

Modélisation de la microstructure de composites particuliers : Application à l'homogénéisation en conduction thermique

A. Couture^{1,2}, V. François², J.-C. Cuillière², Ph. Pilvin¹

¹ IRDL, Université de Bretagne-Sud, France, {Adrien.Couture, Philippe.Pilvin}@univ-ubs.fr

² ERICCA, Université du Québec à Trois-Rivières, Canada, {Vincent.Francois, Jean-Christophe.Cuilliere}@uqtr.ca

Résumé — L'objectif de cet article est de proposer une démarche pour prendre en compte la présence d'inclusions sur la conductivité thermique de composites particuliers et d'analyser statistiquement ces résultats par des calculs éléments finis sur des microstructures génériques engendrées par des outils de CAO. L'analyse est fondée sur la notion de VES (Volumes Élémentaires Statistiques) qui permet en augmentant le nombre de calculs d'estimer les variabilités des propriétés macroscopiques des composites. Cette démarche est mise en œuvre pour une première application pour des composites chaux-chênevotte avec des particules alignées.

Mots clefs — Conductivité thermique, Composites particuliers, Homogénéisation.

1. Introduction

Depuis plusieurs années les bétons de chanvre suscitent de nombreux développements tant au niveau des propriétés thermiques que mécaniques. Ils constituent un matériau de construction prometteur puisqu'ils présentent le double avantage d'être performant sur le plan thermique, lors de leur utilisation, et sur le plan environnemental, dans la globalité de leur cycle de vie. À terme, l'objectif de ces travaux est de modéliser l'effet des inclusions végétales sur la conductivité thermique de cette classe de matériaux par une approche numérique en s'appuyant sur une description statistique de la forme et des orientations des particules de chènevotte. Pour cet article, on étudie une configuration particulière où les particules, de forme cylindrique, sont alignées selon une même direction.

1.1. Composites chaux-chanvre : description géométrique et modélisation

Les propriétés d'isolation thermique des composites chaux-chênevotte sont liées à la forme des particules de chènevotte (élancement compris entre 3 et 8) et à leur orientation dans la matrice de chaux. Certains procédés d'élaboration utilisent un pré-compactage pour augmenter les propriétés mécaniques [11]. Dans cette situation, les particules ne sont plus distribuées de façon isotrope et le composite présente à l'échelle macroscopique une conductivité thermique anisotrope. La Figure 1 illustre cet aspect pour un composite globalement isotrope transverse caractérisé par deux coefficients de conductivité. Pour ces résultats expérimentaux [11], on observe jusqu'à un rapport d'anisotropie de 2 en fonction de la formulation du composite. On note également une certaine dispersion des mesures de conductivité liée à la taille des volumes étudiés souvent inférieure au VER « théorique ». Cette dispersion expérimentale est induite par la variabilité naturelle des tiges de chanvre mais également par les dimensions des échantillons utilisés lors des mesures. A moyen terme, ce type de modélisation a pour objectif de prévoir ces variabilités via la simulation numérique.

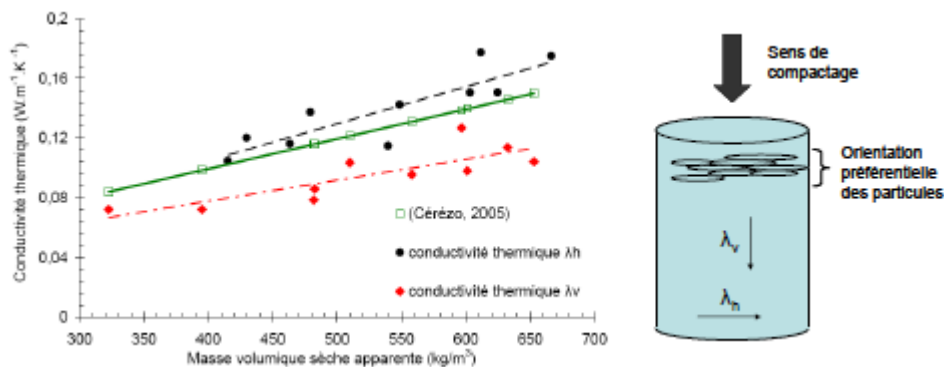


Figure 1 – Influence du compactage sur l’anisotropie de conduction thermique [11]

Si l’on connaît les propriétés des constituants du composite, la forme et la distribution spatiale des particules, il est possible de modéliser par éléments finis ou par d’autres approches numériques ces matériaux. Cependant, les moyens de calcul actuels ne permettent pas de décrire en détail des volumes élémentaires constitués de plusieurs milliers de particules. Une approche possible est de conduire des calculs sur des volumes élémentaires réduits (VES) contenant plusieurs dizaines de particules dont la représentativité statistique peut être vérifiée à posteriori en multipliant le nombre d’analyses (typiquement quelques centaines) [14]. La figure 2 montre des exemples de VES avec des particules ellipsoïdales de révolution et de même élanement. La distribution de cet ensemble de particules peut être décrite par des tenseurs d’orientations qu’il est possible d’estimer expérimentalement par des analyses d’images sur des sections 2D ou par tomographie 3D.

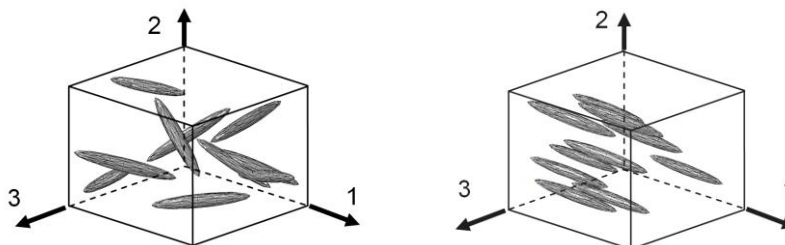


Figure 2 – Échantillons cubiques contenant quelques dizaines de particules : à droite, orientations aléatoires ; à gauche orientations alignées

Comme illustré sur la Figure 3, la forme des particules de chènevotte est assez complexe. Mais, il est possible par des techniques d’analyses d’images classiques d’approcher ces formes par des ellipses en 2D et des ellipsoïdes en 3D [13]. On peut donc ainsi disposer d’informations statistiques sur la forme et l’élanement des particules qui permettront de contrôler la représentativité d’un ensemble de VES. Les porosités visibles sur la Figure 3a peuvent également être intégrées dans la modélisation des propriétés thermiques et mécaniques du liant.

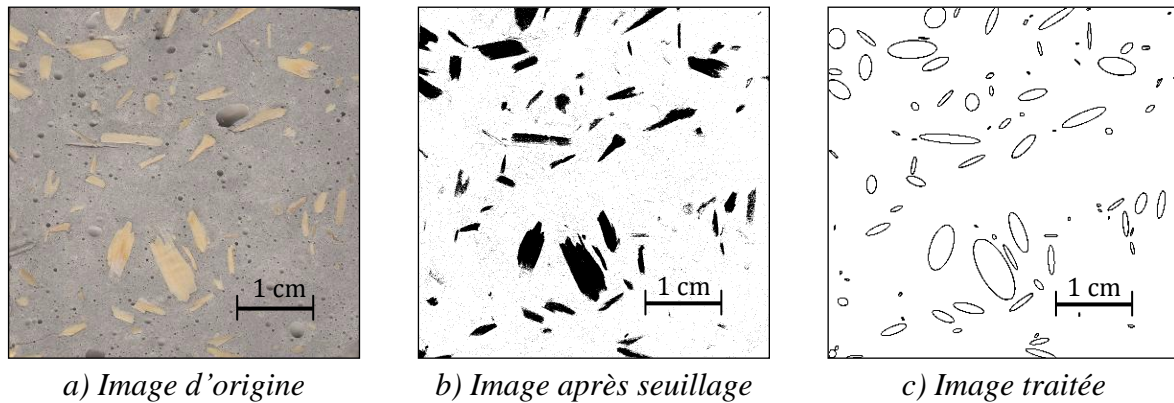


Figure 3 – Traitement par analyse d’images sur coupe 2D pour approcher la forme et l’orientation des particules de chènevotte par des ellipses orientées [13]

2. Maillages éléments finis de volumes statistiques

2.1. Démarche retenue

La représentation par éléments finis d'un volume élémentaire statistique débute par la génération de la morphologie de la microstructure. La distribution spatiale des particules, leurs orientations et leurs dimensions, issues de mesures expérimentales, doivent être prises en compte afin de représenter le matériau le plus fidèlement possible. Pour des particules sphériques, des premiers résultats ont été obtenus en disposant aléatoirement des particules sphériques à l'aide de l'algorithme de Donev [5] dans la thèse de Pham [13]. Afin de rendre plus réaliste le modèle éléments finis d'un VES pour ces composites, il est nécessaire de prendre en compte l'élanement des particules de chènevotte. Pour cela, une méthode de positionnement des particules basée sur la simulation de systèmes multi-corps est envisagée en utilisant le logiciel ProjectChrono [15]. La méthode consiste à remplir le VES de particules en suivant une distribution de positions, d'orientations et de tailles puis graduellement déplacer les particules qui se chevauchent. Une vérification est ensuite effectuée afin d'assurer que les distributions des positions et des orientations respectent les informations disponibles sur le composite. La figure 4 illustre une disposition de particules de forme cylindrique (Fvol 18%) et de porosités sphériques (Fvol 0,17%) obtenue avec ce logiciel.

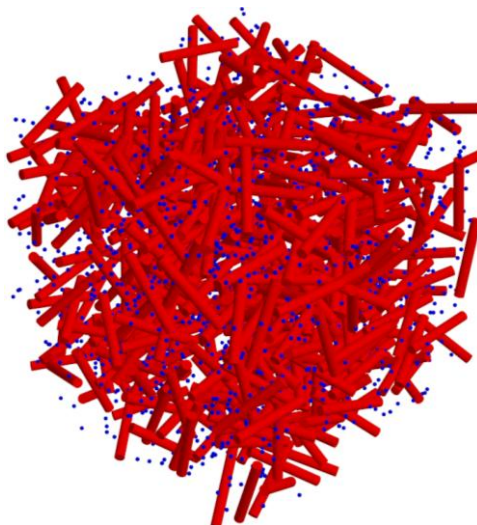


Figure 4 – particules cylindriques (Fvol 18%) et porosités sphériques (Fvol 0,17%)

Une fois les particules positionnées, la microstructure est modélisée à l'aide d'outils de CAO. L'Équipe de Recherche en Intégration Cao Calcul (ERICCA) de l'Université du Québec à Trois-Rivières a développé une plateforme numérique basée sur un modèle de topologie unifié [4] qui permet de réaliser des maillages complexes à partir d'un modèle CAO. Les particules et la matrice sont représentées selon un modèle BREP (Boundary REPresentation) [10] c'est-à-dire comme des solides comportant une topologie sous forme de faces, arêtes et sommets. La structure BREP d'un solide peut être représentée comme un arbre hiérarchique d'éléments topologiques ayant à la base l'enveloppe du solide (figure 5). L'enveloppe est composée d'une ou de plusieurs faces cousues entre elles, de façon à fermer l'enveloppe. Afin de distinguer l'intérieur de l'extérieur du solide, les faces sont dotées d'une orientation telle que les normales en tous points pointent vers l'extérieur du solide. La face est composée d'une boucle qui délimite son contour sur la surface qui définit sa forme géométrique. Cette boucle est composée d'une ou de plusieurs arêtes reliées entre elles de façon à ce qu'elle soit fermée. Les arêtes sont finalement composées de deux sommets qui forment ses extrémités en délimitant la portion de courbe qui définit la géométrie. Afin de distinguer l'intérieur de l'extérieur de la face, les arêtes sont dotées elles aussi d'une orientation telle que les tangentes en tous points de la courbe pointent vers l'extérieur de la face. Cette modélisation est sous tendue par la librairie open-source OpenCascade [12] qui est encapsulée dans la plateforme de développement. Tous les éléments topologiques communs à deux solides sont fusionnés entre eux à l'aide d'éléments de co-topologie qui permettent de préserver le sens et la connectivité du modèle (figure 6). Ainsi, un sommet commun à deux ou plusieurs arêtes est défini qu'une seule fois et partagé à l'aide de co-sommets à chaque arêtes le possédant. Deux faces cousues par une arête auront chacune une co-arête qui fera référence à l'arête de jonction mais auront une direction différente de façon à préserver le sens des deux faces. Il en va ainsi pour une face commune à deux solides. Cette face sera, pour chaque solide, représentée par une co-face qui fera référence à la face commune mais qui possédera sa propre orientation de façon à préserver la définition de l'intérieur et de l'extérieur du solide. Cette notion de co-topologie permet ainsi l'unicité de la représentation topologique tout en préservant la connectivité et l'orientation des différents solides. Le concept de co-topologie est intégré à la plateforme numérique et permet de représenter le modèle particules/matrice comme un modèle multi-corps tout en préservant les liens d'interface particules/matrice.

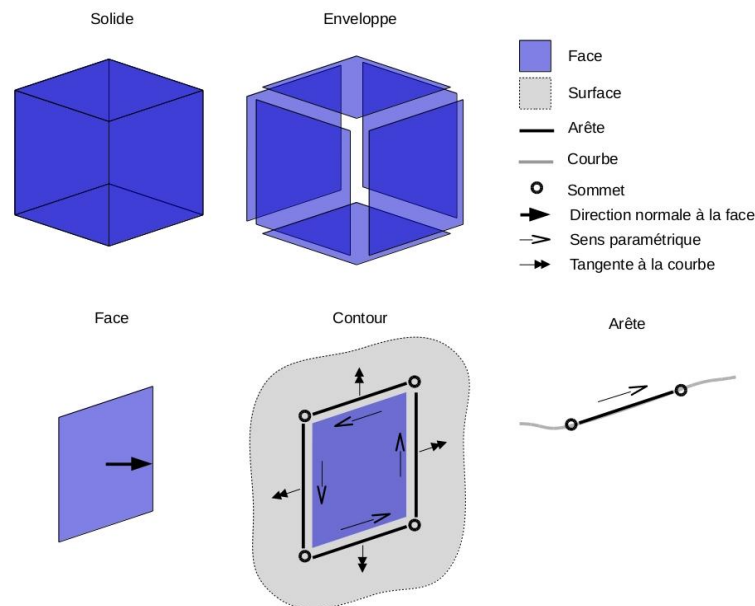


Figure 5 – structure du BREP (Boundary REPresentation)

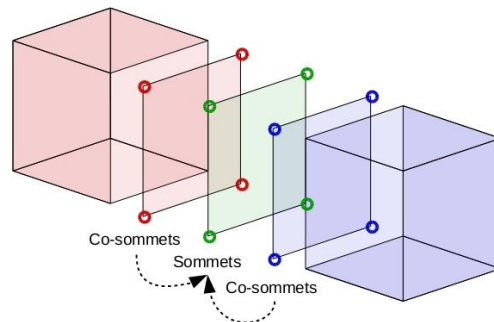
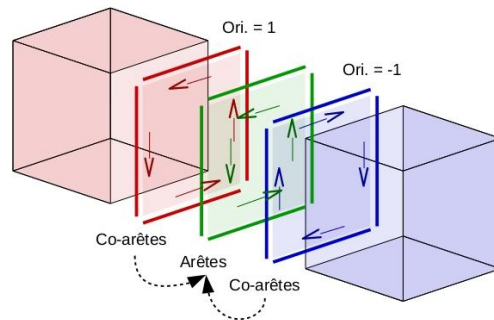
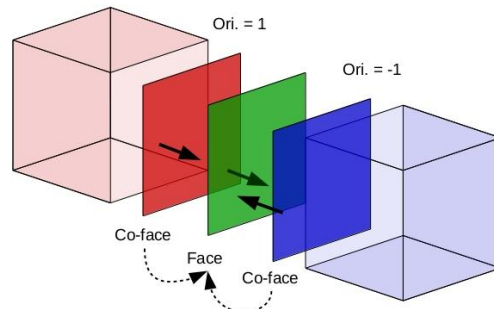
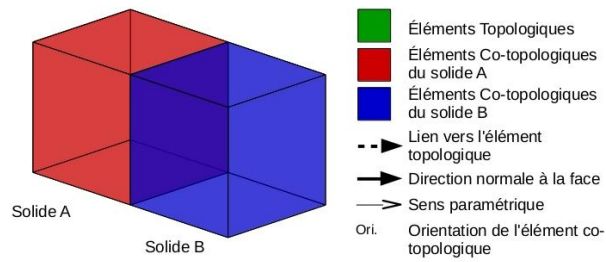


Figure 6 – Concept de co-topologie

Afin d'obtenir un maillage de bonne qualité avec un nombre d'éléments raisonnable, des outils de pré-optimisation de la densité nodale sont utilisés. Ces outils permettent de générer des cartes de tailles d'éléments pour guider le mailleur.

La pré-optimisation s'effectue selon deux critères :

- Représenter raisonnablement les courbures des arêtes et des faces par la discrétisation utilisée ;
- Assurer un nombre minimal d'éléments entre deux particules ou entre une particule et une frontière du VES.

En effet, dans le cas où les éléments employés pour discrétiser le domaine sont linéaires, une arête ou une surface courbe sera plus ou moins bien approximée selon la taille des éléments utilisés pour représenter la région courbée. L'outil de pré-optimisation détermine la taille optimale des éléments nécessaire au respect de la courbure. Cette taille dépend de la distance maximale admissible entre les éléments de maillage et la frontière et cette distance est spécifiée par l'utilisateur [6]. Le respect d'un nombre minimal d'éléments entre deux particules est quant à lui assuré en calculant la distance minimale entre les particules et en modifiant localement la carte de taille lorsque la distance est trop courte et que l'écart nodal initial n'engendre pas le nombre minimal d'éléments requis.

Le maillage d'un modèle multi-corps doit tenir compte de la solidarité des faces, arêtes et sommets de différents corps afin d'assurer la conformité du maillage aux interfaces entre les particules et la matrice. Le concept de co-topologie joue un rôle essentiel dans le processus de maillage de ces interfaces. Le maillage de la microstructure débute par le maillage des sommets et consiste à créer un nœud à chacun de ces sommets. Grâce aux co-sommets, on ne crée qu'une seule fois le nœud associé au sommet commun à plusieurs arêtes. Les arêtes sont maillées par la suite en utilisant la carte de taille préalablement établie afin d'optimiser le positionnement des nœuds pour prendre en compte la courbure de l'arête [2]. La connectivité assurée par les co-arêtes permet de mailler qu'une seule fois l'arête commune à deux faces et permet d'assurer la conformité du maillage 1D. Un mailleur de type frontal [8] est employé pour mailler les faces selon l'écart nodal prescrit par la carte de tailles [3]. Les fronts sont initiés à partir des segments des arêtes. Le maillage d'une face commune à deux solides est effectué qu'une seule fois grâce aux co-faces ce qui assure la conformité du maillage 2D. Le maillage des volumes est finalement généré à l'aide d'un mailleur frontal volumique qui cherche à remplir les volumes en générant des fronts de nouveaux éléments suivant l'écart nodal prescrit par la carte de tailles [7]. Ces fronts sont initiés aux triangles des faces et progressent au travers du volume jusqu'au moment où les fronts se rencontrent et se fusionnent. Afin d'accélérer le processus de maillage, il est possible de mailler certaines particules comme des cylindres non coupés à l'aide de schémas de maillage préétablis. Ces schémas permettent de simultanément mailler les sommets, arêtes, faces et le volume de la particule. Ils doivent cependant être utilisés avant de mailler la matrice afin d'assurer la conformité du maillage final. Finalement, une étape d'optimisation par relocalisation de nœuds et permutation de segments est appliquée afin d'améliorer la qualité du maillage.

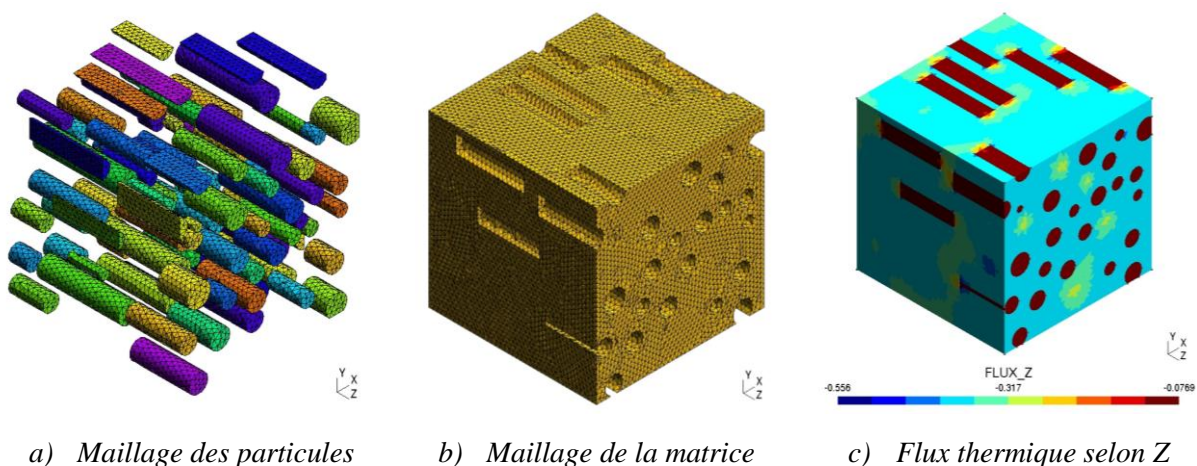


Figure 7 – exemple de maillage obtenu avec des particules cylindriques d'élancement 4 à diamètre variable et résultats obtenus avec Code-Aster : isovaleurs de la composante Z du flux thermique ($W.m^{-2}$) pour un gradient de température de $1 K.m^{-1}$ imposé aux faces de normale Z

Les calculs thermiques ou mécaniques sont effectués en utilisant le logiciel Code_Aster [1]. Le transfert des données du modèle éléments finis de la plateforme numérique vers Code_Aster est effectué de façon automatique. Les résultats de calcul sont ensuite transférés automatiquement de Code_Aster vers la plateforme numérique pour le post-traitement. Les résultats peuvent enfin être visualisés à l'aide du logiciel GMSH [9].

3. Résultats et discussions

3.1. Résultats des analyses par éléments finis

La démarche présentée a été appliquée à des composites avec des particules cylindriques de révolution (ratio longueur/diamètre=4) pour des fractions volumiques variant de 10% à 15%. Ces particules sont alignées selon l'axe Z mais disposées de façon aléatoire. Les conductivités de la matrice ($0,380 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$) et des particules ($0,088 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$), supposées isotropes, sont choisies en cohérence avec [12]. Les calculs sont conduits en régime stationnaire en imposant une différence de température entre deux faces opposées et des conditions de flux nul sur les autres faces. Ainsi, on accède aux 3 composantes du tenseur de conductivité effective pour chaque VES. Un facteur de dispersion sur la taille des particules a été introduit pour étudier l'influence de ce paramètre sur les résultats. Des essais ont été réalisés avec des particules à diamètre constant (écart-type : $\sigma_D = 0$) et à diamètre variable selon une distribution gaussienne ($\sigma_D = 20\%$ diamètre). Pour chaque condition, une dizaine de réalisations indépendantes ont permis le calcul des moyennes et des écarts-type des conductivités effectives de la table 1.

Table 1 – calculs avec 10 réalisations indépendantes

Fvol	Cond/X ($\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$)	Cond/Y ($\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$)	Cond/Z ($\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$)
10% $\sigma_D = 0$	0,3393 (0,0005)	0,3393 (0,0004)	0,3493 (0,0002)
10% $\sigma_D = 20\%$ Dia.	0,3390 (0,0006)	0,3388 (0,0008)	0,3491 (0,0003)
15% $\sigma_D = 0$	0,3209 (0,0005)	0,3211 (0,0006)	0,3344 (0,0002)
15% $\sigma_D = 20\%$ Dia.	0,3205 (0,0007)	0,3204 (0,0009)	0,3342 (0,0005)

3.2. Conclusions

Ces premiers résultats (Table 1) confirment le caractère isotrope transverse du tenseur de conductivité thermique de tels composites. On constate que la conductivité effective, dans la direction des particules, est supérieure aux conductivités transverses et que l'anisotropie croît avec la fraction volumique de chènevotte. L'ajout de particules contribue à diminuer la conductivité thermique effective du matériau en augmentant son pouvoir isolant. La variabilité sur la taille des particules fait augmenter légèrement l'écart-type sur le tenseur de conductivité effective. Mais la dispersion de la conductivité intrinsèque des particules de chènevotte, aisément analysable par cette approche, a sans doute une influence plus forte sur les propriétés macroscopiques.

3.3. Références bibliographiques

- [1] <http://www.code-aster.org>
- [2] J.-C. Cuillière, *A direct method for the automatic discretization of 3D parametric curves*, Computer-Aided Design, 639-647, 1997
- [3] J.-C. Cuillière, *An adaptive method for the automatic triangulation of 3D parametric surfaces*, Computer-Aided Design, 139-149, 1998
- [4] J.-C. Cuillière, V. Francois, *Integration of CAD, FEA and Topology Optimization through a Unified Topological Model*, Computer-Aided Design and Applications, 493-508, 2014
- [5] A. Donev, S. Torquato, F. H. Stillinger, *Neighbor list collision-driven molecular dynamics simulation for nonspherical hard particles. I. Algorithmic details*, Journal of Computational Physics, 737-764, 2005
- [6] V. Francois, J.-C. Cuillière, *Automatic mesh pre-optimization based on the geometric discretization error*, Advances in Engineering Software, Elsevier, 763-774, 2000
- [7] V. Francois, J.-C. Cuillière, *An a priori adaptive 3D advancing front mesh generator integrated to solid modeling*, Recent Advances in Integrated Design and Manufacturing in Mechanical Engineering, 337-346, 2003
- [8] P. L. Frey, P.-L. George, *Mesh Generation*, 2nd Edition, Wiley, 2008
- [9] C. Geuzaine, J.-F. Remacle, *Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1309-1331, 2009.
- [10] M. E. Mortenson, *Geometric Modeling*, 3rd Edition, Industrial Press, 2006
- [11] T. T. Nguyen, V. Picandet, P. Carré, T. Lecompte, S. Amziane, C. Baley, *Effect of compaction on mechanical and thermal properties of hemp concrete*, European Journal of Environmental and Civil Engineering, 545-560, 2010
- [12] <https://www.opencascade.com/>
- [13] T. H. Pham, *Modélisation multi-échelles des propriétés thermiques et élastiques de composites chaux-chanvre*, thèse de doctorat, Université de Bretagne-Sud, 2014.
- [14] P. Pilvin, F. Onimus, R. Brenner, S. Pascal, X. Feaugas, K. Sai, *Finite element assessment of an affine self-consistent model for hexagonal polycrystals*, European Journal of Mechanics - A/Solids, 345-356, 2017
- [15] <https://projectchrono.org>