

Influence des nano-vides et des nano-fissures sur les constantes élastiques effectives d'un milieu : Approche numérique par XFEM et Level-Set

M.R. KIRED^a, B.E. HACHI^b, D. HACHI^c, M. HABOUSSI^{d*}

- a. Laboratoire de Développement en Mécanique et Matériaux (LDMM), Université de Djelfa, PB 3117, Djelfa, Algérie. ryadhkired@gmail.com
- b. Laboratoire de Développement en Mécanique et Matériaux (LDMM), Université de Djelfa, PB 3117, Djelfa, Algérie. br_khalil@yahoo.fr
- c. Laboratoire d'Automatique Appliquée et Diagnostics Industriels (LAADI), Université de Djelfa, PB 3117, Djelfa, Algérie. hachi_dahmane@yahoo.fr
- d. Laboratoire des Sciences des Procédés et des Matériaux (LSPM), Université Paris 13, UPR 3407 CNRS, Paris, France. haboussi@univ-paris13.fr

Résumé :

Motivé par la simulation numérique des propriétés effectives élastiques de nanostructures et des matériaux nano-structurés par des approches continues, une approche inspirée de travaux déjà existants, utilisant le concept de l'énergie de surface, non négligeable devant l'énergie de volume dans ce cas, est déployée ici pour étudier l'influence de nano-inclusions (nano-vides ou nano-fissures) sur les propriétés effectives de tels milieux. Ainsi un code de calcul utilisant la méthode des éléments finis étendus (XFEM) combinée à la technique de Level-Set est développé dans Matlab pour résoudre le problème mathématique d'homogénéisation périodique, formulé dans ce cas sur un VER contenant des nano-inclusions. Les expérimentations numériques menées en 2D avec l'outil numérique développé nous permettent d'émettre plusieurs observations intéressantes.

Abstract :

Motivated by the numerical simulation of the elastic effective properties of nanostructures and nano-structured materials by continuous approaches, an approach inspired from already existing works, using the concept of surface energy, not negligible in comparison with volume energy in this case, is deployed here to study the influence of nano-inclusions (nano voids or nano-fissures) on the effective elastic properties of nano-structured medium. Thus a dedicated code using the extended finite element method (XFEM) and the LevelSet technique is developed in Matlab to solve the mathematical problem of periodic homogenization, formulated in this case on a REV containing nano-inclusions. The numerical experiments carried out in 2D with the developed numerical tool enables us to make several interesting observations.

Mots clés : Energie de surface; XFEM; Level-Set; Homogénéisation périodique; Nano-vides/Nano-cavités; Nano-fissures

1 Introduction

Ce qui distingue les nanostructures ou les matériaux nano-structurés des autres matériaux est l'énergie de surface des nanoparticules/nano-inclusions qui ne peut plus être négligée devant l'énergie de volume. C'est d'ailleurs en prenant en compte cette énergie de surface qu'on espère modéliser ces milieux par des approches continues en lieu et place d'approches atomistiques comme l'exigerai l'échelle nanométrique des interactions physiques influentes dans ce cas.

Ce travail s'inscrit dans ce cadre, qui est de chercher à décrire les matériaux nano-structurés par des approches continues. Plus précisément, il a pour finalité la détermination par homogénéisation périodique numérique, des propriétés effectives élastiques de matériaux contenant des nano-vides ou nano-cavités. Ces dernières sont d'abord de forme sphérique, avant d'être progressivement aplaties pour tendre vers des nano-fissures, [1]. Pour ce faire, un code de calcul utilisant la méthode des éléments finis étendus (XFEM) et la technique de "Level-Set", a été développé, comme dans les travaux [2] et [3], pour résoudre le problème mathématique constitué des équations de Young-Laplace, [4], décrivant le comportement spécifique des surfaces des nano-pores dans ce cas, et les équations de la mécanique relatives au domaine restant, complétées par les conditions aux limites adéquates.

Des expérimentations numériques menées en 2D avec l'outil numérique développé dans Matlab nous permettent d'émettre plusieurs observations intéressantes. D'abord, il y'a l'existence d'une valeur critique du rayon des nano-vides, en deçà de laquelle le matériau poreux est plus rigide que la matrice ou le matériau parent. Cette situation surprenante, déjà discutée dans [5] du point de vue de l'élaboration des matériaux, est directement liée à la modélisation qui est faite du comportement surfacique des nano-vides. Ensuite, en s'intéressant au cas de nano-vides de plus en plus aplaties, c'est à dire devenant des fissures, l'outil de simulation montre que les propriétés effectives deviennent très proches de celles d'un milieu contenant une fissure de même longueur totale, sans l'énergie de surface. On assiste là, à l'évanescence de l'énergie de surface des nano-vides lorsque ces derniers deviennent des nano-fissures. D'autres observations sont également faites, comme la mise en évidence numérique que la multiplication des petites fissures pour la même longueur totale de fissure est favorable à la rigidité du matériau, au moins pour le module de compressibilité, qu'on trouve plus élevé pour des fissures plus petites et plus nombreuses. L'outil de simulation montre aussi que, par rapport au repère de travail retenu, les fissures horizontales sont moins favorables au module de compressibilité que les fissures verticales, et que les fissures orientées aléatoirement sont entre les deux, mais tendent vers le cas le moins favorable (fissures horizontales) lorsque leur densité augmente.

2 Formulation théorique du problème

On considère le domaine matériel Ω , figure 1, composé de N sous-domaines, $\Omega = \bigcup_{i=1}^N \Omega^{(i)}$, avec $\Omega^{(N)}$ la matrice et $\Omega^{(i)}$ ($i = 1$ à $N - 1$) les inclusions, qui seront par la suite assimilées à des vides ou cavités de rigidité nulle. Chaque sous domaine $\Omega^{(i)}$ est en équilibre statique, et obéit à ce titre à l'équation suivante :

$$\mathit{div}(\boldsymbol{\sigma}^{(i)}) + \mathbf{b}^{(i)} = 0 \quad \text{on } \Omega^{(i)} \quad (1)$$

où $\boldsymbol{\sigma}^{(i)}$ est le tenseur de contrainte de Cauchy, et $\mathbf{b}^{(i)}$, la force de volume.

Le bord de chaque inclusion $\Omega^{(i)}$ ($i = 1, N - 1$) représente une interface $\Gamma^{(i)}$ avec la matrice $\Omega^{(N)}$ dont le comportement est gouverné par l'équation de Laplace-Young :

$$\mathbf{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s^{(i)} = -(\boldsymbol{\sigma}^{(out)} - \boldsymbol{\sigma}^{(in)}) \cdot \mathbf{n}^{(i)} \quad \text{on } \Gamma^{(i)} \quad (2)$$

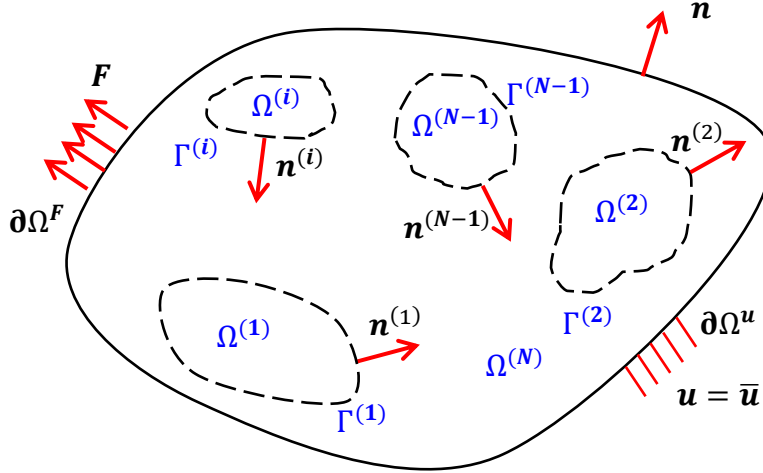


Fig. 1 Illustration du domaine hétérogène nanostructuré étudié

L'interface est alors dite cohérente. Dans la relation (2), $\mathbf{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s^{(i)}$ est la divergence surfacique de la contrainte de Cauchy surfacique, $\boldsymbol{\sigma}_s^{(i)}$, en tout point \mathbf{x} de l'interface $\Gamma^{(i)}$. Les deux grandeurs surfaciques sont définies par :

$$\boldsymbol{\sigma}_s = \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P} \quad (3)$$

et

$$\mathbf{div}_s \boldsymbol{\sigma}_s = \nabla(\boldsymbol{\sigma}_s) : \mathbf{P} \quad (4)$$

avec \mathbf{P} , l'opérateur de projection surfacique :

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}) = \mathbf{I} - \mathbf{n}^{(i)}(\mathbf{x}) \otimes \mathbf{n}^{(i)}(\mathbf{x}) \quad (5)$$

Dans Eqs. (2) et (5), $\mathbf{n}^{(i)}(\mathbf{x})$ est la normale unitaire sortante en tout point \mathbf{x} de l'interface $\Gamma^{(i)}$.

Les équations de champs Eq. (1) et Eq. (2) sont complétées par les conditions aux limites sur la frontière externe $\partial\Omega$ du domaine Ω :

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{F} \quad \text{sur } \partial\Omega^F, \quad (6)$$

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{sur } \partial\Omega^u, \quad (7)$$

avec $\partial\Omega_F \cup \partial\Omega_u = \partial\Omega$ et $\partial\Omega_F \cap \partial\Omega_u = \emptyset$.

De plus, la continuité du déplacement est requise aux différentes interfaces :

$$\mathbf{u}^{(out)} - \mathbf{u}^{(in)} = \llbracket \mathbf{u} \rrbracket = \mathbf{0} \quad \text{sur } \Gamma^{(i)} \quad (8)$$

Pour les besoins du calcul par éléments finis, le problème aux limites local (Eqs. 1-8) est réécrit sous la forme faible suivante :

$$\int_{\Omega^{(i)}} \boldsymbol{\sigma}^{(i)}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\epsilon}^{(i)}(\boldsymbol{\delta}\mathbf{u}) d\Omega + \int_{\Gamma^{(i)}} (\boldsymbol{\sigma}^{(i)} \cdot \mathbf{n}^{(i)}) \cdot \boldsymbol{\delta}\mathbf{u} d\Gamma - \int_{\Omega^{(i)}} \mathbf{b}^{(i)} \cdot \boldsymbol{\delta}\mathbf{u} d\Omega - \int_{\partial\Omega^F} \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\delta}\mathbf{u} d\Gamma = \mathbf{0} \quad (9)$$

Dans Eq. (9), le vecteur déplacement inconnu \mathbf{u} est supposé suffisamment régulier et cinématiquement admissible, i.e. vérifiant $\boldsymbol{\delta}\mathbf{u} = \mathbf{0}$ sur $\partial\Omega^u$.

Après introduction des lois de comportement de volume et d'interface,

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C} : \boldsymbol{\epsilon} \quad \text{sur } \Omega, \quad (10)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^s = \boldsymbol{\sigma}_0 + \mathbb{C}^s : \boldsymbol{\epsilon}^s \quad \text{sur } \Gamma_1, \quad (11)$$

et réutilisation du théorème de la divergence, Eq. (9) devient :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\delta}\mathbf{u}) : \mathbb{C} : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) d\Omega + \int_{\Gamma_1} \mathbf{P}\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\delta}\mathbf{u})\mathbf{P} : \mathbb{C}^s : \mathbf{P}\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})\mathbf{P} d\Gamma \\ & = \int_{\Omega} \boldsymbol{\delta}\mathbf{u} \cdot \mathbf{b} d\Omega + \int_{\partial\Omega^F} \boldsymbol{\delta}\mathbf{u} \cdot \mathbf{F} d\Gamma + \int_{\partial\Gamma_1} \mathbf{P}\boldsymbol{\delta}\mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{F}} dl - \int_{\Gamma_1} \mathbf{P}\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\delta}\mathbf{u})\mathbf{P} : \boldsymbol{\sigma}_0 d\Gamma \end{aligned} \quad (12)$$

Dans Eqs. (10) et (12), Ω désigne l'union de tous les sous-domaines $\Omega^{(i)}$ ($\Omega = \bigcup_{i=1}^N \Omega^{(i)}$) et Γ_1 désigne l'union de toutes les interfaces $\Gamma^{(i)}$ ($\Gamma_1 = \bigcup_{i=1}^N \Gamma^{(i)}$). Les quantités $\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{P} = \boldsymbol{\epsilon}^s$ et $\mathbf{P} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{u}^s$ désignent le tenseur de déformation surfacique $\boldsymbol{\epsilon}^s$ et le vecteur de déplacement surfacique \mathbf{u}^s .

Dans Eq. (12), $\tilde{\mathbf{F}}$ est la force extérieure appliquée à $\partial\Gamma_1$. L'intégrale correspondante sur $\partial\Gamma_1$ s'annule si l'interface Γ_1 est fermée. \mathbb{C} et \mathbb{C}^s sont des tenseurs d'élasticité isotrope du 4^{ème} ordre, dépendant de l'espace, du volume Ω et de la surface Γ_1 , respectivement. Plus précisément, \mathbb{C} est nul partout sauf dans la matrice (phase (N)) alors que \mathbb{C}^s change d'une interface à l'autre selon la relation, [2]:

$$\mathbb{C}_{ijkl}^s = \lambda_s P_{ij} P_{kl} + \mu_s (P_{ik} P_{jl} + P_{il} P_{jk}) \quad (13)$$

où λ_s et μ_s sont les constantes surfaciques de Lamé et \mathbf{P} l'opérateur de projection surfacique défini dans Eq. (5).

Enfin, dans Eq. (10), la contrainte $\boldsymbol{\sigma}_0$ est telle que $\boldsymbol{\sigma}_0 = \tau_0 \mathbf{P}$ où τ_0 représente une tension de surface résiduelle à l'interface. τ_0 est pris égal à 0 dans les applications à venir.

3 Applications numériques

3.1. A propos de la discrétisation par XFEM et Level-Set

Pour résoudre le problème aux limites présenté précédemment, une approche utilisant la méthode des éléments finis étendus (XFEM) combinée à la technique du Level-Set est déployée. Le domaine bidimensionnel (Ω) est alors discrétisé en un ensemble d'éléments finis triangulaires à 3-nœuds (P1), où le vecteur de déplacement plan est approximé par :

$$\begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix}^h = \sum_{i=1}^{n=3} N_i(x) \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix} + \sum_{j=1}^{m \leq 3} N_j(x) \psi(x) \begin{pmatrix} a_j \\ b_j \end{pmatrix} \quad (14)$$

avec $N_i(x)$ une fonction de forme polynomiale complète de degré 1, $\psi(x)$, une fonction d'enrichissement définie sur le domaine $\Omega^{(i)}$ pouvant avoir comme expression,

$$\psi(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x \in \Omega^{(i)} \\ 0 & \text{if } x \notin \Omega^{(i)} \end{cases}, \quad (15)$$

ou

$$\psi(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } \chi(x) > 0 \\ -1 & \text{if } \chi(x) < 0 \end{cases}, \quad (16)$$

selon que $\Omega^{(i)}$ représente un vide ou une fissure. Dans Eq. (16), $\chi(x)$ est une autre fonction Level-Set extraite de [6] non donnée ici, avec d'autres détails relatifs à la discrétisation par éléments finis du problème mathématique traité qu'on peut trouver dans [1]. Il est à noter que dans Eq. (14), u_i et v_i représentent des degrés de liberté réels, tandis que a_i et b_i représentent des degrés de liberté fictifs liés à l'enrichissement.

L'implémentation numérique des équations algébriques linéaires résultant de la discrétisation par élément finis s'est faite dans Matlab. Elle a donné lieu à un code de calcul que nous avons utilisé pour étudier l'influence des nano-vides, et des nano-vides qui deviennent des nano-fissures, sur les propriétés effectives élastiques de milieux les contenant, calculées par homogénéisation périodique.

3.2. Effet de la taille et de la fraction volumique d'une cavité sur le module de compressibilité élastique

On considère une matrice en aluminium ($E_M = 70\text{GPa}$ et $\nu_M = 0.32$.) avec un arrangement hexagonal des vides (pores). Pour les propriétés surfaciques de l'interface, les constantes de Lamé suivants obtenus by Miller et Shenoy grâce des calculs *ab initio* ont été adoptés, [7] :

$$\lambda_s = 3.48912 \text{ N/m}, \quad \mu_s = -6.2178 \text{ N/m} \Rightarrow K'_s < 0 \quad (33)$$

$$\lambda_s = 6.84200 \text{ N/m}, \quad \mu_s = -0.3750 \text{ N/m} \Rightarrow K'_s > 0 \quad (34)$$

$$\lambda_s = 0 \text{ N/m}, \quad \mu_s = 0 \text{ N/m} \Rightarrow K'_s = 0 \quad (35)$$

Les résultats numériques concernant le module de compressibilité adimensionnel ($k^* = \frac{k'}{k_M}$ avec $k' = (\lambda + 2\mu)/3$), comparés aux résultats obtenus dans [2] et [8] sont reportés sur la Fig. 2. Ces résultats montrent le rôle de l'énergie de surface à travers celui de (K'_s) dans l'évolution de la propriété élastique examinée. Le bon accord constaté entre les résultats constitue une première validation numérique du code développé.

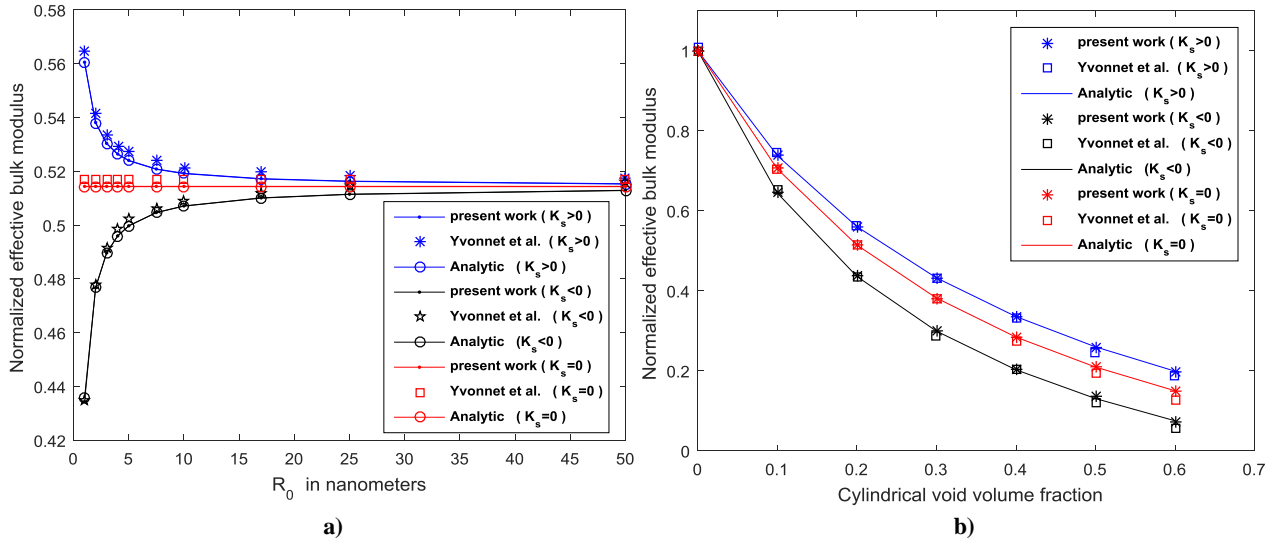


Fig. 2 Module de compressibilité plan versus a) rayon du vide and b) fraction volumique du vide (graphe extrait de [1]).

3.3. Un cas théorique intéressant de rayon très faible de vide

On garde le même système matériel que précédemment (E_M , ν_M et K'_s). Le module de compressibilité est calculé pour différentes valeurs du rayon (R_0) et de la fraction volumique (f) du vide variant dans les intervalles $[0, 0.5 \text{ nm}]$ et $[0.1, 0.6]$, respectivement.

Sur la Fig. 3, on observe qu'il existe une taille critique théorique (non physique) $R_0^c = 0.04145 \text{ nm}$ au delà de laquelle le milieu poreux devient plus rigide que la matrice. L'existence possible d'un tel matériau grâce à un traitement de surface adéquat, restant à trouver, a été évoquée dans [5]. Il est à noter également que la valeur non physique trouvée de R_0^c est liée aux paramètres matériau du comportement surfaciques retenus. D'autres valeurs différentes de ces derniers conduiraient a priori à des valeurs différentes de R_0^c .

3.4. Cas des nano-vides devenant des nano-fissures

On garde le même système matériel que précédemment (E_M , ν_M et K'_s). On fait tendre les vides vers des fissures par aplatissements successifs. La fraction volumique du vide aplati est donnée par $\frac{\pi f'}{2c}$ avec $f' = a/w$ et $c = a/b$, a et b étant les valeurs des demi-axes du vide de

forme elliptique. On fixe $f' = a/w = 0.4$ et on fait varier $c = a/b$ entre 1 et 40. Pour $c = 40$ et $f' = 0.4$, la fraction volumique du vide aplati $f \sim 1.6\%$.

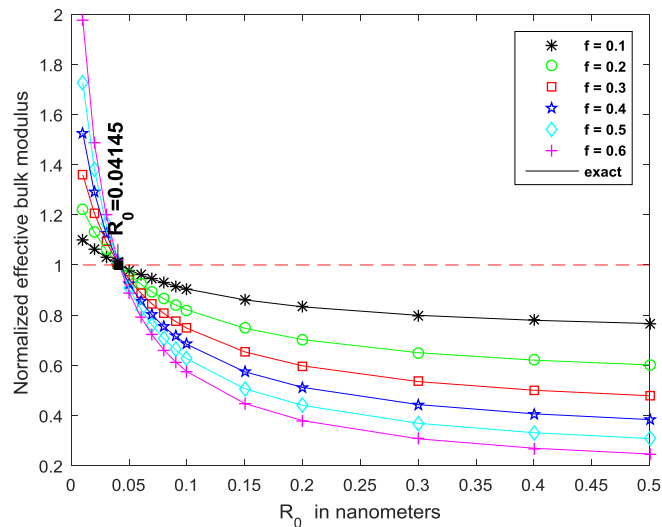


Fig. 3 Module de compressibilité effectif versus rayon du vide en dessous de 0.5 nm pour différentes fractions volumiques du vide (graphe extrait de [1]).

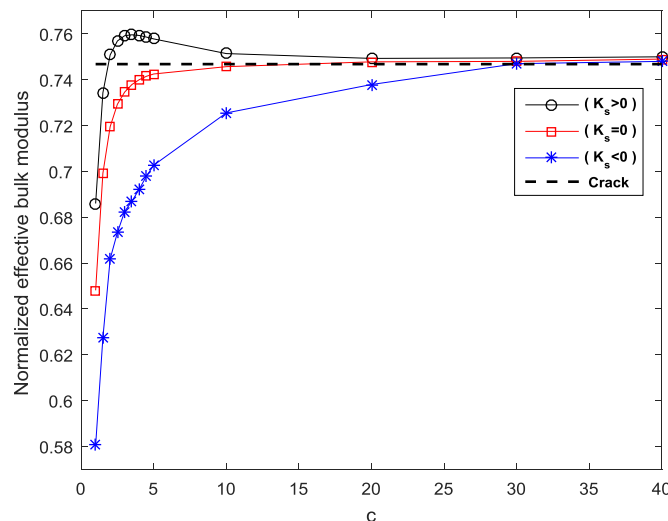


Fig. 4 Module de compressibilité effectif versus le coefficient d'aplatissement c pour différentes valeurs de K'_s (graphe extrait de [1]).

Le graphe de la Fig. 4 montre que le module d'élasticité effectif tend inévitablement vers celui de la fissure, calculé séparément. L'effet de l'énergie de surface s'estampe plus ou moins vite avec l'aplatissement.

3.5. Cas des "nano"-fissures multiples

Le code développé a été exploité pour analyser l'effet de la multiplication des fissures sur le module d'élasticité du système matériel étudié ($\nu = 0.4$, $E_M = 70\text{GPa}$, $\nu_M = 0.32$). Il ressort de cette étude que la multiplication des petites fissures pour la même longueur totale de fissure est favorable à la rigidité du matériau, au moins pour le module de compressibilité, qu'on trouve plus élevé pour des fissures plus petites et plus nombreuses. L'outil de simulation montre aussi que, par rapport au repère de travail retenu, les fissures horizontales sont moins favorables au module de compressibilité que les fissures verticales, que les fissures orientées aléatoirement sont entre les deux, mais tendent vers le cas le moins favorable (fissures horizontales) lorsque leur densité augmente.

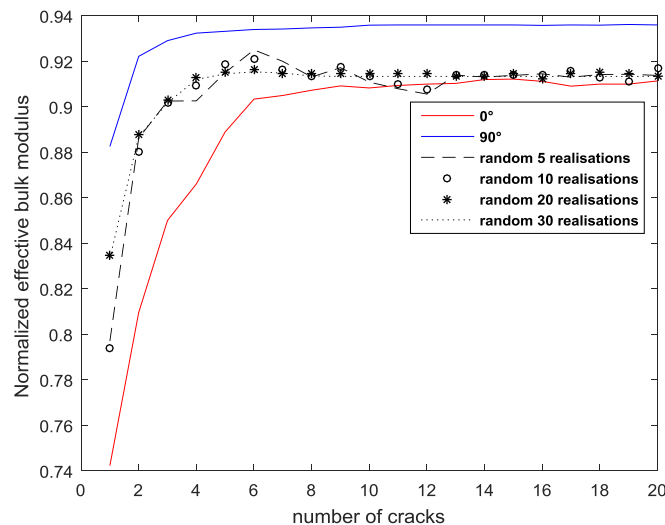


Fig. 5 Module de compressibilité effectif versus le nombre de fissures pour différentes orientations (graphe extrait de [1]).

Conclusions

Dans ce travail, un code de calcul, développé dans Matlab, sur la base de la méthode XFEM et de la technique de Level-Set, a été déployé pour faire différentes expérimentations numériques dont il ressort les observations suivantes :

- L'existence, pour le modèle d'interface adopté, d'une valeur critique encore théorique (non physique) au delà de laquelle le milieu poreux est plus rigide que la matrice plus lourde.
- L'évanescence de l'effet de l'énergie de surface des nano-vides au delà d'un certain aplatissement de ces derniers.
- La multiplication des fissures pour une même longueur totale préserve le module d'élasticité du matériau fissuré comparé à une unique grande fissure.

Références

1. Kired MR, Hachi BE, Hachi D, Haboussi M 2019 Effects of nano-voids and nano-cracks on the elastic properties of a host medium: XFEM modeling with Level-Set function and

- free surface energy, *Acta Mechanica Sinica*. (<https://doi.org/10.1007/s10409-019-00843-4>)
2. Yvonnet J, Quang HL, He QC. 2008 An XFEM/level set approach to modelling surface/interface effects and to computing the size-dependent effective properties of nanocomposites. *Comput. Mech.* **42**, 119–131. (doi:10.1007/s00466-008-0241-y)
 3. Ren SC, Liu JT, Gu ST, He QC. 2014 An XFEM-based numerical procedure for the analysis of poroelastic composites with coherent imperfect interface. *Comput. Mater. Sci.* **94**, 173–181. (doi:10.1016/j.commatsci.2014.03.047).
 4. Gurtin ME, Murdoch I, A. 1975. A continuum theory of elastic material surfaces. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, **57**(4), 291–323. doi:10.1007/bf00261375
 5. Duan HL, Wang J, Karihaloo BL, Huang ZP. 2006 Nanoporous materials can be made stiffer than non-porous counterparts by surface modification. *Acta Mater.* **54**, 2983–2990. (doi:10.1016/j.actamat.2006.02.035)
 6. Sukumar N, Chopp DL, Moës N, Belytschko T. 2001 Modeling holes and inclusions by level sets in the eXtended Finite-Element Method. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **190**, 6183–6200. (doi:10.1016/S0045-7825(01)00215-8)
 7. Miller RE, Shenoy VB. 2000 Size-dependent elastic properties of nanosized structural elements. *Nanotechnology* **11**, 139–147. (doi:10.1088/0957-4484/11/3/301)
 8. Quang HL, He QC. 2009 Estimation of the effective thermoelastic moduli of fibrous nanocomposites with cylindrically anisotropic phases. *Arch. Appl. Mech.* **79**, 225–248. (doi:10.1007/s00419-008-0223-8)