

Modélisation par élément discret à l'échelle de la microstructure de l'endommagement résultant des différences de dilatation thermique de matériaux hétérogènes fragiles. Incidence sur les propriétés macroscopiques.

D. André¹, T. Nguyen², N. Tessier-Doyen³, M. Huger⁴

¹ ENSCI, SPCTS, UMR 7315, F-87000 Limoges, damien.andre@unilim.fr

² Univ. Limoges, SPCTS, UMR 7315, F-87000 Limoges, truong_thi.nguyen@unilim.fr

³ Univ. Limoges, SPCTS, UMR 7315, F-87000 Limoges, nicolas.tessier-doyen@unilim.fr

⁴ ENSCI, SPCTS, UMR 7315, F-87000 Limoges, marc.huger@unilim.fr

Résumé — À l'échelle macroscopique, des matériaux tels que les roches, les bétons ou les céramiques peuvent être considérés comme des milieux continus homogènes. Cependant, à l'échelle microscopique, ces matériaux sont constitués de microstructures complexes qui impliquent différentes phases. Ces microstructures sont généralement constituées par des inclusions noyées dans une matrice vitreuse qui assure la cohésion du matériau. Ces différentes phases possédant généralement des coefficients d'expansion thermique différents, il en résulte des contraintes résiduelles pouvant endommager le matériau lorsque celui-ci est soumis à un cyclage thermique. Cette étude propose de modéliser avec la méthode par élément discret cet endommagement puis d'étudier l'impact de cet endommagement sur des paramètres thermomécaniques macroscopiques. Les résultats obtenus sont comparés à des observations expérimentales réalisées sur des matériaux modèles.

Mots clés — élément discret, thermomécanique, endommagement, dilatation thermique

1 Introduction

Les roches, les bétons, les céramiques ou les matériaux réfractaires sont des matériaux hétérogènes présentant une composition multiphasique impliquant différentes tailles d'agrégats, de phases et divers additifs. La description et la prédiction du comportement thermomécanique de ces matériaux présentent une difficulté réelle du fait de leurs microstructures complexes. Dans les années 60, Hashin et Shtrikman (H&S) ont développés des modèles analytiques qui permettent de prédire les propriétés thermomécaniques élastiques de matériaux multiphasés parfaits : cohésifs et exempts de dommages [1]. Cependant, la plupart de ces matériaux présentent de nombreuses microfissures résultant du désaccord d'expansion thermique entre les phases en présence. Ces microfissures, aussi appelées dommages, résultent de l'histoire thermique, généralement complexe, du matériau étudié. Ces dommages influencent fortement les propriétés macroscopiques thermomécaniques de ces matériaux et peuvent également avoir une forte influence sur leurs durées de vie en service. Par exemple, le module de Young apparent est fortement affecté par la présence de microfissures en regard des prédictions de H&S [2]. Aussi, il est proposé dans cette étude, une méthode numérique basée sur la Méthode des Éléments Discrets (MED) permettant de prédire les occurrences de ces dommages et leurs influences sur les propriétés macroscopiques telles que le module de Young et le Coefficient d'Expansion Thermique (CET).

La MED présente une alternative intéressante à la méthode des éléments finis pour étudier les matériaux multifissurés car elle prend naturellement en compte les discontinuités. La MED met en oeuvre un groupe d'éléments distincts (également nommés *éléments discrets*) qui sont en interaction par contacts ou par interactions cohésives. Le modèle proposé ici consiste en un assemblage d'éléments discrets reliés entre eux par des interactions mécaniques qui modélisent le comportement élastique du matériau. La fissuration est modélisée en introduisant un critère de rupture local à l'échelle des interactions entre éléments discrets. Les avantages de ce modèle sont la description des initiations de fissures, des propagations de fissures et de leurs coalescences. Cette méthode a été appliquée pour étudier les dommages dans les bétons [3], les roches [4] ou les céramiques [5]. Cependant, la principale difficulté avec la MED

Propriété	Matrice	Inclusion
Matériau	Verre	Alumine
Coefficient d'expansion thermique $\alpha(K^{-1})$	11.6×10^{-6}	7.6×10^{-6}
Module de Young E (GPa)	72	340
Coefficient de Poisson ν	0.23	0.24
Masse volumique ρ ($kg.m^{-3}$)	2570	3970
Contrainte à rupture (MPa)	50	380

TABLE 1 – Paramètres thermomécaniques des inclusions d'alumine et de la matrice en verre

est d'obtenir des résultats quantitatifs. L'étude présentée ici fait face à cette difficulté majeure et propose un modèle MED quantitatif qui permet de prédire l'état d'endommagement de ces matériaux puis de quantifier l'impact de cet endommagement sur le module de Young apparent et le CET apparent. Afin de valider le modèle proposé, les résultats sont comparés avec des observations expérimentales réalisées sur des *matériaux modèles*.

2 Matériaux modèles

Dans cette étude, seuls les effets thermomécaniques sont pris en compte. Pour éviter des interactions physico-chimiques complexes, des matériaux modèles ont été élaborés. Les phases de ces matériaux modèles ont été choisies pour assurer la neutralité chimique et éviter la présence d'interphases. Ce matériau modèle est composé de deux phases : des inclusions sphériques d'alumine noyées dans une matrice de verre borosilicaté. Ces deux matériaux, pris séparément, présentent un comportement mécanique typiquement élastique fragile. Les valeurs des paramètres thermomécaniques de ces deux matériaux sont résumées dans le tableau 1, elles ont été choisies de façon à endommager la matrice lors de l'étape de refroidissement post-frittage de la préparation d'échantillon. Par convention, il sera dit que le matériau modèle présente un différentiel de dilatation thermique positif tel que :

$$\Delta\alpha = \alpha_{\text{matrice}} - \alpha_{\text{inclusion}} \approx 4 \times 10^{-6} K^{-1} \quad \text{donc} \quad \Delta\alpha > 0$$

L'introduction de particules sphériques dans la matrice entraîne l'apparition de contraintes résiduelles lors de l'étape de refroidissement de l'échantillon post-frittage. En raison du différentiel de dilatation thermique positif, la matrice est soumise à des contraintes de traction et les inclusions sont soumises à des contraintes de compression. La figure 1a décrit ce phénomène pour une seule inclusion. Plus précisément, la matrice est soumise à des contraintes orthoradiales de traction σ_{orth} et à de la compression radiale σ_{rad} . La fragilité de la matrice vitreuse induit des fissures orthoradiales qui se produisent et se propagent dans la matrice. Lorsque de multiples inclusions sont présentes, un réseau complexe de microfissures est généré (voir Figure 1b). Toutefois, le matériau conserve sa cohésion. Sur cette photographie, les fissures sont révélées par fluorescence à l'aide d'un colorant et d'une lumière ultraviolette.

Les matériaux modèles élaborés sont composés de particules sphériques d'alumine (diamètre moyen d'environ 500 μm et distribution monomodale) distribuées aléatoirement dans la matrice de verre borosilicatée. Trois différentes fractions volumiques d'inclusion ont été élaborées : 15%, 30% et 45%. Pour chacun des échantillons, leurs CET et leurs modules de Young ont été évalués respectivement par des essais de dilatométrie standard et par échographie ultrasonore.

3 Modèle élément discret

L'approche par éléments discrets proposée est une association entre les modèles *lattice* et les modèles particuliers telle que proposée par Potyondy dans [6]. Contrairement aux approches continues, la principale difficulté pour le MED est de simuler quantitativement un milieu continu homogène. Le but du code de calcul MED libre *GranOO* est de faire face à cette difficulté. *GranOO* intègre un certain nombre de modèles qui permettent la simulation quantitative du comportement mécanique de milieux supposés continus [7].

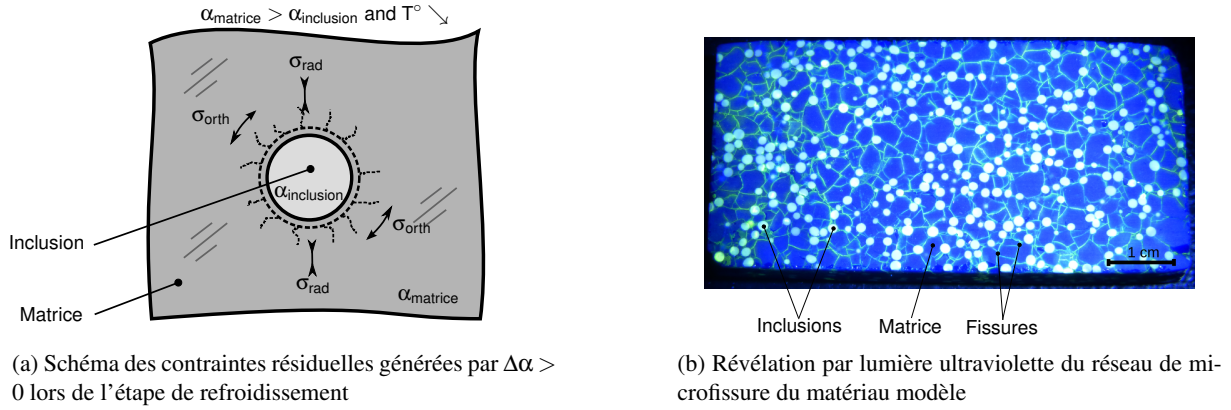


FIGURE 1 – Le matériau modèle

Le schéma de résolution temporel est de type *dynamique explicite*. Lorsqu'une convergence rapide vers la solution statique est requise, un facteur d'amortissement numérique est introduit dans le schéma numérique [8]. Les domaines discrets initiaux sont compactés selon un algorithme qui permet de garantir le respect d'un certain nombre de critères géométriques. Ces critères géométriques garantissent par la suite une bonne convergence de l'étape de calibration des paramètres du modèle discret [9]. Parmi les différents modèles proposés dans la littérature, le modèle de poutre cohésive associé à un critère de rupture local reposant sur le calcul d'une contrainte hydrostatique est utilisé ici. Pour plus de détails sur ce modèle, le lecteur peut se référer à [10].

3.1 Dilatation thermique

La simulation de la dilatation thermique avec la MED est peu abordée dans la littérature. La dilatation thermique a été introduite ici en faisant varier la *longueur libre* des poutres cohésives l_0 en fonction de la température :

$$l_0(T) = l_0^{\text{initial}} (1 + \Delta T \times \alpha_\mu) \quad (1)$$

où $\Delta T = T - T_0$ est la variation de température, α_μ est le coefficient d'expansion thermique linéaire local, l_0^{initial} est la longueur libre initiale de la poutre cohésive considérée et T_0 est la température initiale. La figure 2 montre l'évolution du CET macroscopique en fonction du nombre d'itération dans le cas d'un matériau homogène. Dans une première approche, la température est supposée uniforme dans le matériau et la propagation de chaleur est négligée. Dans cette simulation, La valeur du coefficient de dilatation thermique introduit à l'échelle locale α_μ est $7.6 \times 10^{-6} K^{-1}$. La Figure 2 montre que le CET macroscopique α_M converge vers la valeur du CET microscopique α_μ .

La méthode proposée ici permet de simuler à l'aide de la MED la dilatation thermique de façon simple et robuste sans recourir à une étape fastidieuse de calibration du paramètre α_μ . Les premiers résultats présentés sur la Figure 2 montrent que ces résultats semblent consistant dans le cas d'un matériau unique homogène. Les sections suivantes montrent l'application de ce modèle pour des matériaux hétérogènes.

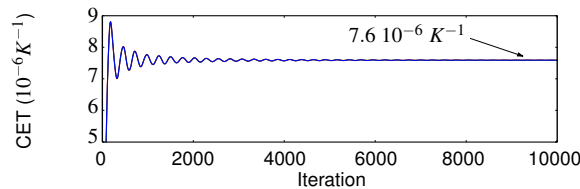


FIGURE 2 – Évolution du CET linéaire apparent α_M en fonction du nombre d'itération de calcul

3.2 Description générale de la méthodologie numérique

La figure 3 présente les étapes principales du modèle développé. La première étape consiste en la calibration des paramètres locaux du modèle : le module de Young E_μ des poutres cohésives, le rayon adimensionné R_μ des poutres cohésives, le critère de contrainte à rupture σ_{μ_f} et le CET α_μ . L'avantage de la méthode retenue est qu'un seul jeu de ces paramètres microscopiques est valable pour l'ensemble des domaines discrets générés. La deuxième étape consiste ensuite à réaliser les domaines initiaux puis d'introduire les inclusions d'alumine à l'aide d'un algorithme géométrique. Les domaines discrets sont composés d'environ 10 000 éléments discrets. Les dimensions du domaine de forme cubique sont de $2,2 \times 2,2 \times 2,2 \text{ mm}^3$. Ces dimensions sont supposées suffisantes pour que les domaines soient statistiquement représentatifs du phénomène étudié. En outre, quatre domaines ont été générés pour chaque fraction volumique étudiée. Les inclusions d'alumine de $250 \mu\text{m}$ de rayon sont représentées par des *cluster* d'élément discret. Environ 200 éléments discrets sont nécessaires pour former une particule d'alumine (éléments discrets de couleur jaune claire sur la figure 3). La troisième étape simule la phase de refroidissement des échantillons biphasés de la température de transition vitreuse du verre (450°C) jusqu'à température ambiante (20°C). Durant cette étape, le réseau de microfissures commence à se former aux environs des 300°C et progresse jusqu'à 20°C . Un exemple de réseau de fissures obtenu est visible sur la troisième image de la figure 3 (éléments discrets de couleur noire) .

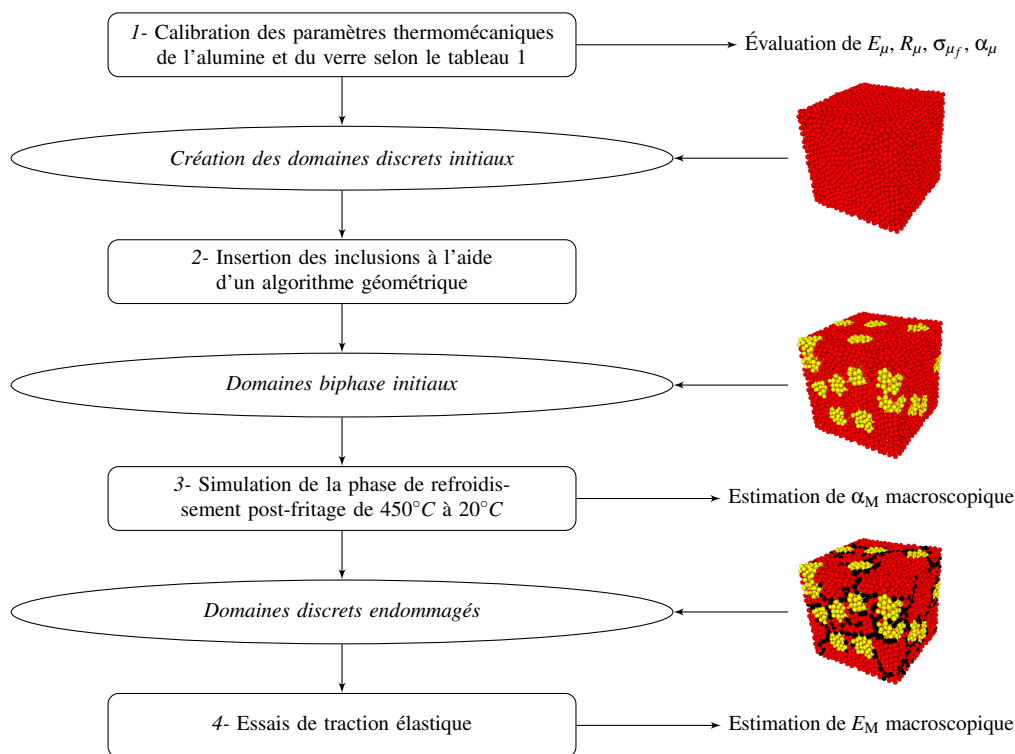


FIGURE 3 – Vue synthétique des principales étapes de simulation

Durant l'étape de refroidissement, l'évolution des déformations d'origine thermique est mesurée (voir figure 4). Les mesures des déformations (notés num. ϵ_{xx} , num. ϵ_{yy} et num. ϵ_{zz} sur la figure 4) sont en accord avec les données expérimentales (noté ϵ sur la figure 4). De plus, les données numériques font apparaître deux régimes : un régime *non-endommagé* compris entre 450°C et 300°C avec un CET proche des prédictions d'H&S et un régime *endommagé* caractérisé par une diminution notable du CET. Ces deux régimes sont moins marqués pour les données expérimentales, car, contrairement aux échantillons numériques, les échantillons expérimentaux sont déjà endommagés lors de la mesure des CET par dilatométrie.

Enfin, la dernière étape consiste à évaluer les modules de Young apparents des échantillons numériques thermiquement endommagés. Pour cela, les échantillons subissent des essais de traction tout en interdisant aux fissures de se propager car expérimentalement, les modules de Young sont évalués par échographie ultrasonore. Or, Il est supposé que cette technique de caractérisation est non destructive et

ne génère aucun dommage supplémentaire.

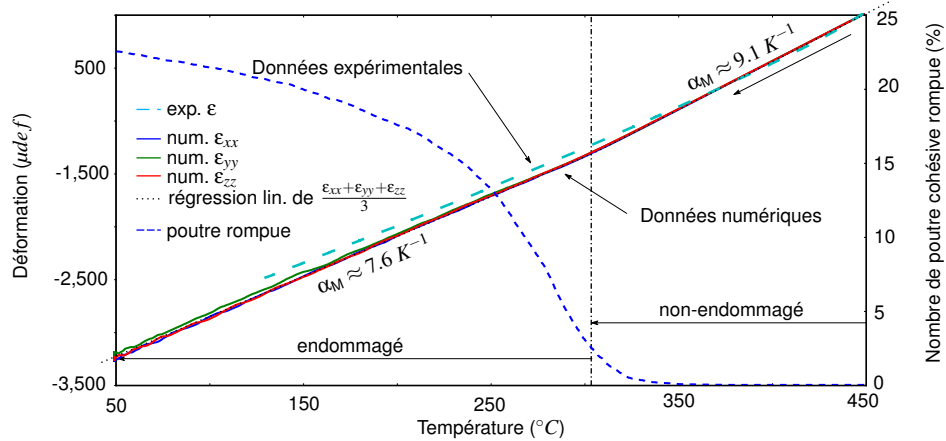


FIGURE 4 – Évolution (i) des déformations numériques et expérimentales d’origine thermique et (ii) du nombre de poutres cohésives rompues en fonction de la température pour des échantillons contenant 45% d’inclusion

4 Résultats et discussions

Les résultats sont synthétisés sur les figures 5a et 5b. La première observation concerne la validité des résultats du modèle *numérique non-endommageable*. Ces résultats correspondent à des simulations où les matériaux sont supposés purement élastiques. Ces échantillons numériques ne sont donc pas endommagés au cours de la phase de refroidissement. Les résultats sont alors tout à fait conformes avec les modèles analytiques à bornes développés par Hashin et Shtrikman (H&S). Cette première observation permet de valider le modèle MED thermomécanique élastique de matériau hétérogène.

En outre, il apparaît que les observations expérimentales (en lignes pointillées rouges sur les figures 5a et 5b) sont très nettement inférieures aux bornes inférieures H_s^- du modèle d’H&S et aux simulations. Les simulations intitulées *numérique endommageable* sont, par contre, très proches des résultats expérimentaux. Le modèle numérique développé permet de rendre compte des phénomènes de microfissuration de la matrice vitreuse et de son influence sur les propriétés thermomécaniques macroscopiques. L’approche numérique retenue permet donc un *passage d’échelle*. À partir de la connaissance fine de chacun des constituants, des cyclages thermiques du matériau et de la topologie de la microstructure, il a été possible de prédire un état d’endommagement puis de calculer son impact sur des grandeurs thermomécaniques à l’échelle supérieure : module de Young apparent et coefficient d’expansion thermique apparent.

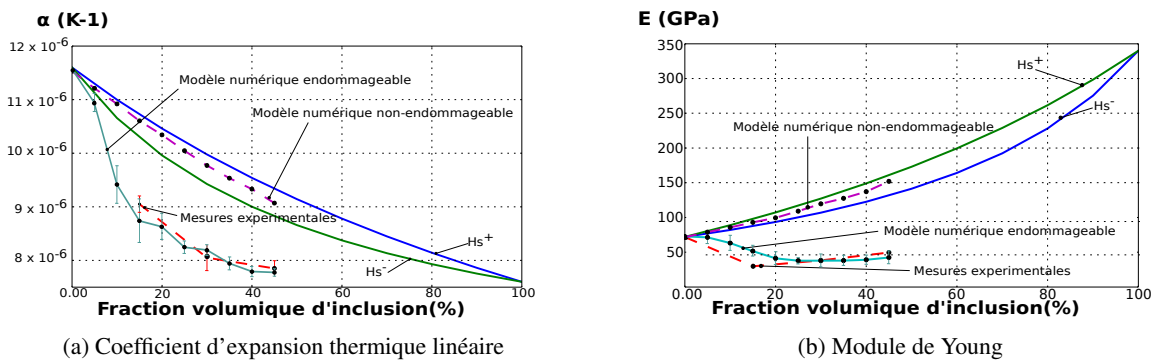


FIGURE 5 – Comparaison des résultats numériques (avec et sans propagation de fissure), expérimentaux et du modèle à borne d’H&S en fonction de la fraction volumique d’inclusion.

5 Conclusion

La simulation du comportement thermo-élastique endommageable à l'aide de la MED présente une contribution significative aux méthodes discrètes appliquées à la simulation des milieux continus hétérogènes. Le modèle MED proposé a d'abord été validé en fonction de solutions analytiques bien établies. Dans le cas de matériaux non endommagés, les résultats numériques montrent un bon niveau de conformité avec les prédictions H&S ce qui permet de valider le modèle numérique thermomécanique élastique proposé. Toutefois, ces modèles sont limités aux conditions où les matériaux ne sont pas endommagés au cours de cyclage thermique. La méthode numérique développée permet de résoudre ce problème en prenant en compte la fissuration fragile de la matrice. Ainsi, cette méthode permet de prédire (i) le niveau de dommage généré par le cyclage thermique sur des matériaux qui présentent un différentiel de dilatation thermique et (ii) les paramètres thermomécaniques apparents tels que le module de Young et le CET. En outre, cette étude numérique confirme que les dommages d'origines thermiques à l'échelle de la microstructure ont une grande influence sur les paramètres thermomécaniques à l'échelle macroscopique.

Afin de prendre en compte de cas plus complexes et d'améliorer la description physique des phénomènes d'endommagement thermique, il est envisagé d'améliorer le modèle proposé en prenant en compte : les refermetures de fissures, les décohésions inclusion-matrice et la propagation de la chaleur. Ainsi, des applications possibles sont la prédiction aux chocs thermiques ou bien l'étude du comportement mécanique non-linéaire de ces matériaux endommagés. Le modèle développé pourra ainsi être appliqué à une grande classe de matériaux fragiles hétérogènes : géomatériaux, matériaux de génie civil, céramiques, réfractaires, etc. Ces prédictions pourront aider alors les scientifiques à développer de nouveaux matériaux innovant basés sur des microstructures contrôlées.

Références

- [1] Zvi Hashin and Shmuel Shtrikman. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11(2) :127–140, 1963.
- [2] N Tessier-Doyen, JC Glandus, and M Huger. Untypical young's modulus evolution of model refractories at high temperature. *Journal of the European Ceramic Society*, 26(3) :289–295, 2006.
- [3] S. Hentz, F. V. Donzé, and L. Daudeville. Discrete element modelling of concrete submitted to dynamic loading at high strain rates. *Computers & Structures*, 82(29-30) :2509–2524, 2004.
- [4] A. Bobet, A. Fakhimi, S. Johnson, J. Morris, F. Tonon, and M. R. Yeung. Numerical models in discontinuous media : Review of advances for rock mechanics applications. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 135(11) :1547–1561, 2009.
- [5] Y. Tan, D. Yang, and Y. Sheng. Discrete element method (dem) modeling of fracture and damage in the machining process of polycrystalline sic. *Journal of the European Ceramic Society*, 29(6) :1029–1037, 2009.
- [6] D.O. Potyondy and P. A. Cundall. A bonded-particle model for rock. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 41(8) :1329–1364, 2004. Rock Mechanics Results from the Underground Research Laboratory, Canada.
- [7] D. Andre, J.L. Charles, and I. Iordanoff. *3D Discrete Element Workbench for Highly Dynamic Thermo-mechanical Analysis : Gran00*. Wiley, 2015.
- [8] Laurent Mahéo, Vincent Grolleau, and Gérard Rio. Damping efficiency of the tchamwa-wielgosz explicit dissipative scheme under instantaneous loading conditions. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(11-12) :722–732, 2009.
- [9] Damien André, Ivan Iordanoff, Jean luc Charles, and Jérôme Néauport. Discrete element method to simulate continuous material by using the cohesive beam model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 213–216(0) :113 – 125, 2012.
- [10] Damien André, Mohamed Jebahi, Ivan Iordanoff, Jean luc Charles, and Jérôme Néauport. Using the discrete element method to simulate brittle fracture in the indentation of a silica glass with a blunt indenter. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 265(0) :136 – 147, 2013.