

# Modélisation par éléments discrets de l'endommagement généré par anisotropie de dilatation thermique d'une céramique réfractaire

D. André<sup>1</sup>, Q. Plede<sup>2</sup>, H. Ranganathan<sup>2,3</sup>, M. Mouiya<sup>2,4</sup>, N. Tessier-Doyen<sup>2</sup>, M. Huger<sup>2</sup>, R. Soth<sup>3</sup>, C. Wöhrmeyer<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Univ. Limoges, IRCER, UMR CNRS 7315, [damien.andre@unilim.fr](mailto:damien.andre@unilim.fr)

<sup>2</sup> Univ. Limoges, IRCER, UMR CNRS 7315

<sup>3</sup> Imerys Technology Center, 38090 Vaulx-Milieu, France

<sup>4</sup> Materials Science, Energy and Nanoengineering Department, UM6P, Ben Guerir, Morocco, [mossaab.mouiya@um6p.ma](mailto:mossaab.mouiya@um6p.ma)

**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. Certaines de ces microstructures peuvent être considérées comme constituées par des inclusions mono ou polycristallines liées entre elles par l'intermédiaire d'une matrice (vitreuse, cimentaire, etc.) 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 soit, au refroidissement de l'étape d'élaboration, soit lorsque celui-ci est soumis à un cyclage thermique. Dans d'autres cas, l'endommagement à l'échelle de la microstructure peut être généré sous l'effet de l'anisotropie de dilatation thermique intrinsèque des grains du matériau polycristallin. C'est ce dernier cas qui sera discuté ici. Cette étude propose de modéliser l'effet de l'anisotropie de dilatation thermique avec la méthode par éléments discrets puis d'étudier l'impact de cet endommagement sur des paramètres thermomécaniques macroscopiques. Les résultats numériques obtenus sont comparés à des observations expérimentales réalisées sur un matériau modèle.

**Mots clés** — éléments discrets, thermomécanique, endommagement, dilatation thermique

## 1 Introduction

Depuis les travaux antérieurs de Cundall et Strack [1], la Méthode des Éléments Discrets (MED) a été largement utilisée pour modéliser le comportement dynamique des milieux granulaires. Outre cette utilisation historique, une partie de la communauté MED se concentre sur une classe de problèmes qui sont souvent traités par des approches de mécanique des milieux continus. Plus particulièrement, un domaine de recherche intensif concerne la simulation des phénomènes de fissuration, y compris la fissuration diffuse, la localisation, la ramification ou la fragmentation qui se produisent dans des milieux fragiles ou quasi fragiles tels que les composites polymères [2], les roches [3], le béton [4], le verre [5] ou les céramiques [6]. Pour ces matériaux, l'utilisation de la MED et sa capacité à traiter des phénomènes discontinus grâce à sa formulation discrète suscite un intérêt croissant dans la communauté scientifique.

En effet, 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. La plupart de ces matériaux présentent de nombreuses microfissures résultant d'effet thermomécanique 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 influence sur leurs durées de vie en service.

## 2 Céramique modèle : le Titanate d'Aluminium (AT)

Le matériau de référence pour cette étude est le Titanate d'Aluminium  $\text{Al}_2\text{TiO}_5$  (AT) souvent utilisé dans des applications à haute température pour ses bonnes capacités à résister aux chocs thermiques. Cette aptitude est due à la présence d'un réseau de microfissures lui conférant une très bonne ténacité pour un matériau céramique [7]. La Figure 1 montre une micrographie du matériau AT. Sa microstructure est composée de grains monocristaux, plutôt de formes tabulaires (en gris clair sur la figure), qui sont enchâssés dans une matrice vitreuse (en gris foncé).

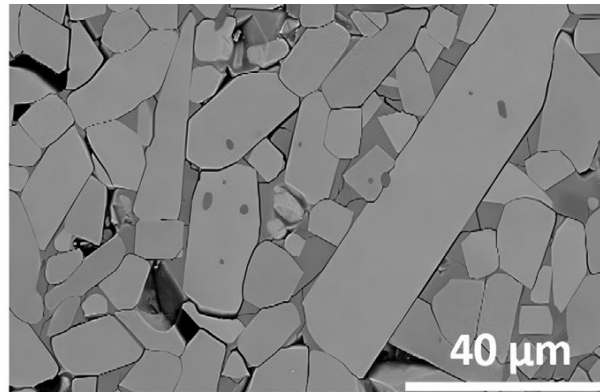


FIGURE 1 – Micrographie d'une céramique de Titanate d'Aluminium [7]

La particularité des grains de Titanate d'Aluminium est qu'ils possèdent un comportement thermo-mécanique fortement anisotrope. Plus particulièrement, ces grains montrent un coefficient de dilatation thermique légèrement négatif selon la direction cristallographique  $\vec{a}$ , un coefficient moyen selon la direction  $\vec{b}$  et un fort coefficient selon  $\vec{c}$ . Lors de la phase de refroidissement post-frittage de ces matériaux, des contraintes internes intra et inter granulaires apparaissent sous l'effet de désaccord de ces coefficients puisque chacun des grains monocristallins possède une orientation cristallographique différente de ses voisins.

Ce type de matériau possède un cycle de dilatation thermique très original. La Figure 2 montre un cycle de dilatation thermique complet (mesuré sur une "nuance" d'AT différent de celui présenté sur la micrographie de la Figure 1) :

- durant la phase ①** (chauffe  $20^\circ\text{C} \rightarrow 1400^\circ\text{C}$ ), le matériau se dilate et résorbe ses fissures ;
- durant la phase ②** (refroidissement  $1400^\circ\text{C} \rightarrow 800^\circ\text{C}$ ), le matériau se contracte jusqu'à  $800^\circ\text{C}$  ;
- durant la phase ③** (refroidissement  $800^\circ\text{C} \rightarrow 20^\circ\text{C}$ ), le matériau se dilate à nouveau sous l'effet de la relaxation des contraintes internes induites par l'initiation et la propagation de microfissures.

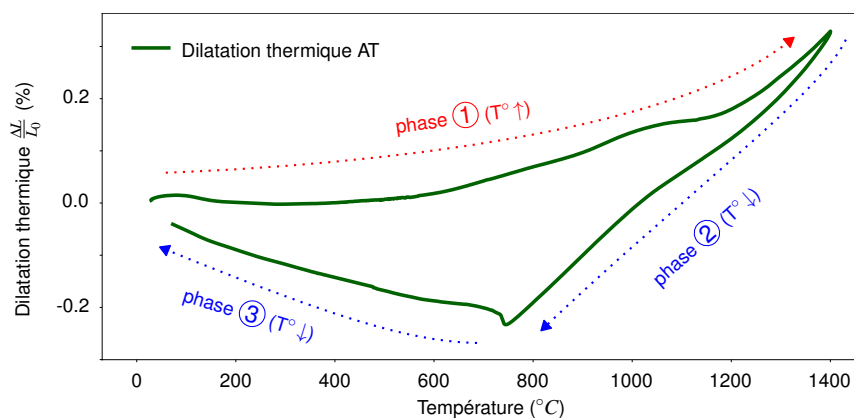


FIGURE 2 – Essai dilatométrique sur Titanate d'Aluminium

Compte tenu de cette microstructure complexe, il est donc très difficile de prédire des propriétés thermomécaniques macroscopiques de ces matériaux telles que la rigidité apparente (module de Young)

ou bien le coefficient d'expansion thermique de ces matériaux. Aussi, il est proposé dans cette étude, une méthode numérique basée sur la MED permettant de prédire l'apparition de ces dommages et leurs influences sur le module de Young apparent.

### 3 Modèle élément discret

L'approche par éléments discrets retenue dans cette étude est une association entre les modèles *lattice* et les modèles particuliers telle que proposée par Potyondy dans [8]. 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 avec la MED.

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 [9]. 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 [10]. Parmi les différents modèles proposés dans la littérature, le modèle de poutre cohésive associé à un critère de rupture local est utilisé ici. Pour plus de détails sur ce modèle, le lecteur peut se référer à [11].

#### 3.1 Modélisation MED de la dilatation thermique anisotrope

La prise en compte de la dilatation thermique avec la MED est aujourd'hui bien connue dans la littérature pour des cas isotropes [12, 13]. Dans ces modèles MED, la dilatation thermique isotrope a été introduite en faisant varier la longueur libre des poutres cohésives en fonction de la température. Dans le cas d'une dilatation anisotrope, cette stratégie n'est plus possible. Dans cette étude, une solution originale de modélisation MED de dilatation thermique anisotrope est proposée. La solution adoptée est de garder en mémoire, pour chaque poutre cohésive, sa configuration initiale où celle-ci est supposée relaxée mécaniquement (voir Figure 3a). Aussi, connaissant les coefficients de dilatation thermique  $\vec{\alpha}(\alpha_a, \alpha_b, \alpha_c)$  et la variation de température  $\Delta T$ , il est alors possible de recalculer une nouvelle configuration (relaxée) après dilatation (ou contraction) thermique (voir Figure 3b) à partir de la configuration initiale. En effet, pour une variation de température  $\Delta T$ , la contraction/dilatation thermique  $\vec{\Delta}$  de la poutre cohésive est simplement :

$$\vec{\Delta} = \Delta T \left( \vec{\alpha} \circ \overrightarrow{O_i O_j} \right) \quad (1)$$

où  $\circ$  est le produit de Hadamard (produit terme à terme) ;  $O_i$  et  $O_j$  sont les positions initiales des éléments discrets  $i$  et  $j$  liés à la poutre cohésive  $ij$ . Une fois la contraction/dilatation thermique  $\vec{\Delta}$  calculée, celle-ci est appliquée en déplaçant l'élément discret  $i$  d'une valeur de  $\vec{\Delta}/2$  et l'élément discret  $j$  d'une valeur de  $-\vec{\Delta}/2$ . Ainsi le centre de l'élément discret  $i$  se déplace au point  $O'_i$  et le centre de l'élément discret  $j$  se déplace au point  $O'_j$  (voir Figure 3b). Finalement, cette nouvelle configuration est considérée comme la configuration relaxée de la poutre pour les calculs mécaniques. Une attention particulière doit être portée aux rotations des éléments discrètes afin de considérer que cette nouvelle configuration n'induit pas de moment de flexion sur la poutre cohésive  $ij$ . Enfin, cette approche est répétée pour chacune des poutres cohésives du domaine discret.

Afin de s'assurer de la validité de cette approche pour simuler avec la MED une expansion thermique anisotrope, des essais numériques de dilatation avec les coefficients de dilatation suivants ont été conduits sur un échantillon numérique (voir table 1).

La Figure 4 montre le résultat de cet essai de refroidissement pour un échantillon numérique homogène de forme cubique et pour une variation de température totale  $\Delta T = -100 K$ . Ces essais montrent que la stratégie mise en place pour simuler l'anisotropie de dilatation thermique en MED donne les résultats attendus avec des coefficients de dilatation macroscopique  $\langle \alpha_a \rangle$ ,  $\langle \alpha_b \rangle$  et  $\langle \alpha_c \rangle$  très proches des coefficients introduits à l'échelle des liaisons cohésives. Il est à noter que, dans cette approche, la propagation de chaleur est négligée, la température est supposée uniforme dans l'échantillon numérique.

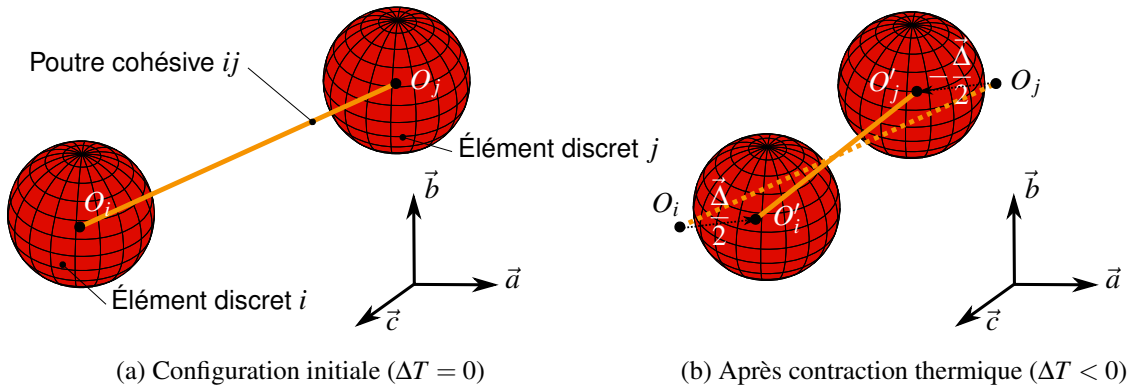


FIGURE 3 – Principe de simulation MED de la dilatation anisotrope

Coefficient de dilatation selon $\vec{a}$	$\alpha_a$	$10 \cdot 10^{-6}$	$\text{K}^{-1}$
Coefficient de dilatation selon $\vec{b}$	$\alpha_b$	$-10 \cdot 10^{-6}$	$\text{K}^{-1}$
Coefficient de dilatation selon $\vec{c}$	$\alpha_c$	0	$\text{K}^{-1}$
Variation de température	$\Delta T$	-100	K

TABLE 1 – Paramètres de l’essai dilatométrique numérique de validation

La méthode proposée ici permet donc de simuler à l’aide de la MED la dilatation thermique de façon simple et robuste sans recourir à une étape fastidieuse de calibration. Les premiers résultats présentés sur la Figure 4 montrent que ces résultats semblent consistants dans le cas d’un matériau homogène. Les sections suivantes montrent l’application de ce modèle pour des matériaux polycristaux de Titanate d’Aluminium.

### 3.2 Description générale de la méthodologie numérique

La Figure 5 illustre les étapes principales de la stratégie de simulation permettant d’étudier l’effet de l’anisotropie de dilatation thermique sur des matériaux polycristaux de Titanate d’Aluminium.

**Étape 1** La première étape consiste en la calibration des paramètres locaux du modèle (module de Young  $E_\mu$ , rayon adimensionné  $R_\mu$  et critère de contrainte à rupture  $\sigma_{\mu f}$  des poutres cohésives). En outre, cinq domaines initiaux sont générés (grâce à l’algorithme *Cooker* du code de calcul MED *GranOO*).

**Étape 2** Dans cette deuxième étape, les grains d’AT sont introduits à l’aide d’un algorithme géométrique. Une tessellation de Voronoï est utilisée afin de paver l’espace de polyèdres contigus (aussi appelés cellules de Voronoï). Chacune de ces cellules de Voronoï représente alors un grain d’AT. Finalement, les centres des éléments discrets se trouvant à l’intérieur de ces cellules sont considérés comme appartenant au grain d’AT correspondant. De cette façon, un *cluster* d’éléments discrets représente un grain d’AT. Cette troisième étape se termine en associant un repère cristallographique, issu d’un tirage aléatoire, à chacun des grains d’AT. Ainsi, chaque grain d’AT possède un axe cristallographique unique, différent de ses voisins. Cinq domaines ont été générés en suivant ce protocole numérique. Les domaines comprennent environ 20,000 éléments discrets. Une cinquantaine de grains d’AT sont modélisés, ce qui représente, en moyenne, 400 éléments discrets par grain d’AT.

**Étape 3** La troisième étape consiste à simuler le refroidissement de  $1200^\circ\text{C}$  à  $20^\circ\text{C}$  des microstructures ainsi générées. Des *snapshots* des domaines discrets sont réalisés tous les  $100^\circ\text{C}$ .

**Étape 4** Enfin, la quatrième étape consiste à conduire des essais numériques de traction sur les *snapshots* réalisés à l’étape précédente. Il est alors possible d’estimer les modules de Young apparents des microstructures numériques thermiquement endommagés. Pour cela, les échantillons subissent des essais de traction tout en interdisant aux fissures de se propager.

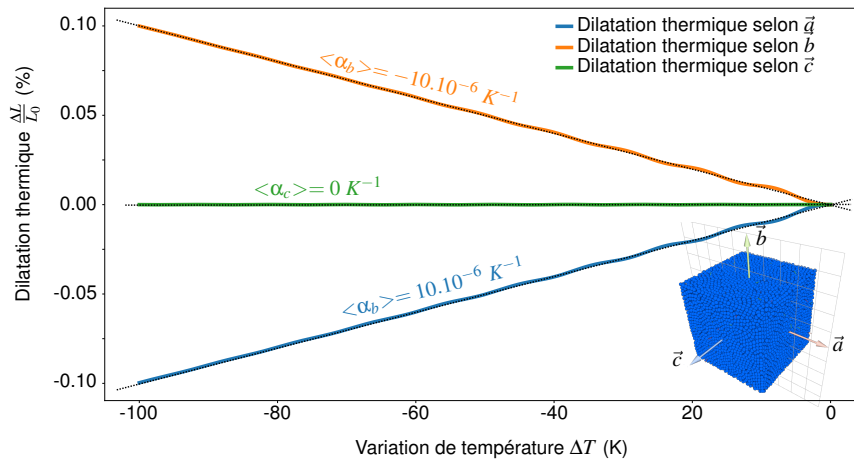


FIGURE 4 – Essai dilatométrique numérique de validation sur un matériau homogène

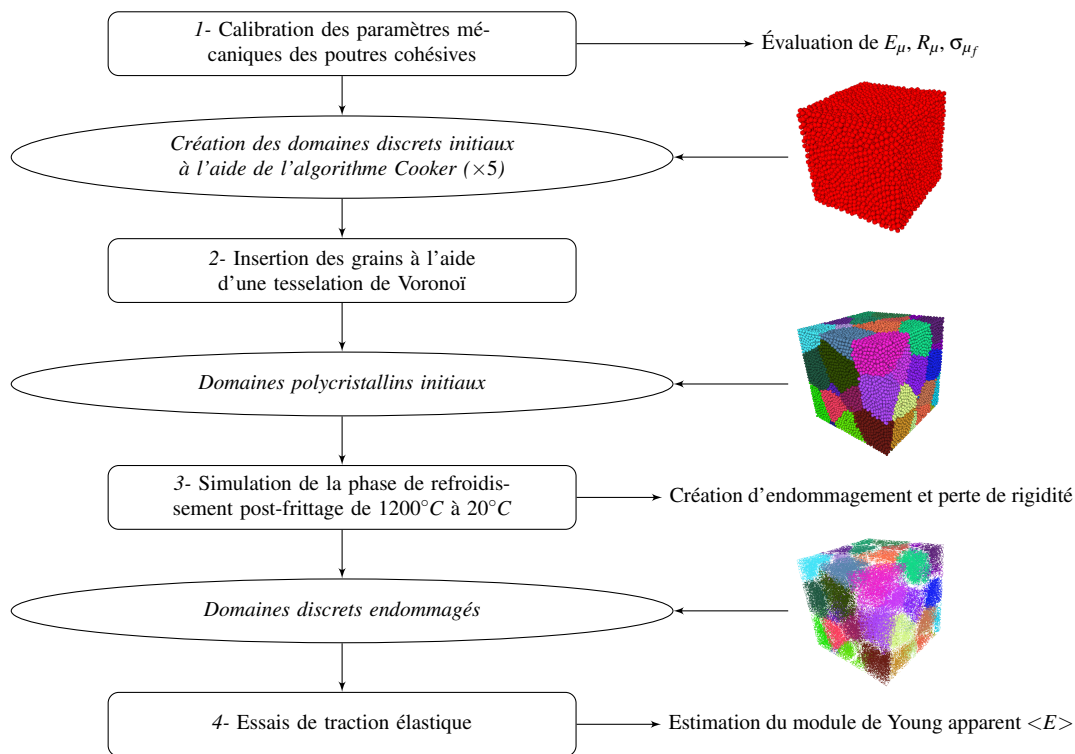


FIGURE 5 – Vue synthétique des principales étapes de simulation

### 3.3 Résultats

Les paramètres thermomécaniques utilisés dans ces simulations sont résumés dans le tableau 2. Il est à noter que ces paramètres ne correspondent pas au cristal d'AT pur. Ces paramètres sont déduits d'essais expérimentaux et prennent donc en compte intrinsèquement la matrice vitreuse (estimée à une dizaine de pour cent massique).

La Figure 6 synthétise les résultats des simulations conduits avec ces paramètres ainsi que l'essai expérimental de référence. Sur cette figure, l'évolution du module de Young apparent  $\langle E \rangle$  est reportée en fonction de la température. La mesure expérimentale (courbe orange) est donnée pour un cycle thermique complet : montée en température jusqu'à 1400 °C puis redescende en température jusqu'à 20 °C. Ces mesures ont été réalisées par échographie ultrasonore. Les simulations MED concernent uniquement la phase de descente en température. Une attention particulière a été portée sur le choix de la température initiale  $T_0$ . Celle-ci a été choisie à 1200 °C, ce qui correspond à la température de transition vitreuse caractérisée par une inflexion du module de Young expérimental. En effet, en dessous de cette tempéra-

ture, la phase vitreuse se solidifie et ne peut plus accommoder les contraintes mécaniques internes. C'est donc la température seuil où il est considéré que les contraintes internes peuvent se développer et c'est pourquoi cette température a été choisie comme température initiale pour les simulations MED. Deux familles de simulation ont été conduites (voir Figure 6) :

**sans** endommagement ( $\sigma_f = \text{inf}$ ) où les fissures ne sont pas autorisées à se développer ;

**avec** endommagement ( $\sigma_f = 50$  MPa) où les fissures sont autorisées à s'initier et se propager.

Pour les simulations *sans endommagement*, il est observé que le module de Young suit simplement la loi linéaire d'évolution reportée dans le tableau 2, ce qui est bien le résultat attendu. Pour les simulations *avec endommagement* le module de Young décroît d'une amplitude similaire à celle observée expérimentalement.

Coefficient de dilatation selon $\vec{a}$	$\alpha_a$	$-1.975 \times 10^{-6}$	$\text{K}^{-1}$
Coefficient de dilatation selon $\vec{b}$	$\alpha_b$	$9.9351 \times 10^{-6}$	$\text{K}^{-1}$
Coefficient de dilatation selon $\vec{c}$	$\alpha_c$	$17.264 \times 10^{-6}$	$\text{K}^{-1}$
Variation de température totale	$\Delta T$	1200 $\rightarrow$ 20	$^{\circ}\text{C}$
Module de Young à 1200 $^{\circ}\text{C}$	$E(1200^{\circ}\text{C})$	170	GPa
Loi de variation de $E$ en fonction de $\Delta T$	$E(\Delta T) = K_1 \times \Delta T + K_2$		GPa
	$K_1$	-0.0092	$\text{GPa} \cdot ^{\circ}\text{C}^{-1}$
	$K_2$	170	GPa
Coefficient de Poisson	$\nu$	0.28	-
Contrainte à rupture	$\sigma_f$	50	MPa
Nombre de cristaux	$N$	50	-

TABLE 2 – Paramètres de l'essai de refroidissement sur un polycristal de Titanate d'Aluminium (incluant une phase vitreuse)

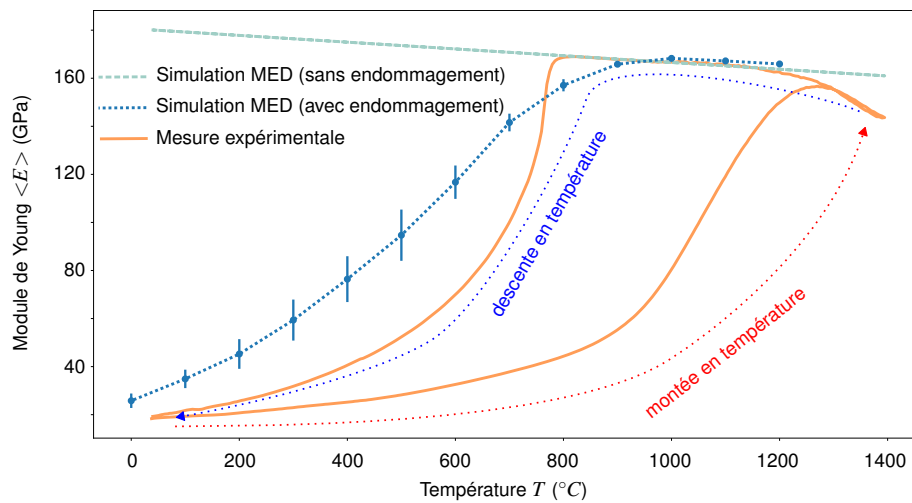


FIGURE 6 – Évolution du module de Young en fonction de la température

### 3.4 Discussion et conclusion

Le résultat des simulations *avec endommagement* montre la capacité du modèle MED à prendre en compte la microfissuration induite par l'anisotropie des coefficients de dilatation thermique. Cette anisotropie conduit à une chute drastique de la rigidité apparente du matériau, ce qui est le résultat attendu et recherché. Toutefois, il est observé que le modèle MED ne permet pas de rendre compte de la chute brutale du module de Young observée expérimentalement pour une température autour des 750 $^{\circ}\text{C}$  (lors de la descente en température). Aussi, plusieurs améliorations du modèle MED sont envisagées afin de mieux rendre compte de cet effet de chute brutale. Plusieurs pistes d'amélioration sont envisagées :

- l'introduction de frontières périodiques permettant de mieux représenter la microstructure ;
- prise en compte de la forme tabulaire des grains d'AT ;
- mise en oeuvre de modèles DEM alternatifs tel que le modèle iDLSM [14] ;
- introduction d'un critère de rupture énergétique.

L'objectif de ces différentes améliorations du modèle MED est la mise en place d'une technique de simulation permettant de prédire quantitativement les propriétés thermomécaniques apparentes de matériaux céramiques en prenant en compte l'histoire thermique du matériau et sa microstructure. L'exploitation d'un tel outil numérique pourrait ensuite être utilisé afin de tester virtuellement différentes microstructures (forme des grains, propriétés mécaniques, etc.) et d'améliorer les propriétés d'usage de ces matériaux en optimisant leurs microstructures. Parmi ces propriétés d'usage, une attention particulière sera portée sur la capacité du matériau à résister aux chocs thermiques, qui est une propriété recherchée dans le domaine des matériaux réfractaires avec des applications dans l'industrie sidérurgique ou bien verrière.

## Références

- [1] P. A. Cundall and O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29 :47–65, 1979.
- [2] W Leclerc, A Ammar, D Moukadiri, T Dridi, and M Guessasma. Halo approach to model cracks initiation and propagation in 3d discrete element method simulation of homogeneous and heterogeneous materials. *Composite Structures*, 259 :113222, 2021.
- [3] Leandro Lima Rasmussen. Hybrid lattice/discrete element method for bonded block modeling of rocks. *Computers and Geotechnics*, 130 :103907, 2021.
- [4] Michał Nitka and J Tejchman. Meso-mechanical modelling of damage in concrete using discrete element method with porous itzs of defined width around aggregates. *Engineering Fracture Mechanics*, 231 :107029, 2020.
- [5] Guang Yang, Hazem Alkotami, and Shuting Lei. Discrete element simulation of orthogonal machining of soda-lime glass with seed cracks. *Journal of Manufacturing and Materials Processing*, 4(1) :5, 2020.
- [6] Farid Asadi, Damien André, Sacha Emam, Pascal Doumalin, and Marc Huger. Numerical modelling of the quasi-brittle behaviour of refractory ceramics by considering microcracks effect. *Journal of the European Ceramic Society*, 42(3) :1149–1161, 2022.
- [7] Mossaab Mouiya, Mikhail Martynyuk, Andreas Kupsch, René Laquai, Bernd R Müller, Nicolas Tessier Doyen, Youssef Tamraoui, Itziar Serrano-Munoz, Marc Huger, Mark Kachanov, et al. The stress–strain behavior of refractory microcracked aluminum titanate : The effect of zigzag microcracks and its modeling. *Journal of the American Ceramic Society*, 106(11) :6995–7008, 2023.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [12] Damien André, Bertrand Levraut, Nicolas Tessier-Doyen, and Marc 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.
- [13] G Alhadj Hassan, W Leclerc, Christine Pelegris, M Guessasma, and E Bellenger. On the suitability of a 3d discrete element method to model the composite damage induced by thermal expansion mismatch. *Computational Particle Mechanics*, 7 :679–698, 2020.
- [14] Damien André and Miguel Angel Celigueta. A dem bonded particle model compatible with stress/strain constitutive relations. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 170 :105437, 2023.