omega^{(1)}$ et $\Omega^{(2)}$ (voir figure 1).

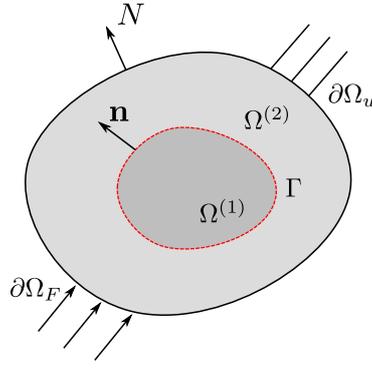


FIGURE 1 – Problème de deux phases avec une interface imparfaite.

Nous supposons, dans un premier temps, que la matrice et l'inclusion sont constituées de matériaux élastiques linéaires. E_i, ν_i et E_m, ν_m désignent respectivement les modules d'Young et coefficients de Poisson de l'inclusion et de la matrice. Une élasticité de surface est, par ailleurs, introduite sur l'interface Γ sur laquelle l'équation de Young-Laplace doit être vérifiée :

$$\operatorname{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s + [[\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}]] = \mathbf{0}, \quad (1)$$

où $\boldsymbol{\sigma}_s$ est la contrainte surfacique (tenseur surfacique tangent) sur Γ et $[[\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}]]$ est le saut de traction sur l'interface, \mathbf{n} étant le vecteur normal unitaire à Γ . div_s note la divergence surfacique. Il sera utile pour la suite de noter que $\operatorname{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s = \boldsymbol{\sigma}_s : \boldsymbol{\kappa} \mathbf{n}$ avec $\boldsymbol{\kappa}$ le tenseur de courbure associé à Γ .

2.1 Mise en œuvre de la discontinuité dans un cadre variationnel à trois champs

Afin de construire la formulation éléments finis associée à la méthode EFEM, nous nous appuyons sur une formulation à trois champs de type Hu-Washizu. Dans une logique très similaire à celle des méthodes «Enhanced Assumed Strain», les champs de déformation réel et virtuel sont décomposés de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} &= \nabla^s \mathbf{u} + \boldsymbol{\gamma} & \delta \boldsymbol{\varepsilon} &= \nabla^s \delta \mathbf{u} + \delta \boldsymbol{\gamma} \quad \text{dans } \Omega^{(i)}, i = 1, 2 \\ \boldsymbol{\varepsilon}_s &= \mathbf{P} \nabla^s \mathbf{u} \mathbf{P} + \boldsymbol{\gamma}_s & \delta \boldsymbol{\varepsilon}_s &= \mathbf{P} \nabla^s \delta \mathbf{u} \mathbf{P} + \delta \boldsymbol{\gamma}_s \quad \text{sur } \Gamma \end{aligned} \quad (2)$$

où \mathbf{P} est le projecteur sur la surface Γ tel que $\mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}$ et les tenseurs $\boldsymbol{\varepsilon}_s$ et $\delta \boldsymbol{\varepsilon}_s$ sont des tenseurs surfaciques tangents.

Dans ce contexte, la formulation variationnelle à trois champs considérée permet de formuler, après introduction des champs indépendants $\mathbf{u}, \boldsymbol{\varepsilon}$ et $\boldsymbol{\sigma}$, le problème suivant : $\forall (\delta \mathbf{u}, \delta \boldsymbol{\varepsilon}, \delta \boldsymbol{\sigma})$

$$\left\{ \begin{aligned} & \int_{\Omega \setminus \Gamma} d\Omega \nabla^s \delta \mathbf{u} : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}) d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{P} \nabla^s \delta \mathbf{u} \mathbf{P} : \boldsymbol{\sigma}_s(\boldsymbol{\varepsilon}_s) d\Gamma - \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{b} d\Omega - \int_{\partial \Omega_t} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} dS \\ & \int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\gamma} : (\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}) - \boldsymbol{\sigma}) d\Omega + \int_{\Gamma} \delta \boldsymbol{\gamma}_s : (\boldsymbol{\sigma}_s(\boldsymbol{\varepsilon}_s) - \boldsymbol{\sigma}_s) d\Gamma = 0 \\ & \int_{\Omega \setminus \Gamma} \delta \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\gamma} d\Omega + \int_{\Gamma} \delta \boldsymbol{\sigma}_s : \boldsymbol{\gamma}_s d\Gamma = 0 \end{aligned} \right. \quad (3)$$

où il a été tenu compte du fait que le champ de contrainte est discontinu sur Γ . \mathbf{b} et $\bar{\mathbf{t}}$ notent respectivement les forces volumiques et les tractions imposées sur la portion $\partial_t \Omega$ de la frontière $\partial \Omega$ de Ω . $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon})$ et $\boldsymbol{\sigma}_s(\boldsymbol{\varepsilon}_s)$ notent les contraintes et contraintes surfaciques calculées à partir de la loi de comportement du volume ou de l'interface.

2.2 Discrétisation des champs

La formulation discrétisée du problème précédent est écrite en s'appuyant sur la méthode des modes incompatibles (ou méthode *enhanced assumed strain* [15]). Ainsi, l'enrichissement du champ de déformation est construit comme dérivant d'un enrichissement du champ de déplacement. Pour les éléments coupés par l'interface, le champ de déplacement peut s'écrire sous la forme :

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n N_i(\mathbf{x}) \mathbf{u}_i + \mathbf{M}(\mathbf{x}) \mathbf{a}, \quad (4)$$

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x})\mathcal{H}_\Gamma(\mathbf{x}) - \sum_{i \in \Omega^\oplus} N_i(\mathbf{x})\varphi(\mathbf{x}_i) \quad (5)$$

avec \mathbf{x}_i le nœud i de l'élément considéré et $\varphi(\mathbf{x})$ une fonction telle que $\Gamma := \{\mathbf{x} \mid \varphi(\mathbf{x}) = 0\}$. On a ainsi,

$$\mathbf{n}(\mathbf{x}_\Gamma) = \frac{\nabla\varphi}{\|\nabla\varphi\|}(\mathbf{x}_\Gamma), \quad (6)$$

avec \mathbf{x}_Γ un point de Γ et \mathcal{H}_Γ note la fonction de Heaviside telle que :

$$\mathcal{H}_\Gamma(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \text{if } \mathbf{x} \in \Omega^\ominus \\ 1 & \text{if } \mathbf{x} \in \Omega^\oplus \end{cases} \quad (7)$$

Le champ de déformation réel s'écrit alors sous la forme :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^h(\mathbf{x}) = \mathbf{B}(\mathbf{x})\mathbf{u} + \mathbf{G}_r(\mathbf{x})\mathbf{a}, \quad (8)$$

avec, si la fonction $\varphi(\mathbf{x})$ choisie est la fonction distance signée,

$$\mathbf{G}_r(\mathbf{x}) = \mathbf{L}\mathbf{M}(\mathbf{x}) = \mathcal{N}\mathcal{H}_\Gamma(\mathbf{x}) - \sum_{i \in \Omega^\oplus} \mathbf{B}_i(\mathbf{x})\varphi(\mathbf{x}_i), \quad (9)$$

où \mathbf{L} est l'opérateur matriciel associé à ∇^s et

$$\mathcal{N} = \begin{bmatrix} n_x & 0 \\ 0 & n_y \\ n_y & n_x \end{bmatrix}. \quad (10)$$

L'interpolation de la déformation ajoutée virtuelle est construite à partir d'une version modifiée de \mathbf{G}_r . Ce type de modification, nécessaire pour assurer la satisfaction du patch-test [16], peut être obtenu en suivant la procédure proposée pour la méthode des modes incompatibles [17] conduisant à :

$$\mathbf{G}_v(\mathbf{x}) = \mathbf{G}_r(\mathbf{x}) - \frac{1}{V} \int_{\Omega^e} \mathbf{G}_r(\mathbf{x}) d\Omega. \quad (11)$$

On obtient ainsi, pour des éléments triangulaires à 3 nœuds :

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_v^\oplus(\mathbf{x}) &= \frac{V^\ominus}{V} \mathcal{N} \quad \text{sur } \Omega^\oplus \\ \mathbf{G}_v^\ominus(\mathbf{x}) &= -\frac{V^\oplus}{V} \mathcal{N} \quad \text{sur } \Omega^\ominus, \end{aligned} \quad (12)$$

où V^\ominus et V^\oplus notent respectivement l'aire de Ω^\ominus et Ω^\oplus . Un tel choix conduit à une formulation non symétrique déjà testée dans le cadre des méthodes de type EFEM pour la description d'interfaces cohésives (méthode dite SKON - statically and kinematically optimal nonsymmetric) et conduisant à de meilleures performances que les formulations symétriques correspondantes (dites SOS - statically optimal symmetric et KOS - kinematically optimal symmetric) [18]. La discrétisation des champs de déformation réel et virtuel s'écrit ainsi sous la forme :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}^h &= \mathbf{B}\mathbf{u} + \mathbf{G}_r\mathbf{a} && \text{sur } \Omega \\ \delta\boldsymbol{\varepsilon}^h &= \mathbf{B}\delta\mathbf{u} + \mathbf{G}_v\delta\mathbf{a} && \text{sur } \Omega \\ \boldsymbol{\varepsilon}_s^h &= \mathbf{P}\mathbf{B}\mathbf{u}\mathbf{P} + \mathbf{G}_s\mathbf{a} = \mathbf{M}_p\mathbf{B}\mathbf{u} + \mathbf{G}_s\mathbf{a} && \text{sur } \Gamma \\ \delta\boldsymbol{\varepsilon}_s^h &= \mathbf{P}\mathbf{B}\delta\mathbf{u}\mathbf{P} + \mathbf{G}_s\delta\mathbf{a} = \mathbf{M}_p\mathbf{B}\delta\mathbf{u} + \mathbf{G}_s\delta\mathbf{a} && \text{sur } \Gamma \end{aligned} \quad (13)$$

2.3 Formulation «éléments finis» du problème

La construction du problème discret se fait en choisissant les champs de contrainte réel $\boldsymbol{\sigma}$ et virtuel $\delta\boldsymbol{\sigma}$ du problème (3) orthogonaux respectivement aux champs de déformation ajoutée réel et virtuel. Le problème (3) se réduit alors à :

$$\mathbb{A}_{e=1}^{n_{el}} [\mathbf{f}_{int}^e - \mathbf{f}_{ext}^e] = \mathbf{0}, \quad (14)$$

$$\mathbf{h}_a = \int_{\Omega_e^\oplus} (\mathbf{G}_v^\oplus)^T \boldsymbol{\sigma}^\oplus(\boldsymbol{\varepsilon}^h) d\Omega + \int_{\Omega_e^\ominus} (\mathbf{G}_v^\ominus)^T \boldsymbol{\sigma}^\ominus(\boldsymbol{\varepsilon}^h) d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{G}_s^T \boldsymbol{\sigma}_s(\boldsymbol{\varepsilon}_s^h) d\Gamma = \mathbf{0} \quad \forall e \text{ coupé par } \Gamma, \quad (15)$$

où

$$\begin{aligned}\mathbf{f}_{int}^e &= \int_{\Omega_e^\oplus} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}^\oplus d\Omega + \int_{\Omega_e^\ominus} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}^\ominus d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{B}^T \mathbf{M}_P^T \boldsymbol{\sigma}_s d\Gamma, \\ \mathbf{f}_{ext}^e &= \int_{\Omega_e} \mathbf{N}^T \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{N}^T \mathbf{b}_s d\Gamma\end{aligned}\quad (16)$$

où $\mathbf{M}_P \mathbf{B}$ correspond à la version matricielle de l'opérateur $\mathbf{P} \nabla^s \mathbf{P}$.

Du fait de la forme de l'interpolation des champs de déformation ajoutée, l'équation supplémentaire (15) est une équation d'équilibre élémentaire résolue sur chaque élément traversé par l'interface Γ . En tenant compte de l'expression (12) de \mathbf{G}_v , on obtient l'équation locale suivante :

$$\mathbf{h}_a = \left(\frac{V^\ominus}{V} \int_{\Omega_e^\oplus} \mathcal{N}^T \boldsymbol{\sigma}^\oplus d\Omega - \frac{V^\oplus}{V} \int_{\Omega_e^\ominus} \mathcal{N}^T \boldsymbol{\sigma}^\ominus d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{G}_s^T \boldsymbol{\sigma}_s d\Gamma \right) = \mathbf{0}, \quad (17)$$

ce qui en tenant compte de (10) et du fait que l'on considère des éléments triangulaires à 3 nœuds donne :

$$\frac{V^\ominus V^\oplus}{V} \mathcal{N}^T [[\boldsymbol{\sigma}]] + A \mathbf{G}_s^T \boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{0}, \quad (18)$$

où A est la surface de la portion de Γ traversant l'élément e considéré.

Il reste à ce stade à choisir la fonction \mathbf{G}_s servant à l'interpolation de la déformation ajoutée surfacique. Ce choix est réalisé de façon à assurer que l'équation locale (17) corresponde à la forme faible de l'équation d'équilibre de l'interface à savoir l'équation de Young-Laplace généralisée [4, 5, 19] qui s'écrit sous la forme :

$$[[\boldsymbol{\sigma}]] \cdot \mathbf{n} + \text{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{0}, \quad (19)$$

ce qui donne après projection le plan tangent à Γ et sa normale \mathbf{n} :

$$\begin{cases} \mathbf{n} \cdot [[\boldsymbol{\sigma}]] \cdot \mathbf{n} + (\boldsymbol{\sigma}_s : \boldsymbol{\kappa}) = 0 \\ \mathbf{P} [[\boldsymbol{\sigma}]] \cdot \mathbf{n} + \mathbf{P} \text{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s = 0 \end{cases} \quad (20)$$

où $\boldsymbol{\kappa}$ est le tenseur de courbure et où il a été tenu compte du fait que la composante selon \mathbf{n} de $\text{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s$ s'écrit à partir du tenseur de courbure $\boldsymbol{\kappa}$ sous la forme : $(\boldsymbol{\sigma}_s : \boldsymbol{\kappa}) \mathbf{n}$.

Pour des éléments triangulaires à 3 nœuds, la contrainte surfacique $\boldsymbol{\sigma}_s$ est constante par élément et donc $\mathbf{P} \text{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s = 0$.

Nous noterons $\sigma_{s,mm}$ la composante tangentielle de $\boldsymbol{\sigma}_s$ dans le plan d'étude (x, y) . L'équation (15) peut alors être interprétée comme la forme faible de l'équation de Young-Laplace généralisée à condition que la fonction \mathbf{G}_s soit telle que :

$$\mathbf{G}_s^T \boldsymbol{\sigma}_s = \frac{V^\ominus V^\oplus}{VA} \frac{1}{R} \sigma_{s,mm} \begin{bmatrix} n_x \\ n_y \end{bmatrix}, \quad (21)$$

où R est le rayon de courbure moyen de l'interface sur l'élément considéré.

Ce qui donne finalement :

$$\mathbf{G}_s^T = \frac{V^\ominus V^\oplus}{VA} \frac{1}{R} \underbrace{\begin{bmatrix} n_x m_x^2 & n_x m_y^2 & 0 & 2n_x m_x m_y \\ n_y m_x^2 & n_y m_y^2 & 0 & 2n_y m_x m_y \end{bmatrix}}_{\mathcal{P}^T} = \frac{V^\ominus V^\oplus}{VA} \frac{1}{R} \mathcal{P}^T, \quad (22)$$

où (m_x, m_y) sont les composantes du vecteur tangent à Γ dans le plan (x, y) .

Avec ces interpolations, les équations (14) et (15) se réécrivent sous la forme :

$$\begin{cases} \sum_{e=1}^{N_{elem}} (\mathbf{K}_{uu}^e \mathbf{u} + \mathbf{K}_{ua}^e \mathbf{a}) = \sum_{e=1}^{N_{elem}} \mathbf{f}_{ext}^e \\ \mathbf{K}_{au}^e \mathbf{u} + \mathbf{K}_{aa}^e \mathbf{a} = \mathbf{0} \quad \forall e \text{ coupé par } \Gamma \end{cases} \quad (23a)$$

$$\quad (23b)$$

où

$$\begin{aligned}\mathbf{K}_{uu}^e &= \int_{\Omega_e^\oplus} \mathbf{B}^T \mathbf{C}^\oplus \mathbf{B} d\Omega + \int_{\Omega_e^\ominus} \mathbf{B}^T \mathbf{C}^\ominus \mathbf{B} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{B}^T \mathbf{M}_P^T \mathbf{C}^s \mathbf{M}_P \mathbf{B} d\Gamma \\ \mathbf{K}_{ua}^e &= \int_{\Omega_e^\oplus} \mathbf{B}^T \mathbf{C}^\oplus \mathbf{G}_r^\oplus d\Omega + \int_{\Omega_e^\ominus} \mathbf{B}^T \mathbf{C}^\ominus \mathbf{G}_r^\ominus d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{B}^T \mathbf{M}_P^T \mathbf{C}^s \mathbf{G}_s d\Gamma \\ \mathbf{K}_{au}^e &= \int_{\Omega_e^\oplus} \mathbf{G}_v^{\oplus T} \mathbf{C}^\oplus \mathbf{B} d\Omega + \int_{\Omega_e^\ominus} \mathbf{G}_v^{\ominus T} \mathbf{C}^\ominus \mathbf{B} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{G}_s^T \mathbf{C}^s \mathbf{M}_P \mathbf{B} d\Gamma \\ \mathbf{K}_{aa}^e &= \int_{\Omega_e^\oplus} \mathbf{G}_v^{\oplus T} \mathbf{C}^\oplus \mathbf{G}_r^\oplus d\Omega + \int_{\Omega_e^\ominus} \mathbf{G}_v^{\ominus T} \mathbf{C}^\ominus \mathbf{G}_r^\ominus d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{G}_s^T \mathbf{C}^s \mathbf{G}_s d\Gamma\end{aligned}\quad (24)$$

Le système (23) est résolu en profitant du fait que les équations (23b) sont écrites au niveau élémentaire. Une méthode d'«operator split» est alors considérée pour la résolution : les équations (23b) sont résolues au niveau élémentaire afin d'obtenir les variables \mathbf{a} pour chaque élément traversé par l'interface puis, après une procédure de condensation statique au niveau élémentaire [20], les déplacements nodaux \mathbf{u} sont obtenus comme solution de :

$$\mathbf{A}_{e=1}^{Nelem} \tilde{\mathbf{K}}^e \mathbf{u} = \mathbf{A}_{e=1}^{Nelem} \mathbf{f}_{ext}^e \quad (25)$$

avec

$$\tilde{\mathbf{K}}^e = \mathbf{K}_{uu}^e - \mathbf{K}_{ua}^e \mathbf{K}_{aa}^{e-1} \mathbf{K}_{au}^e \quad (26)$$

3 Quelques résultats numériques

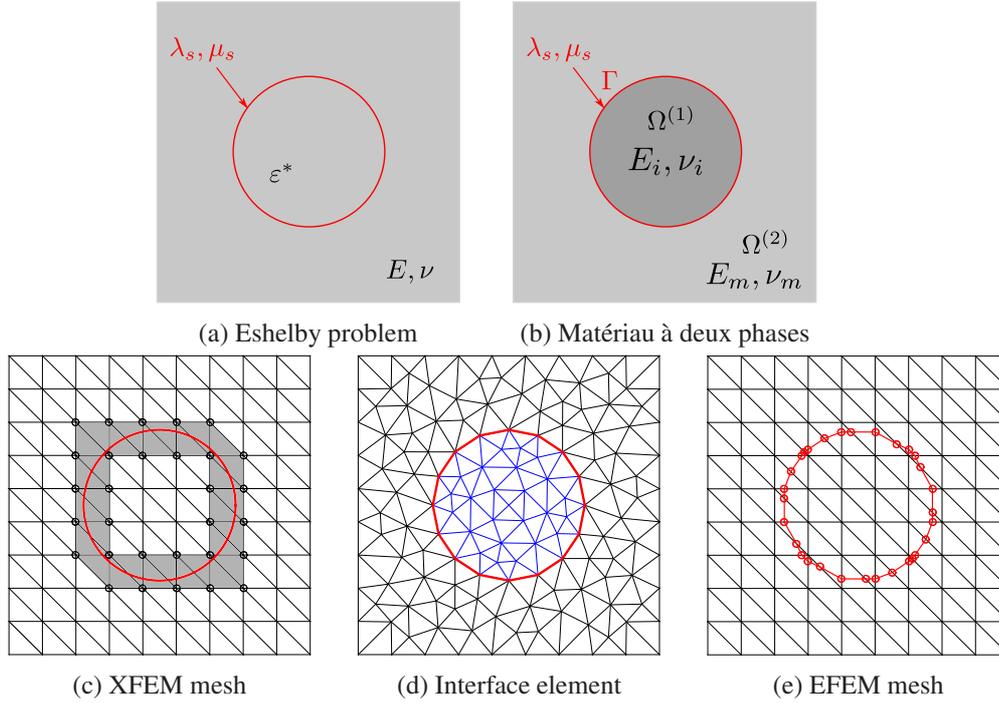


FIGURE 2 – Les problèmes avec une interface cohérente sont traités dans l'état plane de déformation.

Dans cette section, les résultats obtenus en considérant un comportement élastique pour toutes les phases (matrice, inclusion et interface) sont présentés, les résultats obtenus en considérant un comportement non linéaire pour la matrice et/ou l'inclusion seront discutés lors de la présentation. Le problème d'Eshelby avec une interface cohérente est dans un premier temps traité (voir la figure 2a). Le problème considéré correspond à une inclusion cylindrique immergée dans un domaine élastique infini. Une interface cohérente est supposée entre l'inclusion et la matrice. Le chargement correspond à une déformation (ou «eigenstrain») dans l'inclusion : $\boldsymbol{\varepsilon}^* = \boldsymbol{\varepsilon}_{11}^* = \boldsymbol{\varepsilon}_{22}^* = 0.5, \boldsymbol{\varepsilon}_{33}^* = 0$. La qualité des approches numériques sera évaluée par l'évaluation de l'erreur et du taux de convergence. L'erreur est évaluée en s'appuyant sur la norme énergétique de la différence entre la solution calculée et la solution exacte :

$$e = \sqrt{\frac{\int_{\Omega} (\boldsymbol{\varepsilon}^h(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})) : \mathbb{C} : (\boldsymbol{\varepsilon}^h(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})) \, d\Omega}{\int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \, d\Omega}}, \quad (27)$$

où $\boldsymbol{\varepsilon}^h$ est la déformation calculée avec la stratégie numérique considérée et $\boldsymbol{\varepsilon}$ est la solution analytique. La figure 3 présente la comparaison en termes de taux de convergence et d'efficacité des trois approches numériques implémentées (XFEM [12], EFEM et Interface Element) pour les cas sans ($k_s = 0$ N/m) et avec élasticité surfacique ($\lambda_s = 6.842$ N/m, $\mu_s = -0.375$ N/m selon [21], soit $k_s = 6.092$ N/m). On peut constater que la convergence des approches EFEM et «élément d'interface» n'est pas affectée par l'introduction de l'élasticité de surface.

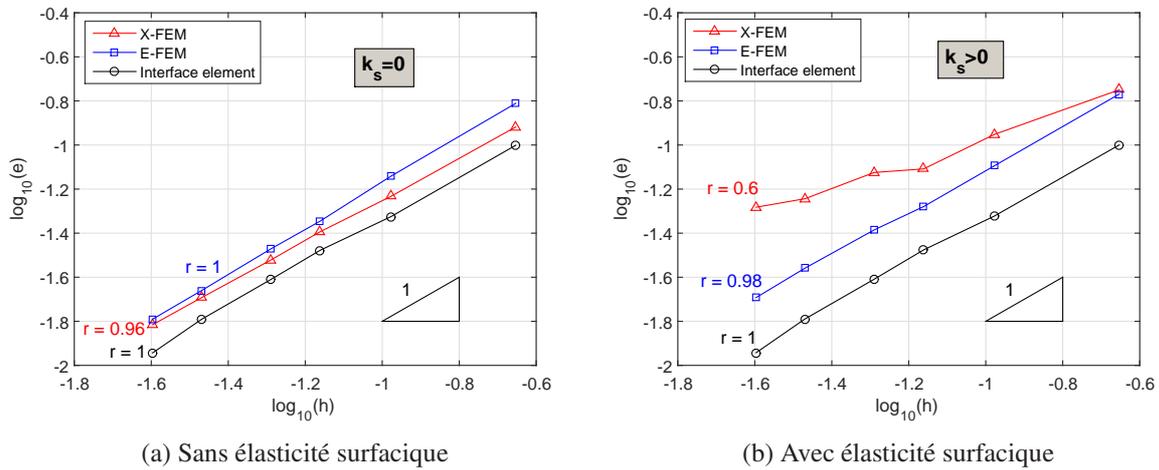


FIGURE 3 – Analyse de convergence pour le problème d’Eshelby avec et sans élasticité de surface pour les trois méthodes : EFEM, XFEM et élément d’interface.

Dans la suite, nous considérons un problème d’homogénéisation linéaire d’un matériau à deux phases avec une interface cohérente. L’homogénéisation est effectuée en supposant la microstructure périodique. La figure 4 présente le module de compressibilité effectif normalisé (homogénéisé) obtenu pour les cas avec et sans élasticité surfacique en fonction du rayon des inclusions pour une fraction volumique fixée à $f = 0,2$. Un excellent accord entre les résultats numériques et analytiques [3] est observé. On peut remarquer que l’effet de taille observé pour le cas avec élasticité de surface est d’autant plus marqué que le rayon des nano-inclusions est petit.

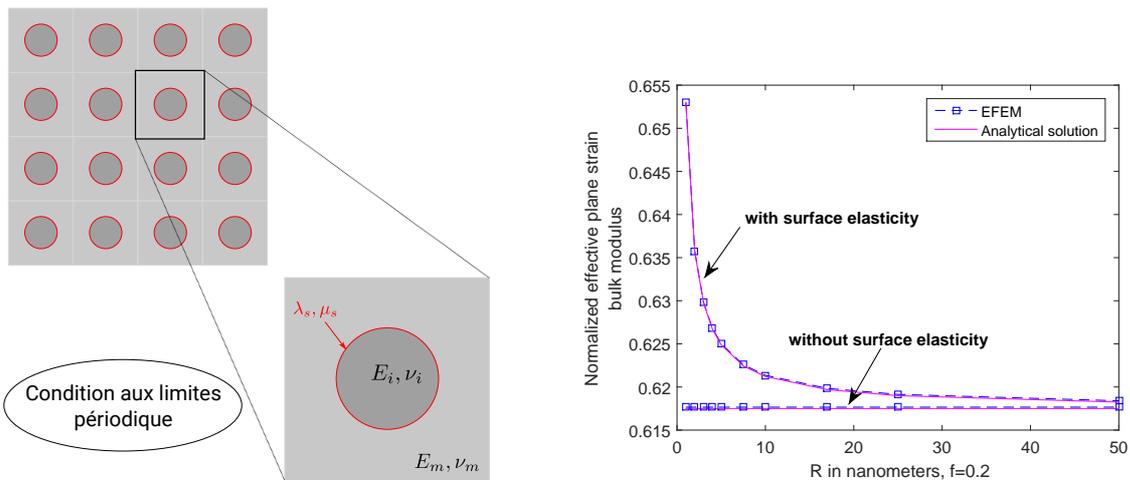


FIGURE 4 – Module de compressibilité effectif normalisé en fonction du rayon pour une fraction volumique fixe ($f = 0,2$, $E_m = 70$ GPa, $E_i = 0,1E_m$, $\nu_m = \nu_i = 0,32$).

Afin de se rapprocher des micro structures réelles, différents VER constitués de nano-inclusions réparties de manière aléatoire sont analysés. Pour chaque rayon, nous générons une microstructure aléatoire et calculons le module homogénéisé jusqu’à atteindre la convergence statistique de la valeur moyenne du module effectif. Les résultats obtenus sont présentés dans la figure 5. Le résultat obtenu par l’approche «élément d’interface» est utilisé ici comme référence. L’effet de taille pour différents rayons de nano-inclusions est clairement observé. Nous observons également un bon accord entre les deux approches numériques implémentées (EFEM et élément d’interface).

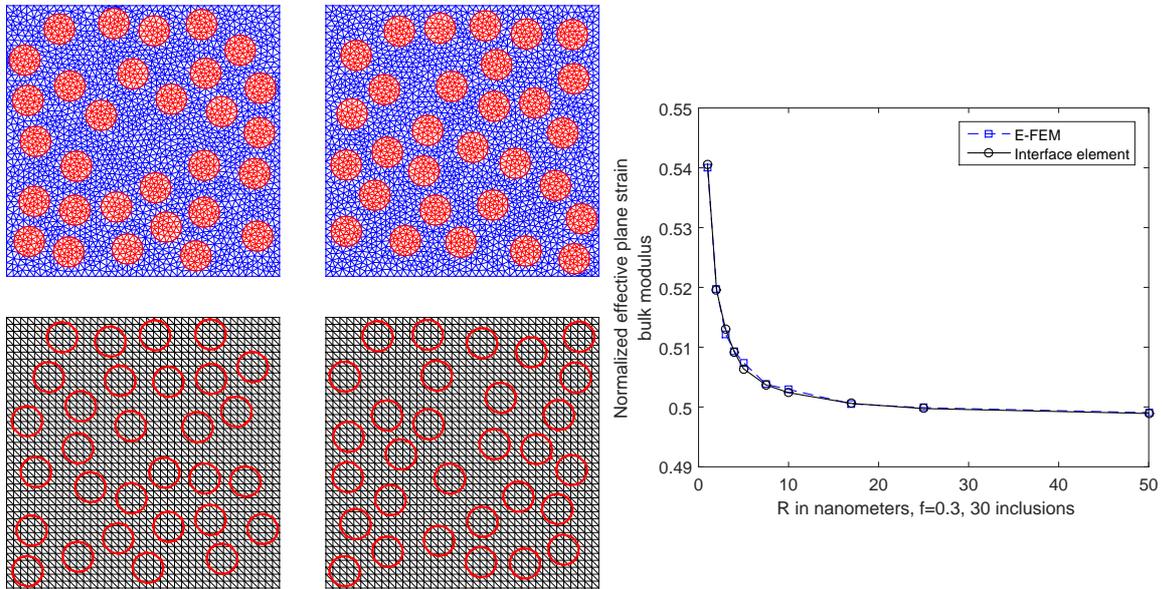


FIGURE 5 – Moyenne statistique du module de compressibilité effectif normalisé ($f = 0,3$, $E_m = 70$ GPa, $E_i = 0,1E_m$, $\nu_m = \nu_i = 0,32$).

4 Conclusions

Dans ce travail, une stratégie numérique basée sur l’approche EFEM a été proposée pour reproduire l’effet de taille dans des nano-composites. Cette stratégie a été validée en régime élastique par une comparaison à la solution analytique et au méthode élément d’interface aussi bien pour le problème d’Eshelby que dans le contexte de l’homogénéisation numérique d’un VER. La stratégie développée peut également être utilisée pour prendre en compte un comportement non-linéaire de la matrice et/ou de l’inclusion et/ou de l’interface. Des résultats obtenus pour des comportements élastoplastiques de la matrice et de l’inclusion seront présentés lors de la communication orale.

Références

- [1] P Sharma and S Ganti. Size-dependent eshelby’s tensor for embedded nano-inclusions incorporating surface/interface energies. *Transactions-American society of mechanical engineers journal of applied mechanics*, 71(5) :663–671, 2004.
- [2] P Sharma, S Ganti, and N Bhate. Effect of surfaces on the size-dependent elastic state of nano-inhomogeneities. *Applied Physics Letters*, 82(4) :535–537, 2003.
- [3] H. Le Quang and Q. C. He. Estimation of the effective thermoelastic moduli of fibrous nanocomposites with cylindrically anisotropic phases. *Archive of Applied Mechanics*, 79(3) :225–248, Mar 2009.
- [4] HL Duan, Jian-xiang Wang, ZP Huang, and Bhushan Lal Karihaloo. Size-dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53(7) :1574–1596, 2005.
- [5] Sébastien Brisard, Luc Dormieux, and D Kondo. Hashin–shtrikman bounds on the bulk modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects. *Computational Materials Science*, 48(3) :589–596, 2010.
- [6] Sébastien Brisard, Luc Dormieux, and Djimedo Kondo. Hashin–shtrikman bounds on the shear modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects. *Computational Materials Science*, 50(2) :403–410, 2010.
- [7] D. Brown, V. Marcadon, P. Mélé, and N. D. Albérola. Effect of filler particle size on the properties of model nanocomposites. *Macromolecules*, 41(4) :1499 – 1511, 2008.
- [8] S. Güryel, M. Walker, P. Geerlings, F. De Profta, and M. R. Wilsonb. Molecular dynamics simulations of the structure and the morphology of graphene/polymer nanocomposites. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19 :12959 – 12969, 2017.
- [9] Gao Wei, YU Shouwen, and Huang Ganyun. Finite element characterization of the size-dependent mechanical behaviour in nanosystems. *Nanotechnology*, 17(4) :1118, 2006.

- [10] Ali Esmaeili, Paul Steinmann, and Ali Javili. Non-coherent energetic interfaces accounting for degradation. *Computational Mechanics*, 59(3) :361–383, Mar 2017.
- [11] Ali Javili, Paul Steinmann, and Jörn Mosler. Micro-to-macro transition accounting for general imperfect interfaces. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 317(Supplement C) :274 – 317, 2017.
- [12] Julien Yvonnet, H Le Quang, and Q-C He. An xfem/level set approach to modelling surface/interface effects and to computing the size-dependent effective properties of nanocomposites. *Computational Mechanics*, 42(1) :119–131, 2008.
- [13] Q.-Z. Zhu, S.-T. Gu, J. Yvonnet, J.-F. Shao, and Q.-C. He. Three-dimensional numerical modelling by xfem of spring-layer imperfect curved interfaces with applications to linearly elastic composite materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 88(4) :307–328, 2011.
- [14] Mehdi Farsad, Franck J. Vernerey, and Harold S. Park. An extended finite element/level set method to study surface effects on the mechanical behavior and properties of nanomaterials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 84(12) :1466–1489, 2010.
- [15] Juan C Simo and MS Rifai. A class of mixed assumed strain methods and the method of incompatible modes. *International journal for numerical methods in engineering*, 29(8) :1595–1638, 1990.
- [16] Olek C Zienkiewicz and Robert L Taylor. *The finite element method for solid and structural mechanics*. Elsevier, 2005.
- [17] Adnan Ibrahimbegovic and EL Wilson. A modified method of incompatible modes. *Communications in Applied Numerical Methods*, 7(3) :187–194, 1991.
- [18] Milan Jirásek. Comparative study on finite elements with embedded discontinuities. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 188(1-3) :307–330, 2000.
- [19] Morton E. Gurtin and A. Ian Murdoch. A continuum theory of elastic material surfaces. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 57(4) :291–323, Dec 1975.
- [20] Edward L Wilson. The static condensation algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 8(1) :198–203, 1974.
- [21] Ronald E Miller and Vijay B Shenoy. Size-dependent elastic properties of nanosized structural elements. *Nanotechnology*, 11(3) :139, 2000.