

Simulation directe du frittage à l'échelle des grains par diffusion surfacique et volumique

D. Pino Muñoz¹, J. Bruchon¹, F. Valdivieso¹, S. Drapier¹

¹ Centre SMS, Département MPE, École Nationale Supérieure des Mines de Saint-Étienne, France, {pino,bruchon,valdivieso,drapier}@emse.fr

Résumé — Dans le cadre de la simulation du procédé du frittage à l'échelle des grains, une méthode permettant de simuler le transport de matière par diffusion surfacique et volumique est mise œuvre. Une approche eulérienne de type Level-Set est utilisée. Le flux de matière étant relié au gradient de pression, le problème mécanique doit être résolu dans un domaine de calcul qui est constitué par les grains et le milieu environnant. Les grains ont un comportement élastique linéaire tandis que le milieu environnant est considéré comme un fluide Newtonien incompressible. Cette méthode permet de suivre l'évolution d'un ensemble de grains au cours du frittage. Plusieurs cas ont été étudiés en 2D et 3D.

Mots clés — Frittage, Diffusion surfacique, Diffusion volumique, Level-Set, Éléments finis.

1 Introduction

Le frittage, qui est un procédé de fabrication très utilisé dans l'industrie, peut être décrit comme le passage d'un compact pulvérulent à un matériau cohérent par thermo-activation des mécanismes de diffusion de matière. Notre objectif est de modéliser et simuler l'évolution d'un empilement granulaire durant le frittage. Ici, nous nous concentrons sur deux mécanismes de diffusion : la diffusion surfacique et la diffusion en volume. Si les modèles décrivant ces mécanismes sont connus (section 2), par contre la stratégie numérique utilisée pour les combiner et piloter la résolution dans un cadre de calcul intensif est originale (section 3) et donne d'ores et déjà des résultats probants (section 4).

2 Modélisation de la diffusion en surface et de la diffusion en volume

Les deux mécanismes de diffusion peuvent être modélisés par l'intermédiaire de la loi de Fick. Cette loi est donnée par l'Equation (1) qui relie le flux de matière \vec{j} au gradient de potentiel chimique $\vec{\nabla}\mu$ et à la mobilité m^A de l'espèce qui diffuse :

$$\vec{j} = -m^A \vec{\nabla}\mu^A \quad (1)$$

Diffusion surfacique : Le potentiel chimique d'une espèce en surface d'un grain est donné par l'Equation (2).

$$\mu = \Omega\gamma\kappa \quad (2)$$

où Ω est le volume molaire $\left[\frac{m^3}{mol}\right]$, γ est la tension surfacique $\left[\frac{J}{m^2}\right]$ et κ est la courbure moyenne $\left[\frac{1}{m}\right]$.

Diffusion volumique : On utilise les développements de Garikipati et al. [1] pour modéliser la diffusion en volume. Les grains ont un comportement élastique linéaire isotrope. Le problème est alors posé en termes d'un mélange binaire d'atomes et de lacunes. L'énergie libre \hat{h} du système est calculée au niveau de la maille atomique. Le potentiel chimique μ est donné par la variation de l'énergie libre \hat{h} par rapport à la concentration d'atomes C_a ($\mu = \partial\hat{h}/\partial C_a$). De la même façon, la contrainte σ est donnée par la variation de l'énergie libre par rapport à la déformation ε ($\sigma = \partial\hat{h}/\partial\varepsilon$). Pour calculer le flux de matière en volume, on résout de façon couplée la deuxième loi de Fick ($\partial C_a/\partial t = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}$, cette loi établit la conservation de la matière) et le problème mécanique (dans lequel la loi de Laplace intervient). Le

potentiel chimique d'une espèce située en volume d'un grain est donné par l'Equation (3).

$$\mu = \mu_0 + \frac{\partial \hat{h}}{\partial C_a} = \mu_0 + (1 - f) \Omega_{A_0} p + RT \log \frac{C_A}{C_{A_0}^{eq}} \quad (3)$$

où μ_0 est le potentiel chimique à l'état d'équilibre libre de contrainte, le volume occupé par une lacune est donné par une fraction f du volume molaire Ω_{A_0} du matériau, p est la pression, R est la constante des gaz parfaits, T est la température, C_A est la concentration d'atomes, et finalement C_A^{eq} est la concentration d'atomes à l'état d'équilibre.

3 Stratégie numérique

On utilise une approche Eulérienne de type Level-set, qui permet de gérer implicitement les changements de topologie. Par contre, le milieu environnant doit être pris en compte. Il faut donc établir un couplage entre le comportement mécanique du milieu environnant et celui du solide. Le problème mécanique prend en compte les deux milieux séparés par l'interface Γ . Le solide est compressible et a un comportement élastique linéaire, tandis que le milieu environnant est considéré comme un fluide Newtonien incompressible. La loi de Laplace est imposée sur l'interface Γ qui les sépare. Une formulation variationnelle en vitesse/pression qui prend en compte les deux milieux et l'interface a été développée. La courbure est très importante lors du calcul mécanique, parce qu'elle détermine les contraintes dans le solide par l'intermédiaire de la loi de Laplace. La courbure est obtenue à partir de la dérivée seconde de la Level-Set.

La loi de Laplace apparaît dans la formulation variationnelle comme une intégrale sur la surface des grains, cette intégrale a été calculée en reconstruisant l'interface à partir de la Level-Set. Le problème mécanique est résolu en utilisant des éléments finis de type P1+/P1 sur un maillage non structuré composé de simplexes, et est couplé au calcul des flux volumiques et surfaciques, donc des vitesses volumiques et surfaciques, qui dépendent du gradient de pression.

La vitesse de frittage est liée au gradient de la pression. Étant donné que la pression est discontinue à l'interface, on calcule donc cette vitesse avec le gradient de la pression légèrement à l'intérieur des grains, et ensuite, on l'étend dans un voisinage de l'interface pour pouvoir transporter la Level-Set. On a choisi d'étendre la vitesse de sorte que sa valeur ne change pas dans la direction normale à la surface : $\vec{\nabla} v_n \cdot \vec{\nabla} \phi = 0$, où v_n est la vitesse normale et ϕ est la Level-Set.

4 Résultats numériques

Notre modèle a été implémenté dans la librairie éléments finis CimLib, qui est développée au CEMEF (MinesParisTech). Les résultats de ces simulations seront détaillés dans notre présentation.

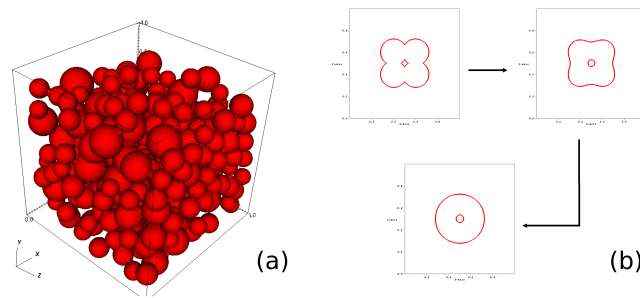


FIG. 1 – (a) Frittage par diffusion surfacique sur un ensemble des grains en 3D. (b) Frittage par diffusion en volume sur quatre grains en 2D.

Références

- [1] K. Garikipati, L. Bassman, and M. Deal. A lattice-based micromechanical continuum formulation for stress-driven mass transport in polycrystalline solids. *J. Mech. Phys. Sol.*, 49(6) :1209–1237, 2001.