

Analyse numérique des propriétés thermoélastiques effectives des nanocomposites

F. Grine¹, L. Cauvin¹, D. Brancherie¹, D. Kondo²

¹ Université de Technologie de Compiègne, laboratoire Roberval (mechanics, energy and electricity),

Centre de recherches, CS 60319, 60203 Compiègne Cedex, France, {fahmi.grine,ludovic.cauvin,delphine.brancherie}@utc.fr

² Sorbonne Universités, Institut Jean Le Rond d'Alembert, UMR 7190 CNRS-SU, F-75005, Paris, France, djimedo.kondo@sorbonne-universite.fr

Résumé — Le comportement thermoélastique d'un nanocomposite constitué d'une matrice renforcés d'inclusions cylindrique est étudié grâce à un modèle éléments finis. Pour prendre en compte de l'effet de taille spécifique aux nanocomposites, une interface imparfaite cohérente est introduite entre la matrice et les inclusions. L'estimation des propriétés effectives permet de mettre en évidence l'influence de la taille des inclusions et des propriétés introduites à l'interface.

Mots clés — Nanocomposites, thermoélasticité, homogénéisation numérique, interface imparfaite cohérente, effet de taille.

1 Introduction

Comparativement aux composites classiques, pour des fractions volumiques de renforts très faibles, les nanocomposites offrent de remarquables propriétés mécaniques, thermiques, électriques, etc. Ces propriétés sont dépendantes de la taille des renforts. On parle alors d'un effet de taille qui est généralement attribué à l'augmentation du rapport surface d'interface/volume de matériau. Pour rendre compte de cet effet de taille dans le cadre de la mécanique des milieux continus, des interfaces imparfaites sont généralement introduites entre la matrice et les inclusions. Dans le cas des matériaux thermoélastiques, une telle hypothèse implique la discontinuité des différents champs thermomécaniques (déplacements, contraintes, température et flux de chaleur). Des approches analytiques ont été développées dans ce cadre [1, 2, 3]. Toutefois, elles ne sont valables que pour des conditions aux limites simples et pour des inclusions de forme sphérique ou cylindrique. Le développement d'outils numériques est donc nécessaire pour ouvrir la voie à la prise en compte de comportements non-linéaires et/ou à des formes d'inclusions complexes.

On s'intéresse ainsi dans cette étude au comportement thermoélastique de matériaux nanocomposites. Nous commencerons donc par définir le problème. Puis, après avoir présenté la résolution numérique de ce problème, quelques résultats permettront notamment d'illustrer l'influence de la taille des inclusions sur le comportement d'un nanocomposite.

2 Définition du problème

On considère ici un matériau biphasé constitué d'une matrice et d'inclusions cylindriques de rayon R_{inc} . Le Volume Élémentaire Représentatif du problème traité, en hypothèse d'état plan de déformation, est illustré en Figure (1). Dans le domaine Ω associé à ce V.E.R., la matrice et l'inclusion sont respectivement notées Ω_{mat} et Ω_{inc} et leur interface Γ . Dans le volume de la matrice et de l'inclusion, on définit une densité massique d'énergie libre (potentiel de Helmholtz) fonction du tenseur des déformations ε et de la température absolue T comme :

$$\Psi = \Psi(T, \varepsilon). \quad (1)$$

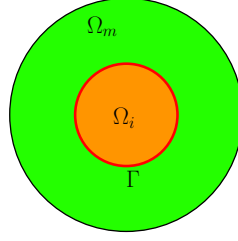


FIGURE 1 – Volume Élémentaire Représentatif du bi-phasé

Dans la suite les différents champs définis sur l'interface seront notés indexés comme "._s". De manière analogue, on peut définir une densité massique d'énergie surfacique libre Ψ_s :

$$\Psi_s = \Psi_s(T, \varepsilon_s) \quad (2)$$

où ε_s désigne le tenseur des déformations surfacique à l'interface. En se plaçant en thermoélasticité, on choisit dans le volume (matrice et inclusion) et à l'interface matrice-inclusion une densité d'énergie quadratique en ε et T :

$$\rho\psi = \frac{1}{2}\varepsilon : \mathcal{C} : \varepsilon - \beta : \varepsilon\tau - \frac{c}{2}\tau^2 \quad (3)$$

$$\rho_s\psi_s = \frac{1}{2}\varepsilon_s : \mathcal{C}_s : \varepsilon_s - \beta_s : \varepsilon_s\tau - \frac{c_s}{2}\tau^2 \quad (4)$$

où τ , \mathcal{C} , β et ρ désignent respectivement la variation de la température, le tenseur d'élasticité, le tenseur des coefficients thermiques et la densité volumique [4]. On note que le paramètre c représente le produit entre la capacité thermique massique et la température de référence T_0 . Le tenseur des coefficients thermiques β peut s'écrire $\beta = \mathcal{C} : \alpha$ où α est le tenseur de dilatation thermique. τ peut être défini comme $\tau = T - T_0$. Par conséquent, on déduit les lois d'état :

$$\sigma = \rho \frac{\partial\psi}{\partial\varepsilon}, \quad \sigma_s = \rho_s \frac{\partial\psi_s}{\partial\varepsilon_s}, \quad s = -\frac{\partial\psi}{\partial T}, \quad s_s = -\frac{\partial\psi_s}{\partial T_s} \quad (5)$$

où σ et s sont respectivement le tenseur de contraintes et l'entropie massique. En utilisant les équations (3), (4) et (5), on peut écrire :

$$\sigma = \mathcal{C} : \varepsilon - \tau\beta, \quad \sigma_s = \mathcal{C}_s : \varepsilon_s - \tau\beta_s, \quad \rho s = \beta : \varepsilon + c\tau, \quad \rho_s s_s = \beta_s : \varepsilon_s + c_s\tau \quad (6)$$

L'équilibre mécanique et l'équilibre thermique du V.E.R. dans la matrice et dans l'inclusion sont régis par les relations suivantes :

$$\text{div}\sigma = \vec{0}, \quad \text{div}\vec{q} = 0. \quad (7)$$

où \vec{q} est le flux de chaleur. À l'interface entre la matrice et l'inclusion, ces mêmes équilibres sont donnés par :

$$\text{div}_s\sigma_s + [[\sigma]].\vec{n} = \vec{0}, \quad \text{div}_s\vec{q}_s - [[\vec{q}]].\vec{n} = 0. \quad (8)$$

où div_s désigne l'opérateur de divergence surfacique défini à l'interface Γ , tandis que $[[.]]$ représente l'opérateur de saut d'un champ à l'interface Γ . Dans le cas de matériaux isotropes, les tenseurs de contraintes de Cauchy dans le volume (matrice et inclusions) et sur l'interface peuvent s'écrire sous la forme suivante :

$$\sigma = 2\mu\varepsilon + \lambda\text{tr}(\varepsilon)\mathbf{I}, \quad \sigma_s = 2\mu_s\varepsilon_s + \lambda_s\text{tr}(\varepsilon_s)\mathbf{P} \quad (9)$$

où \mathbf{P} est un projecteur sur l'interface Γ : $\mathbf{P} = \mathbf{I} - \vec{n} \otimes \vec{n}$ avec \vec{n} vecteur normal unitaire à l'interface. (μ, λ) et (μ_s, λ_s) désignent les coefficients de Lamé pour le volume et l'interface. Conformément au loi de Fourier, les flux de chaleur peuvent s'écrire :

$$\vec{q} = -k\vec{\nabla}T, \quad \vec{q}_s = -k_s\vec{\nabla}_sT \quad (10)$$

où k et k_s représentent respectivement les conductivités thermiques dans le volume et de l'interface. $\vec{\nabla}_s$ désigne l'opérateur de gradient défini à l'interface Γ . Dans la suite, les différents paramètres matériaux prendront les valeurs nominales fournies dans les tableaux (1) et (2). Il faut noter que pour le besoin de l'étude de sensibilité présentée en section 7, les paramètres de rigidité mécanique de l'inclusion ainsi les modules thermoélastiques de l'interface seront modifiés.

	E [GPa]	ν	α [K^{-1}]	$\rho c T_0$ [$Jm^{-3}K^{-2}$]
Matrix	70	0.33	12×10^{-5}	3.588×10^3
Inclusion	7	0.33	12×10^{-5}	3.588×10^2

TABLE 1 – Propriétés matériaux des phases volumiques.

μ_s [N/m]	λ_s [N/m]	α_s [K^{-1}]	$\rho_s c_s T_0$ [$Jm^{-2}K^{-2}$]
0.375	6.842	12×10^{-5}	3.588×10^3

TABLE 2 – Propriétés matériaux de l'interface.

3 Résolution numérique

Considérons les espaces virtuels pour les champs de déplacement et de température comme :

$$\mathcal{V}_u = \{\vec{v} \in H_1(\Omega), \quad \vec{v} = \vec{0} \text{ sur } \partial\Omega_u\} \quad (11)$$

$$\mathcal{V}_T = \{q \in H_1(\Omega), \quad q = 0 \text{ sur } \partial\Omega_u\} \quad (12)$$

S'agissant d'une interface imparfaite cohérente Γ , la formulation faible ne se repose que sur deux inconnues puisque les champs de déplacement et de température sont supposés continus à travers l'interface. Par conséquent, en utilisant la formule de Green, la forme faible des équations d'équilibre (7) et (8) peut s'écrire :

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\nabla} \delta \vec{u} d\Omega + \int_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma}_s : \mathbf{P} \boldsymbol{\nabla} \delta \vec{u} \mathbf{P} d\Gamma = 0, \quad \forall \delta \vec{u} \in \mathcal{V}_u, \quad (13)$$

$$\int_{\Omega} k \vec{\nabla} \tau \cdot \vec{\nabla} \delta \tau d\Omega + \int_{\Gamma} k_s \mathbf{P} \vec{\nabla} \tau \cdot \mathbf{P} \vec{\nabla} \delta \tau d\Gamma = 0, \quad \forall \delta \tau \in \mathcal{V}_T. \quad (14)$$

Ensuite, en utilisant la méthode des éléments finis, les champs de déplacements et de température peuvent être discrétisés sous la forme :

$$\vec{u}_h = \sum_i^{N_n} \phi_i(\vec{x}) \vec{U}_i, \quad (15)$$

$$\tau_h = \sum_i^{N_n} \phi_i(\vec{x}) \tau_i, \quad (16)$$

avec N_n le nombre de degrés de liberté pour un champ scalaire tandis que ϕ_i représente la $i^{\text{ème}}$ fonction de forme, ici choisie linéaire dans la partie numérique. En utilisant l'approximation des solutions du problème illustrée par les équations (15) et (16), la forme discrète des equations (13) et (14) peut s'écrire :

$$\begin{bmatrix} K + K_s & -H - H_s \\ 0 & Q + Q_s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [U] \\ [\tau] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_u \\ F_T \end{bmatrix} \quad (17)$$

où K , H et Q désignent respectivement les matrices de rigidité, couplage thermomécanique et thermique pour les contributions des phases volumiques. En plus, l'interface contribue aussi dans les différents termes de la matrice tangente à travers les matrices K_s , H_s et Q_s . F_u et F_T représentent les vecteurs de force d'origine mécanique et thermique et $([U], [\tau])$ désignent les déplacements et température nodaux.

4 Estimation des propriétés effectives

Tout d'abord, désignons par Σ , \mathbf{E} et $\bar{\tau}$ respectivement les champs macroscopiques de contraintes, de déformations et de variation de température. Considérant l'hypothèse des déformations planes c.a.d. ($E_{13} = E_{23} = E_{33} = 0$) et en respectant la notation de Voigt, le comportement thermoélastique effectif peut être s'écrire :

$$\begin{bmatrix} \Sigma_{11} \\ \Sigma_{22} \\ \Sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_{eff} + m_{eff} & k_{eff} - m_{eff} & 0 \\ k_{eff} - m_{eff} & k_{eff} + m_{eff} & 0 \\ 0 & 0 & 2m_{eff} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{11} \\ E_{22} \\ E_{12} \end{bmatrix} - \beta_{eff} \bar{\tau} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (18)$$

où k_{eff} et m_{eff} désignent respectivement le module transverse et le module de cisaillement. Ainsi, nous pouvons déduire l'expression de l'énergie libre effective comme suit :

$$(\rho\Psi)_{eff} = \frac{k_{eff} + m_{eff}}{2} (E_{11}^2 + E_{22}^2) + (k_{eff} - m_{eff}) E_{11} E_{22} + 2m_{eff} E_{12}^2 - \beta_{eff} \bar{\tau} (E_{11} + E_{22}) - \frac{c_{eff}}{2} \bar{\tau}^2 \quad (19)$$

L'énergie effective de V.E.R. peut s'écrire :

$$(\rho\psi)_{eff} = \langle \rho\psi \rangle \quad (20)$$

où $\langle . \rangle$ désigne l'opérateur de moyenne volumique. Pour déduire l'expression de différents modules effectifs, en s'inspirant de Quang et al [1], 4 cas de sollicitation sont considérés :

- cas 1 (calcul de m_{eff}) : dans la condition où $E_{11} = -E_{22} = E$, $E_{12} = 0$, $\bar{\tau} = 0$, l'énergie de Helmholtz se simplifie à : $\langle \rho\psi \rangle = 2m_{eff} E^2$
- cas 2 (calcul de k_{eff}) : dans le cas où $E_{11} = E_{22} = E$, $E_{12} = 0$, $\bar{\tau} = 0$, l'énergie de Helmholtz se réduit à : $\langle \rho\psi \rangle = 2k_{eff} E^2$
- cas 3 (calcul de c_{eff}) : Si $E_{11} = E_{22} = E_{12} = 0$, $\bar{\tau} \neq 0$, l'énergie de Helmholtz prend la forme suivante : $\langle \rho\psi \rangle = -\frac{c_{eff}}{2} \bar{\tau}^2$
- cas 4 (calcul de β_{eff}) : en considérant que $E_{11} = E_{22} = E$, $E_{12} = 0$, $\bar{\tau} \neq 0$, l'énergie de Helmholtz s'écrit alors : $\langle \rho\psi \rangle = 2k_{eff} E^2 - 2\beta_{eff} \bar{\tau} E - \frac{c_{eff}}{2} \bar{\tau}^2$

5 Choix de la taille du maillage

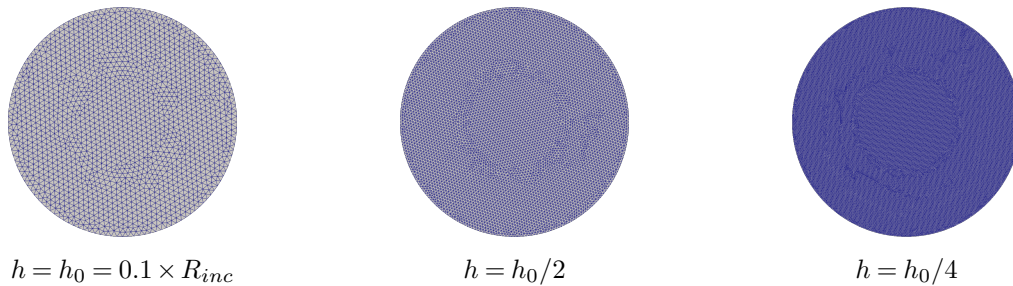


FIGURE 2 – Différents maillages utilisés

Pour définir la taille du maillage, trois valeurs différentes sont considérées : h_0 , $h_0/2$ et $h_0/4$ où $h_0 = R_{inc}/10$ (voir Figure (2)) avec , pour rappel, R_{inc} est le rayon de l'inclusion. Si on considère le deuxième cas de sollicitation (cas 2), une solution analytique peut être obtenue. Alors, on peut avoir dans ce cas la forme analytique de module transversale k_{eff} malgré que son expressions est lourde. Ainsi, pour étudier la convergence de notre méthode numérique, une mesure de l'erreur relative pour le module transversal effectif est considérée comme illustrée sur la Figure (3). Tout d'abord, on note que notre approche numérique pour l'homogénéisation numérique converge vers la solution analytique. De plus, bien que l'effet de taille soit présent même pour la mesure de l'erreur relative, cet effet devient de plus en plus faible lorsque la taille du maillage diminue. Pour réduire la complexité du problème et garantir un niveau acceptable de précision, la taille de maillage $h = \frac{h_0}{2}$ a été choisie pour la suite.

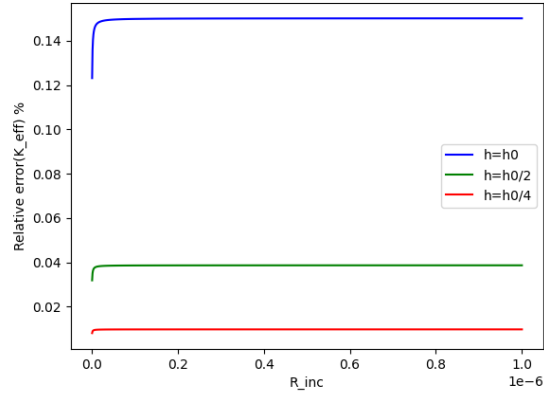


FIGURE 3 – Effet de taille pour l'erreur relative au module k_{eff}

6 Résultats de la méthode des éléments finis

Considérant le champ de déformation, il est clair que le problème thermomécanique lié au module de cisaillement (cas 1) a une solution qui peut être exprimée comme le produit de fonctions radiale et azimutale (voir Figure (4)). Alors que les solutions pour le reste des problèmes sont radiales (voir Figures (5-7)). De plus, considérant les problèmes aux valeurs limites liés aux modules k_{eff} , C_{eff} et β_{eff} , la composante de déformation de cisaillement qui est censée disparaître peut être considérée comme une mesure d'erreur. Par conséquent, il est clair, d'après les Figures (5 – 7)_c, que l'erreur est maximale près de l'interface.

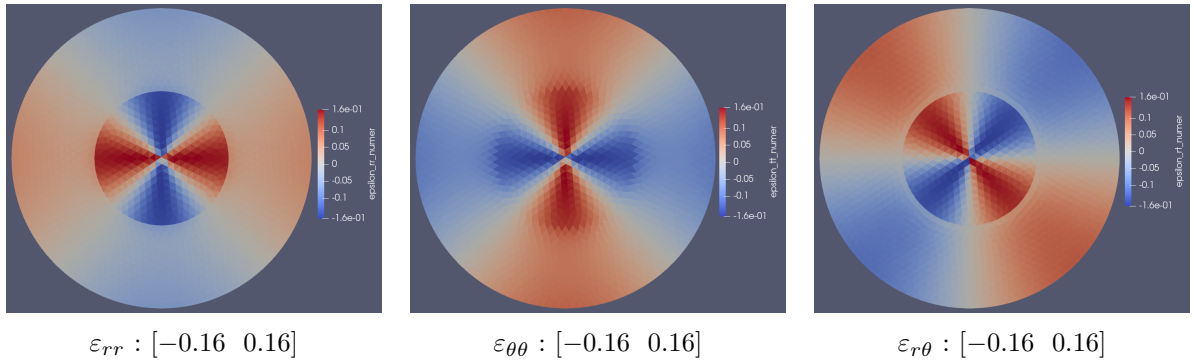


FIGURE 4 – Composantes de déformation pour le cas 1

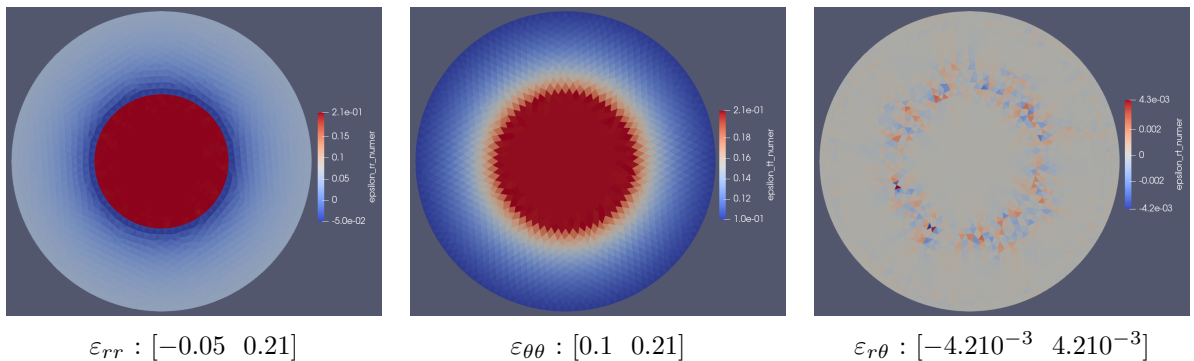


FIGURE 5 – Composantes de déformation pour le cas 2

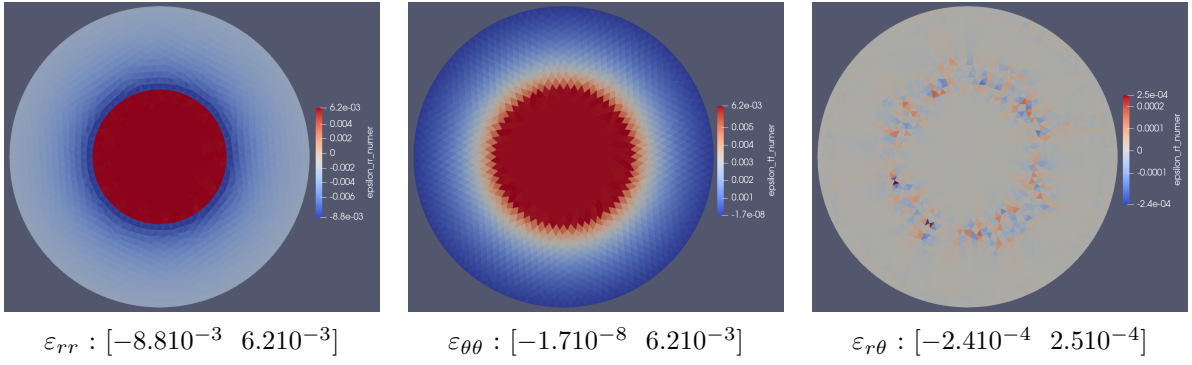


FIGURE 6 – Composantes de déformation pour le cas 3

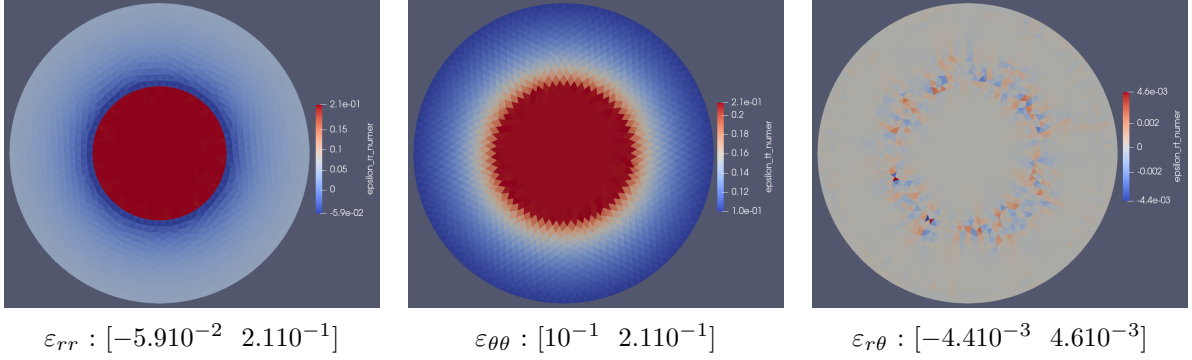
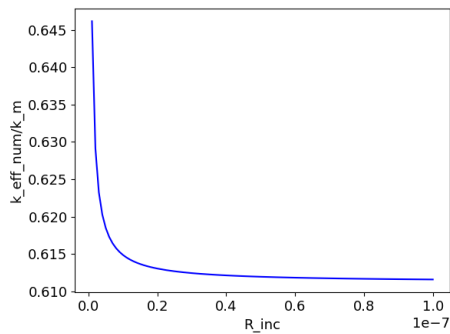


FIGURE 7 – Composantes de déformation pour le cas 4

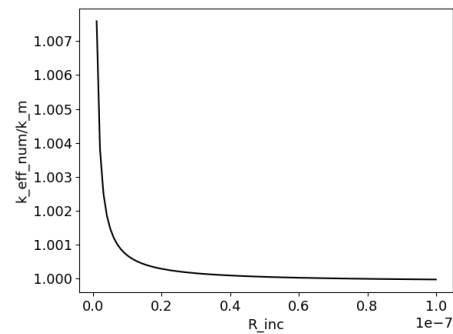
7 Analyse de sensibilité

7.1 Analyse de l'influence de la rigidité de l'inclusion sur k_{eff} et m_{eff}

Dans cette section, l'effet de taille est étudié pour les propriétés mécaniques effectives, c'est-à-dire le module transversal k_{eff} et le module de cisaillement m_{eff} . Il faut noter que dans les figures qui suivent le rayon d'inclusion R_{inc} est exprimé en mètre (SI). Pour analyser l'influence de module de Young sur de tels modules, trois cas sont considérés : $E_i/E_m \in \{0.1, 1, 10\}$. En accord avec les résultats dans [5, 2, 3], les modules effectifs k_{eff} et m_{eff} augmentent lorsque la taille des inclusions diminue (Figures (8) et (9)). Toutefois cette effet est davantage marqué pour des inclusions plus souples que la matrice.



$E_i/E_m = 0.1$



$E_i/E_m = 1$

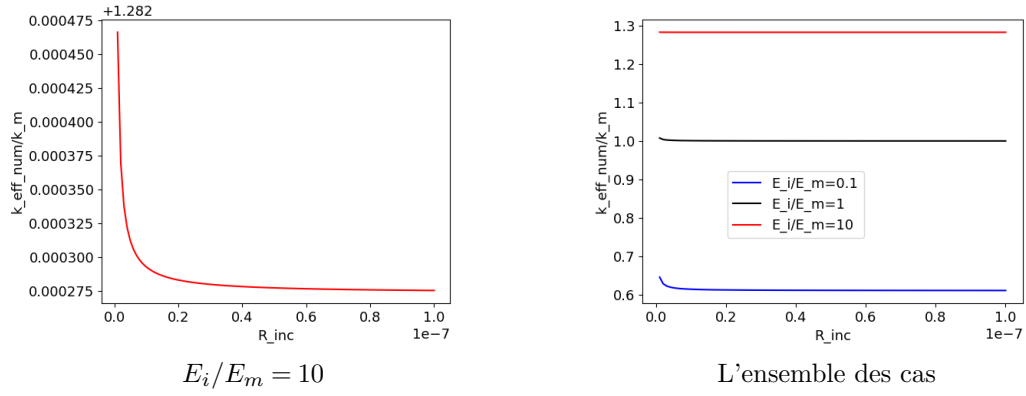


FIGURE 8 – Influence de la taille des inclusions sur le module transverse effectif

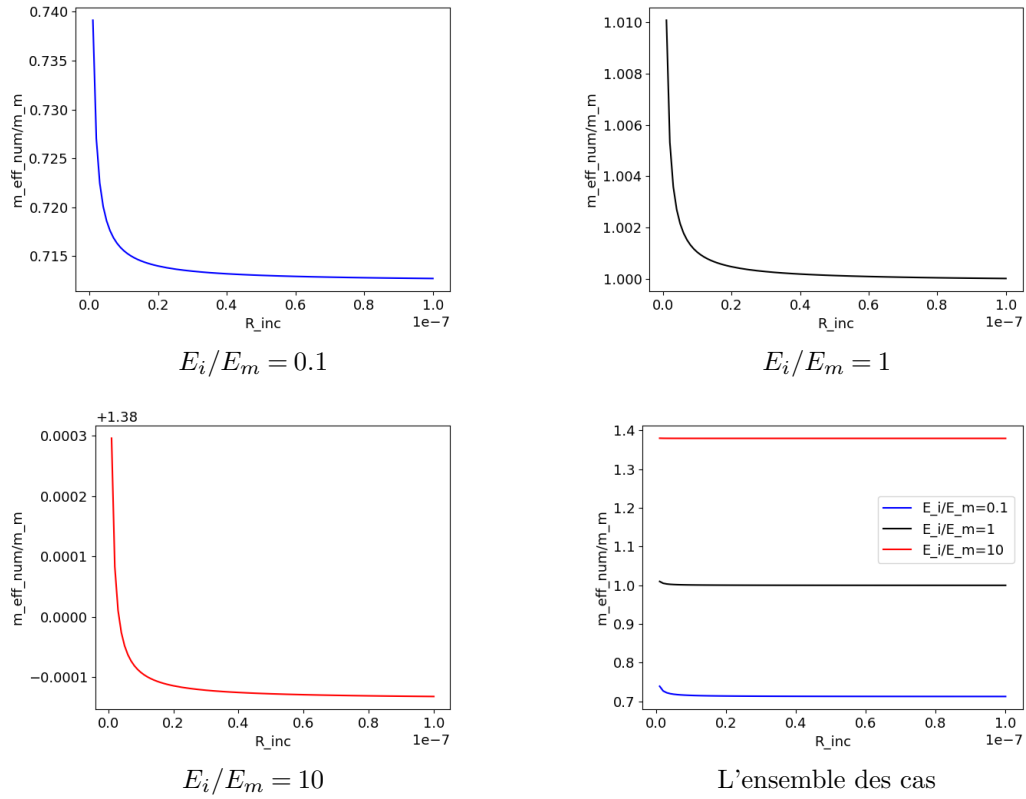


FIGURE 9 – Influence de la taille des inclusions sur le module de cisailment effectif

7.2 Analyse de l'influence de β_s et c_s sur β_{eff}

Pour simplifier l'analyse de sensibilité, les propriétés des matériaux présentées dans les tableaux (1-2) sont considérées alors que seules les paramètres c_s et β_s de l'interface varient. Pour l'analyse de sensibilité, les valeurs de β_s et c_s sont choisies dans l'ensemble des valeurs suivantes : $\{-1, -10^{-1}, -10^{-2}, -10^{-3}, -10^{-4}, -10^{-5}, -10^{-6}, 0, 10^{-6}, 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 1\}$.

Comme le cas des paramètres mécaniques effectifs, il est clair que le coefficient thermique effectif β_{eff} dépend de la taille des inclusion (voir Figure (10-a)). Aussi, il apparait, pour les cas considérés ici, que c_s n'a pas d'influence sur β_{eff} (voir Figures (10-b) et (10-c)). Un tel résultat est cohérent avec la formule de Levin [6] où le coefficient thermique effectif β_{eff} est uniquement fonction des paramètres élastiques effectifs et de la moyenne de coefficient thermique. En revanche, le coefficient thermique de l'interface β_s a une influence importante sur le module

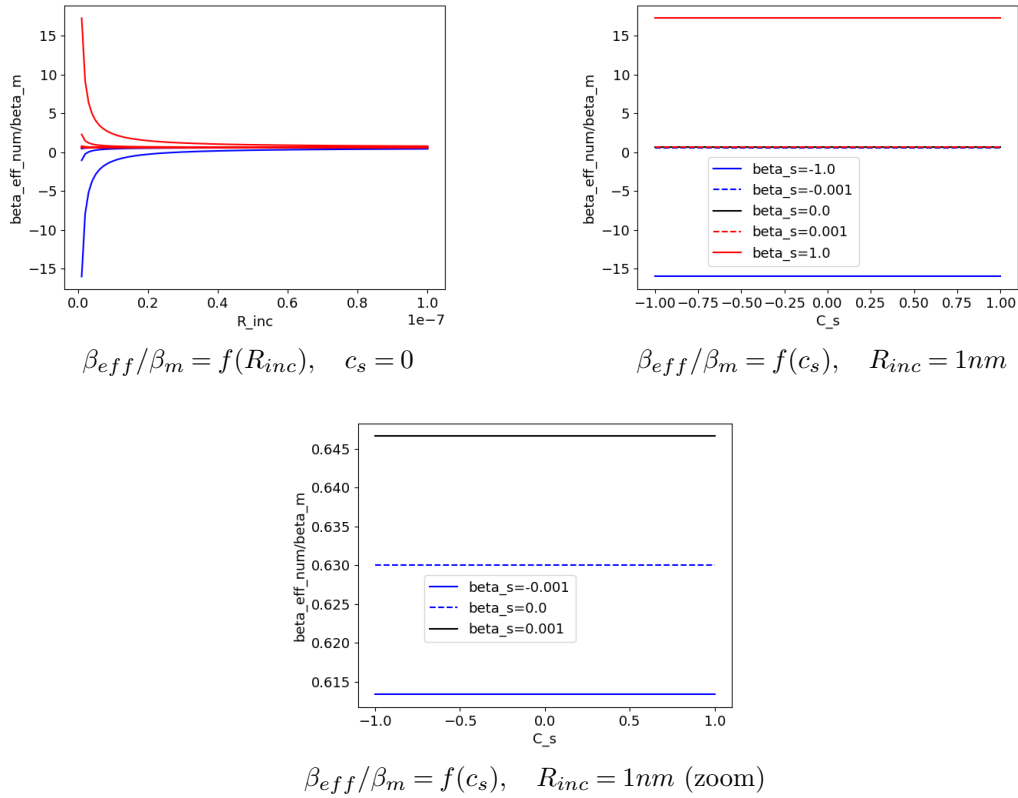


FIGURE 10 – Influence de la taille des inclusions (R_{inc}), c_s et β_s sur le coefficient thermique effectif β_{eff} (en rouge les valeurs positives de β_s , en bleu les valeurs négatives de β_s et en noir le cas $\beta_s = 0$)

effectif β_{eff} (voir Figures (10-a), (10-b) et (10-c)) : β_{eff} augmente avec la valeur de β_s .

8 Conclusion

Le comportement effectif thermoélastique d'un nanocomposite constitué d'une matrice renforcée par des inclusions cylindriques a été étudié grâce à un modèle éléments finis. L'introduction d'énergie surfacique et l'utilisation d'éléments d'interface entre la matrice et les inclusions a permis de prendre en compte l'effet de taille due à la dimension nanométrique des inclusions. Les résultats ont permis de mettre en évidence la forte influence de la taille des inclusions mais également l'influence des propriétés thermoélastique du matériau sur sa réponse macroscopique.

Références

- [1] H. Le Quang , Q -C. He. *Estimation of the effective thermoelastic moduli of fibrous nanocomposites with cylindrically anisotropic phases*. Archive of Applied Mechanics 79 (2009) : 225-248.
- [2] S. Brisard., L. Dormieux, D. Kondo. *Hashin–Shtrikman bounds on the bulk modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects*. Computational Materials Science 48.3 (2010) : 589-596.
- [3] S. Brisard., L. Dormieux, D. Kondo. *Hashin–Shtrikman bounds on the shear modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects*. Computational Materials Science 50.2 (2010) : 403-410.
- [4] J. Salençon. *Mécanique des milieux continus. Tome II, Thermoélasticité*. École polytechnique, 1994.
- [5] D. P. Bach, , D. Brancherie, L. Cauvin. *Size effect in nanocomposites : XFEM/level set approach and interface element approach*. Finite Elements in Analysis and Design 165 (2019) : 41-51.
- [6] V. M. Levin *Thermal expansion coefficients of heterogeneous materials*. 1992.