

Simulation numérique de la croissance de cavités dans un élastomère sous décompression de gaz

M. Gueguen¹, JC Grandidier¹

¹ Institut Pprime, ENSMA Poitiers{mikael.gueguen}@ensma.fr

Résumé — le travail présente un modèle élément fini pour prendre en compte les effets de couplage diffusio mécanique sur les cavités apparaissant dans les matériaux élastomères sous décompression de gaz. Il s'agit de modéliser les interactions à l'interface cavité/milieu continu d'une part et de prendre en compte les effets de tension de surface d'autres part.

Mots clés — éléments finis, couplage diffusion/mécanique, tension de surface

1 Introduction

Les matériaux élastomères sont couramment utilisés dans diverses applications industrielles, notamment pour garantir une étanchéité en présence d'un milieu gazeux. Un exemple concret d'utilisation d'élastomères dans ces conditions concerne les équipements de station de remplissage d'hydrogène. Dans ce contexte, le matériau est soumis à de sévères chargements cycliques, mécaniques, thermiques et en diffusion de gaz. Durant ces cycles, une partie de l'hydrogène diffuse dans l'élastomère et le retour brusque à la pression atmosphérique peut sous certaines conditions, endommager le joint par la formation de cavités. Le phénomène de cavitation des élastomères a été mis en évidence depuis plusieurs décennies et peut finalement conduire à la ruine du matériau. Plusieurs études ont montré que les observations concernant la cavitation induite par du gaz ne pouvaient pas entièrement être expliquées avec des considérations purement mécaniques et que la diffusion de gaz avait un rôle dans l'endommagement. L'objectif du travail est de mettre en oeuvre une modélisation permettant de mieux comprendre le rôle du chargement mécanique et de la diffusion de gaz sur l'évolution de ces cavités, que nous considérons pré existante. Il s'agit d'étudier les échanges gazeux entre cette cavité et son milieu continu environnant. Un premier modèle numérique 2D sur la base des travaux de Stewart a permis de décrire l'évolution couplée entre l'équilibre mécanique et la diffusion de gaz d'une cavité sur un cycle complet de chargement [1]. Une seconde modélisation 3D a été mise en oeuvre par la méthode des éléments finis, prenant en compte une cavité maillé et disposant d'un comportement matériau "solide" [2].

Le modèle présenté prend en compte simultanément une dépendance à la pression dans une cavité non-maillé, assujettie à des modifications possibles de volume et de forme. L'interaction gaz/solide s'effectue numériquement par le traitement d'une condition au limite multiphysique complexe. Il doit aussi intégrer la tension superficielle à l'interface cavité-élastomère, qui peut être non-négligeable pour des tailles de cavités suffisamment faibles. Cet effet a été étudié sur des applications différentes par des modélisations éléments finis [3], [4].

2 Modélisation

Le modèle vise à étudier la réponse d'une cavité sphérique préexistante au coeur d'un échantillon macroscopique soumis à un chargement de saturation en gaz, puis décompression (voir figure 1). La sphère creuse est placée au centre du milieu continu 3D discrétisé par la méthode des éléments finis.

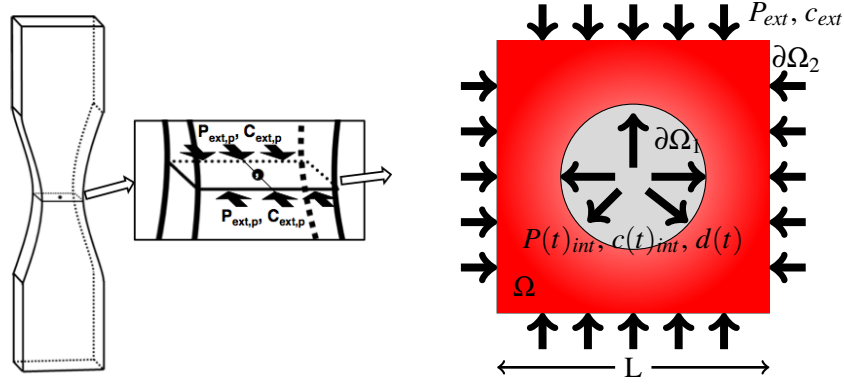


FIGURE 1 – Représentation multi-échelle du problème : échantillon soumis à une concentration et pression mécanique en gaz sur ses surfaces externes ; schématisation par une sphère creuse au centre de cet échantillon dépendant des conditions externes (en pression, concentration, et dimensions)

2.1 Effets de couplage à l'interface cavité/milieu continu

2.1.1 Modélisation éléments finis

Pour résoudre le système d'équations mécanique et de diffusion de gaz, nous utilisons la forme faible correspondante aux principes des puissances virtuelles avec une partie interne et une seconde externe correspondant aux effets de surface.

$$\int_{\Omega} \sigma^{ij} \mathbf{D}_{ij}^* dV - \int_{\partial\Omega} f_s^i V_i^* dS = 0 \quad (1)$$

$$\int_{\Omega} (D \nabla c \nabla c^* + \dot{c} c^*) dV - \int_{\partial\Omega} (\Phi \cdot \mathbf{n}) c^* dS = 0 \quad (2)$$

On résoud le système d'équation par la méthodes des éléments finis. Le déplacement \underline{u} et la concentration c sont discrétisés par des fonctions d'interpolation liées à l'élément fini (dans notre cas, nous utilisons une interpolation isoparamétrique entre les fonctions d'interpolation de diffusion et mécanique, soit $\phi_r = \varphi_r$). Après discrétisation, les équations couplées (1, 2) sont résolues par une méthode itérative de type Newton-Raphson. Le comportement matériau du milieu continu est considéré hyperélastique de type Neo-Hooke, avec la prise en compte des effets de dilatation du à la diffusion de gaz $\epsilon_{total} = \epsilon_{meca} + \epsilon_{diff}$; $\epsilon_{diff} = \alpha_c \Delta c$, et l'utilisation de la loi de Henry pour relier la concentration dissoute de gaz avec la pression de gaz à l'extérieur du milieu continu $c = s_g P$ via la solubilité s_g .

$$\begin{bmatrix} [\mathbf{K}]_{u^{ar}} & [\mathbf{K}]_{u^{ar}c^r} \\ [\mathbf{K}]_{c^r u^{ar}} & [\mathbf{K}]_{c^r} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Delta u^{ar} \\ \Delta c^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{R}_{meca} \\ \mathcal{R}_{diff} \end{pmatrix} \quad (3)$$

Les termes de couplage $[\mathbf{K}]_{u^{ar}c^r}$ dans le système matriciel (eq. 3) prennent en compte les effets de dilatation du à la diffusion de gaz.

2.1.2 Prise en compte des échanges de flux de matière entre le milieu continu et la cavité

Les échanges de flux de matière entre le milieu continu et la cavité vont d'une part être pris en compte par une contribution sur l'équilibre mécanique par l'effet d'une pression mécanique surfacique sur la surface $\partial\Omega_1$ dépendant de l'apport en gaz dans la cavité (eq 4) :

$$\mathcal{P}_{ext}^{interac} = \int_{\partial\Omega_1} P_{int}(t) \underline{n} \cdot \underline{V} dS \quad (4)$$

Dans la cavité, on considère la loi des gaz parfaits (eq 5) pour relier la pression mécanique aux nombre de moles \mathbf{n} de gaz à l'intérieur. Le nombre de moles à l'intérieur dépend de la diffusion fickienne et du flux de gaz \underline{J} dans le milieu continu calculé sur les éléments de surface (eq. 7), et le volume V dépend de l'équilibre mécanique du milieu continu (eq. 6) :

$$P_{int}(t) = \frac{n(t)RT}{V(t)} \quad (5)$$

$$V(t) = f(u_{\partial\Omega_1}(t)) \quad (6)$$

$$\mathbf{n}(t) = \mathbf{n}(0) + \int_t \int_{\partial\Omega_1} \underline{J} \cdot \underline{n} dS \quad (7)$$

Cela se traduit dans le modèle éléments finis par le calcul du nombre de moles à partir du flux intégré sur l'ensemble des éléments de surface délimitant le volume de la cavité (équation 8) :

$$\mathbf{n}(t + \Delta t) = \mathbf{n}(t) + \sum_e^{nbel\partial\Omega_1} \left(\sum_i^{nbpti} J_i \cdot \underline{n}_i w_i \right) S_e \Delta t \quad (8)$$

$$\underline{n} = \frac{d\mathbf{x} \wedge d\mathbf{y}}{\|d\mathbf{x} \wedge d\mathbf{y}\|} \quad \text{vecteur normal à l'élément de surface} \quad (9)$$

$$\underline{J} = -D \frac{\partial c}{\partial X_i} = -D c_r \frac{\partial \phi^r}{\partial \eta_j} \frac{\partial \eta_j}{\partial X_i} \quad \text{vecteur flux de gaz à l'élément de surface} \quad (10)$$

Une fois la variable P_{int} réactualisée, cette grandeur est prise en compte dans l'équilibre mécanique d'une part (effet de surface) et par des conditions de type dirichlet sur l'équilibre de diffusion d'autre part à partir de la loi de Henry.

2.2 Prise en compte de la tension superficielle

On cherche à calculer la contribution extérieure correspondant à l'ajout de la tension superficielle sur les conditions surfacique mécanique sur $\partial\Omega_1$:

$$\mathcal{P}_{ext}^{tenssup} = \int_{\partial\Omega_1} 2H\gamma \underline{n} \cdot \underline{V}^* dS$$

Cette contribution vient de l'équilibre de Laplace-Young à l'interface $\partial\Omega_1$: $\boldsymbol{\sigma} \underline{n} = -P_{int} \underline{n} + 2H\gamma \underline{n}$. H est la courbure moyenne de la cavité et γ le coefficient de tension superficielle. \underline{V}^* est le champ test de déplacement cinématiquement admissible compatible avec les conditions aux limites sur le milieu continu du domaine éléments finis. On peut calculer $H = \nabla_s \cdot \underline{n}$ avec $\nabla_s = \mathbf{I} - \underline{n} \otimes \underline{n} \nabla$ l'opérateur de gradient de surface[3]. Dans notre cas, le calcul de la courbure moyenne H_n est déterminée (équation 11) en chaque noeud n sur la surface $\partial\Omega_1$ à partir des coordonnées réactualisées.

$$H^n = \text{avg} \left(\sum_a^{\text{aretes de } n} H_a \right) \quad ; \quad H_a = l_a * \theta_a \quad (11)$$

θ_a est l'angle dièdre de l'arête a et l_a est la longueur de l'arête.

La prise en compte de la tension de surface sur les conditions aux bords de la cavité se fait à partir d'éléments finis surfacique de type membrane. A chaque itération de l'équilibre global, la courbure est recalculée sur la base des déplacements réactualisés sur chaque noeud de la surface et permet le calcul du vecteur chargement pour chaque point d'intégration des éléments de surface :

$$\Upsilon = -2H\gamma \underline{n} J_S \quad \text{avec} \quad H = H^n \varphi_n \quad ; \quad J_S = \left\| \frac{\partial X}{\partial s_1} \wedge \frac{\partial X}{\partial s_2} \right\|$$

3 Résultats

3.1 Cas tests : Modélisation de l'interaction gaz/solide

Pour illustrer le modèle proposé sur l'interaction gaz/solide présenté en 2.1, une première simulation comportant une cavité sphérique dans un milieu continu élastique et subissant un cycle de saturation/décompression sur les bords externes $\partial\Omega_2$ du modèle (voir figure 1) est mis en oeuvre. La modélisation est couplée par l'effet des variations de déplacement sur la cavité et la dilatation due à la diffusion

de gaz dans le milieu continu. Elle ne prend pas en compte les effets de tensions de surface. Nous supposons que le gaz ne modifie pas le comportement élastique du matériau. Les paramètres matériaux et dimensions générales du modèle élément fini sont référencés dans le tableau 1. Enfin la relation entre la pression et la concentration de gaz est déduite de la loi de Henry avec une solubilité égale à l'unité.

TABLE 1 – Paramètres du modèle

largeur du VER L	20 mm
diamètre de la cavité d	200 nm
module young E	1000 MPa
coefficient de poisson ν	0.49
coefficient de dilatation α_c	$1 \cdot 10^{-5} \text{ MPa}^{-1}$
coefficient de diffusion D	$1 \cdot 10^{-3} \text{ mm}^2/\text{s}$
solubilité s_g	$1 \text{ mol}/\text{mm}^3/\text{MPa}$

La figure 2 montre le champ de concentration tridimensionnel sur le matériau aux premiers instants de la décompression en gaz après la phase de saturation. Les premiers calculs montrent que la saturation/décompression en gaz et la pression interne dans la cavité suit l'évolution de la cinétique du cycle de chargement imposé (fig 3). Le chargement purement mécanique induit par la pression de gaz sur l'extérieur de l'éprouvette provoque une contraction de la cavité centrale aux premiers instants de la simulation. Ensuite lorsque le gaz diffuse dans la cavité, la pression interne à la cavité augmente, ce qui a tendance à faire croître celle-ci. On montre enfin l'effet de la décompression sur la variation de volume d'une part et la cinétique de pression d'autre part. Dans le cas d'une décompression rapide, la variation de volume est plus importante et plus fortement marqué. Cet effet est aussi quantifié par la somme des flux sur la surface de la cavité qui évolue brusquement dans le cas d'une décompression rapide au moment de la décompression (fig 3).

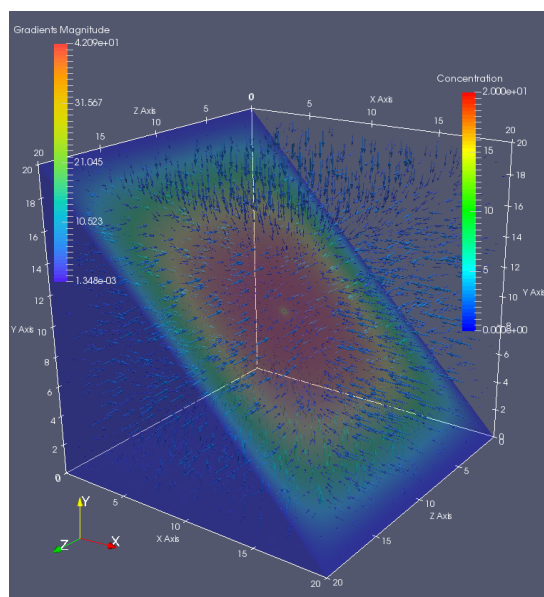


FIGURE 2 – Champ de concentration en gaz après le début de décompression ($t=11\text{s}$)

3.2 Cas tests : tension superficielle

L'effet de la tension superficielle présenté en 2.1 est montré par une première simulation représentant un milieu continu élastique comportant une cavité sphérique prenant en compte la tension superficielle. Le calcul est réalisé sur une cavité de rayon $R = 2.5 \text{ mm}$. La valeur de tension superficielle utilisée pour cette simulation est $\gamma = 10 \text{ N}\cdot\text{mm}^{-1}$. Les valeurs de la loi élastique sont données dans le tableau 1. L'effet

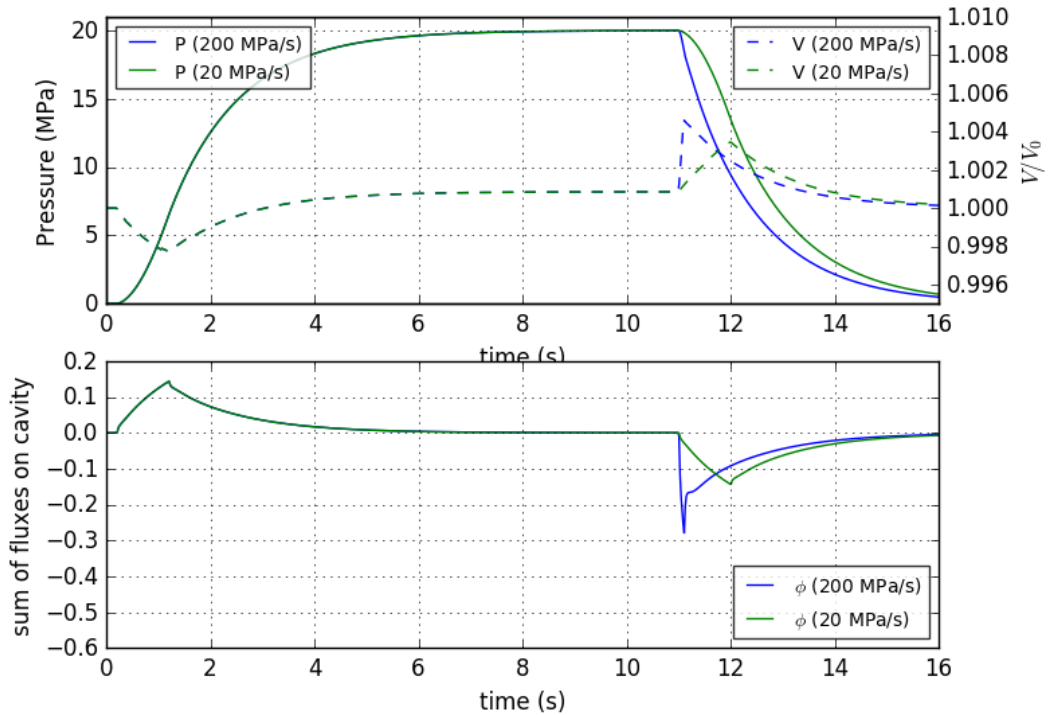


FIGURE 3 – Evolution de la pression, volume et flux dans la cavité au cours du temps : effet de la vitesse de décompression

de la tension superficielle est illustré par le champ de déplacement autour de la cavité correspondant à une rétraction de celle-ci (figure 4). On peut remarquer l'influence localisée du chargement lié à la tension de surface. Nous vérifions l'effet de la tension superficielle en calculant le volume de la cavité fonction du facteur de chargement. La valeur de la courbure moyenné sur l'ensemble des noeuds de la surface de la cavité calculée par l'algorithme utilisé est $H = 4.11 \cdot 10^{-1} mm^{-1}$ en accord avec la courbure théorique $H_0 = 1/R = 0.4 mm^{-1}$. Le volume de la cavité diminue en fonction du facteur de chargement, alors que la courbure augmente (figure 5), ce qui correspond à l'effet souhaité.

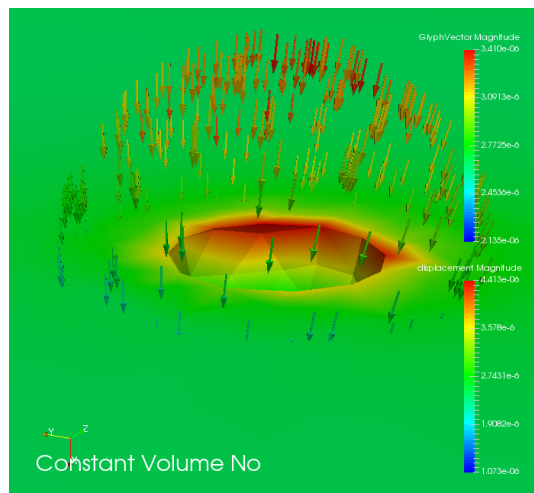


FIGURE 4 – Effet de la tension superficielle : 1/2 coupe autour de la cavité, isovaleurs de déplacement autour de la cavité induit par le chargement en tension superficielle ; les flèches (vecteur déplacement) illustrent la rétraction autour de la cavité.

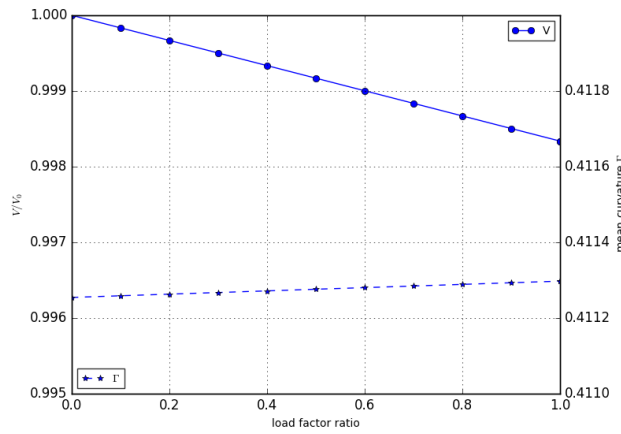


FIGURE 5 – Evolution du volume de la cavité et de la courbure moyennée sur les noeuds de la cavité

4 Conclusion

Le modèle présenté dans cette étude vise à intégrer les interactions mécanique et de diffusion de gaz sur une cavité sphérique dans un élastomère, dans le but de mieux comprendre et d'analyser le phénomène de cavitation dans les élastomères. Ces effets de surface sont implémentés dans un solveur éléments finis et prennent en compte simultanément une dépendance à la pression dans une cavité non-maillée sur l'équilibre mécanique et en diffusion de gaz d'une part et la tensions superficielle d'autre part. Les premiers résultats montrent les effets de cette interaction sur un cycle de saturation/décompression.

Références

- [1] J. Jaravel, S. Castagnet, J-C. Grandidier, M. Gueguen, *Experimental real-time tracking and diffusion/mechanics numerical simulation of cavitation in gas-saturated elastomers*, International Journal of Solids and Structures, 1314-1324, 2013.
- [2] O. Kane Diallo *Analyse morphologique des champs de cavités dans un élastomère sous décompression d'hydrogène*, Thèse ENSMA, 2015.
- [3] PH. Saksono, D. Perié *On finite element modelling of surface tension*, Computational Mechanics, 265-281, 2006.
- [4] H. Amin-El-Sayed, B. Souloumiac, J.M. Bergheau, J.B. Leblond *Prise en compte de la tension de surface dans la modélisation par éléments finis du bain de soudage*, CSMA 2015, 2015.