

Modélisation thermomécanique d'un matériau composite alumine/aluminium: optimisation de l'architecture et calcul de la conductivité thermique apparente

N. Ferguen^a, E. Bellenger^a, M. Guessasma^a, C. Pélegris^a, C. Cogné^a
M. Outirite^b, C. Courtois^b, A. Leriche^b, O. Rigo^c

^a LTI, IUT de l'Aisne, 48 rue d'Ostende, St-Quentin France

^b UVHC, LMCPA, Z.I. du champ de l'Abbesse, 59600 Maubeuge France

^c Sirris, Liège Science Park Rue du Bois Saint-Jean 12, BE 4102 Seraing Belgique

Résumé — Cette étude a pour but de développer de nouveaux matériaux capables de répondre à des cahiers des charges multi-critères permettant d'allier des propriétés thermiques et mécaniques. Ces matériaux à gestion de flux thermiques doivent être capables d'assurer et de gérer le transfert de chaleur de manière à ce que les éléments fonctionnels puissent être maintenus à leur température nominale de fonctionnement. Ces matériaux à gradient de propriétés sont élaborés en plusieurs étapes et forment un composite alumine/aluminium. Un modèle numérique a été développé afin d'optimiser thermiquement l'architecture des phases en présence. L'originalité de ce modèle numérique réside dans l'utilisation conjointe de la méthode des éléments discrets (MED) et de la méthode des éléments finis (MEF) en 3D.

Mots clés — composites, FGMs, céramique, conductivité thermique, MED, MEF

1 Introduction

Les matériaux composites offrent de nombreux avantages par rapport aux matériaux classiques. Il peut s'agir de l'amélioration de la rigidité, de la tenue à la fatigue, de la résistance à la corrosion, de la conductivité thermique, etc. Une classe de la famille des matériaux composites, appelée matériaux à gradient de fonction (FGMs¹), suscite un intérêt particulier dans le développement des matériaux fonctionnels. Cette classe de matériaux, qui fait l'objet de récentes études, est caractérisée par une variation spatiale de la microstructure. Ces matériaux offrent l'avantage d'avoir une gradation des propriétés et permettent ainsi d'augmenter ou de moduler des performances telles que la réduction des contraintes locales [8, 11] ou encore l'amélioration du transfert de chaleur [9].

Ce travail a pour objectif de développer un matériau à gradient de fonction alumine/aluminium capable de réaliser un meilleur management thermique. Les applications visées concernent le domaine du transport terrestre et particulièrement l'industrie automobile pour l'évacuation de la chaleur dans les blocs moteurs et le refroidissement des pièces électroniques. Dans une première partie, nous nous intéresserons aux différentes étapes d'élaboration du matériau. Nous présentons ensuite la partie modélisation numérique du procédé d'élaboration du matériau à gradient de fonction, afin d'identifier les points clés du procédé.

Dans cette démarche de modélisation, la méthode des éléments discrets (MED) et la méthode des éléments finis (MEF) ont été utilisées conjointement. Dans un premier temps, le modèle MED nous permet de réaliser l'architecture du matériau à partir d'un empilement granulaire (monidisperse). Ensuite, une analyse thermique du matériau par la MEF permet d'évaluer sa conductivité thermique effective. Dans cette phase d'optimisation, différents paramètres ont été étudiés : l'effet de la rigidité des particules sur le diamètre des interconnexions, ainsi que l'influence du rayon de contact sur la conductivité thermique effective. De plus, un Volume Élémentaire Représentatif (VER) a été défini pour lequel le calcul de la conductivité thermique du matériau ne varie plus d'une manière significative.

1. Functionally Graded Materials

1.1 Elaboration de la mousse d'alumine

Une structure solide en billes de PMMA à granulométrie contrôlée est réalisée grâce à un solvant qui permet une faible dissolution superficielle du polymère et assure des liens aux points de contact des billes. La fusion des billes entre elles dépend de nombreux paramètres telles que la nature chimique du solvant, la température, la durée de la dissolution. Après séchage, une barbotine d'alumine est coulée entre les interstices des billes. Les billes de PMMA sont ensuite éliminées par traitement thermique à faible température. Un chauffage à 200 °C pendant 30 heures permet de brûler une grande quantité de polymère. Enfin, un cycle de frittage permet de consolider la structure.

1.2 Imprégnation de la mousse par l'aluminium

La mousse (préforme) céramique est ensuite imprégnée d'aluminium. Les conditions opératoires du procédé d'imprégnation ont été optimisées à la fois en pression et en température. Il est à noter que l'imprégnation est difficile pour de faibles granulométries (200 - 300 μm). La Fig. 1 résume l'ensemble des étapes du procédé d'élaboration du matériau à gradient.

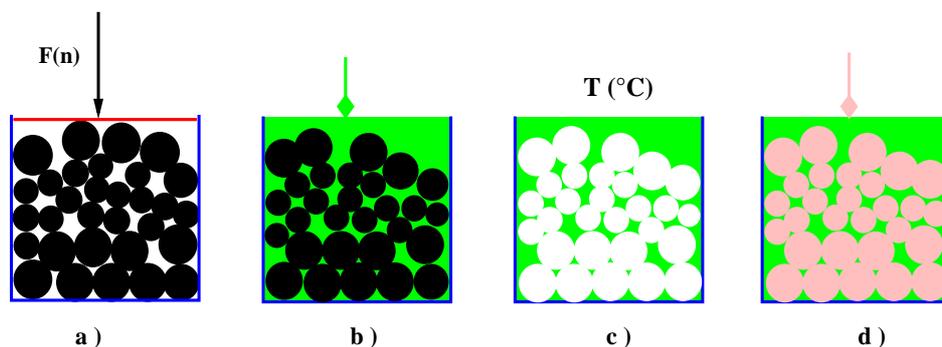
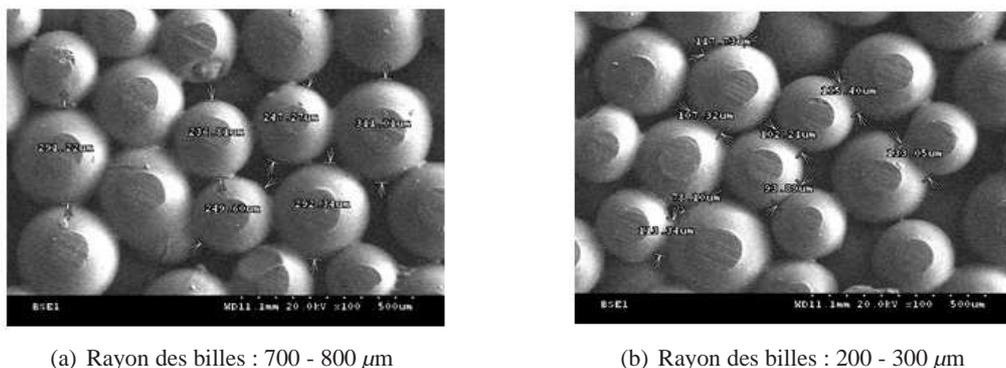


FIGURE 1 – Procédé d'élaboration d'un matériau à gradient alumine/aluminium ; a) empilement et compression de billes en PMMA ; b) barbotine d'alumine coulée dans la préforme ; c) obtention de la mousse d'alumine par élimination des billes de PMMA ; d) imprégnation de la mousse par l'aluminium.

1.3 Contrôle du diamètre d'interconnexion des billes de PMMA

Le diamètre d'interconnexion des billes de PMMA est un facteur clé puisqu'il contrôle le transfert thermique au sein du matériau composite. Cette étude a été développée dans les travaux de M. Descamps et al. [2, 3]. Un dispositif expérimental a été conçu pour quantifier ce diamètre. Un piston est mis en contact avec la surface du lit de billes disposé dans un moule métallique. Un capteur électronique de déplacement est positionné en haut du piston avec une résolution de 1 μm afin d'enregistrer le retrait de la phase polymère. En parallèle, le diamètre d'interconnexion est mesuré par le MEB. Ainsi, il a été possible de corréler le retrait des billes aux diamètres moyens d'interconnexion (cf. Fig. 2).



(a) Rayon des billes : 700 - 800 μm

(b) Rayon des billes : 200 - 300 μm

FIGURE 2 – Détermination par le MEB du diamètre d'interconnexion des billes suivant la granulométrie.

La Fig. 3 représente le matériau élaboré. On peut noter la présence du gradient de porosités (Fig. 3 a) et la phase aluminium (Fig. 3 b).

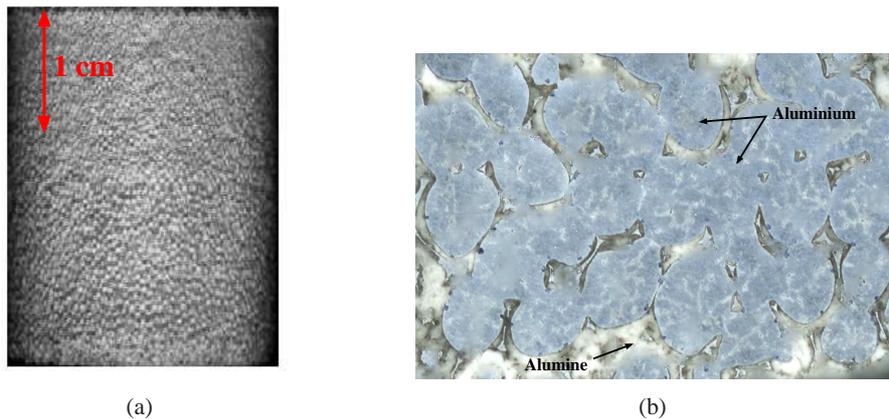


FIGURE 3 – (a) Image d'une préforme à gradient en alumine poreuse avant imprégnation ; (b) Coupe transversale dans le matériau composite après imprégnation de l'aluminium (taille : 700 - 800 μm).

2 Modélisation

Dans la perspective du développement de ce type de matériaux, il est envisagé de modéliser les flux thermiques auxquels seront soumis les matériaux et de déterminer leur conductivité thermique apparente. D'un point de vue bibliographique, il existe de nombreux modèles analytiques de conductivité thermique qui tiennent compte des propriétés intrinsèques de chaque phase ainsi que de leur répartition géométrique. On peut citer des travaux, dans le domaine des milieux granulaires [12], des matériaux poreux [5] ou des céramiques [7] sur lesquels peuvent s'appuyer cette étude.

L'une des difficultés récurrentes concerne la représentation en 3D de la géométrie des structures fractales de la phase composite. En effet, d'un point de vue numérique, il est nécessaire de représenter ce matériau par des géométries périodiques basées sur des éléments générateurs. L'originalité de notre étude par rapport à la bibliographie concerne la forte anisotropie du matériau généré, à la fois isolant et conducteur de chaleur. Des solutions numériques par la méthode des éléments finis sont envisagées dans le domaine mécanique [4, 10], mais très peu d'articles se sont intéressés à la modélisation thermique de ce type de milieux. On peut citer par exemple, les récents travaux de Yun et Evans [13] sur la modélisation de la conductivité thermique dans un empilement aléatoire de billes.

La solution retenue dans ce projet consiste à développer un modèle en plusieurs étapes en tenant compte des propriétés thermiques et de la répartition de chacune des phases.

2.1 Génération d'un empilement aléatoire

La première étape du modèle consiste à modéliser la phase aluminium initialement définie par les billes de PMMA. Afin de représenter le caractère aléatoire de la position des billes, le modèle s'est appuyé sur un code de calcul PFC^{3D} basé sur la méthode des éléments discrets [6]. Cette méthode est utilisée pour décrire un grand nombre de particules en mouvement. La méthode utilisée est basée sur la méthode Dynamique Moléculaire [1]. Elle consiste à intégrer le mouvement de chacune des particules tout en tenant compte de leurs interactions. Après avoir généré les particules dans un moule, puis les avoir laissé sédimenter par gravité, il est possible de tasser la structure de façon plus ou moins importante à l'aide d'une paroi chargée en vue d'interconnecter les particules entre elles. (Fig. 4 a).

Le contact entre les particules est défini par une loi de contact élastique linéaire basée sur l'interpénétration interparticulaire (Fig. 4 b). Les interpénétrations sont dues aux déplacements relatifs des particules sous l'effet de la force normale F_i^n (Eq. 1).

$$F_i^n = K^n U^n n_i \quad (1)$$

Avec K^n la raideur normale au contact, U^n le déplacement normal et n_i la normale au point de contact i .

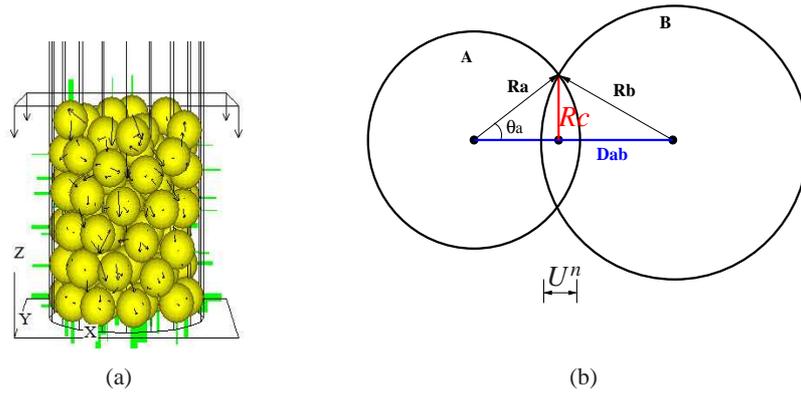


FIGURE 4 – Modélisation d'un empilement de billes de PMMA pour la génération de la phase d'aluminium du composite. (a) Empilement monodisperse contraint ; (b) Contact entre deux billes avec interpénétration (U^n).

Dans ce travail, l'utilisation de la MED pour la génération d'empilement de billes de PMMA nécessite un modèle très simple de type ressort linéaire pour décrire les interactions de contact. En effet, la MED est utilisée comme un moyen pour construire une architecture à gradation avec des interconnexions contrôlées. Une loi d'interaction simple avec des paramètres choisis de façon relativement arbitraire permet de réduire le temps de calcul tout en obtenant des architectures contrôlées pour une étude paramétrée.

2.2 Calcul du rayon de contact

Les particules sont supposées déformables permettant ainsi des interconnexions de forme circulaire avec un rayon de contact Rc (cf. Fig. 4 b). Par exemple, pour une paire de particules A et B en contact, de rayons respectifs R_a et R_b , on détermine la force normale agissant aux points de contact. Nous pouvons donc calculer, via les Eqs. 2 et 3, le rayon d'interconnexion Rc et la pénétration engendrée U^n :

$$Rc = \sin(\theta) \cdot R_a, \quad \theta_a = \arccos \left[\frac{D_{ab}^2 + R_a^2 - R_b^2}{2D_{ab} \cdot R_a} \right] \quad (2)$$

$$U^n = D_{ab}^2 - (R_a^2 + R_b^2) \quad (3)$$

Avec θ_a l'angle de contact et D_{ab} la distance entre les centres des particules A et B.

2.3 Génération du matériau composite

Après sédimentation, les coordonnées des billes sont injectées dans le logiciel de conception mécanique SolidWorks. Les billes d'aluminium (cf. Fig. 5 a) sont ensuite insérées dans un cylindre poreux ayant les propriétés de l'alumine (cf. Fig. 5 b). Les propriétés affectées à chacune des phases sont résumées dans le Tab. 1. Les effets de bord rencontrés expérimentalement sont artificiellement supprimés pour ne pas biaiser les analyses numériques.

TABLE 1 – Propriétés thermophysiques du composite

	Chaleur spécifique ($J/kg.K$)	Conductivité thermique ($W/m.K$)	Masse volumique (kg/m^3)
Alumine	850	30	3960
Aluminium	875	193	2780

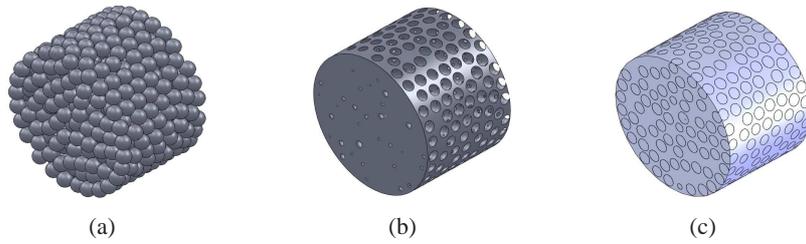


FIGURE 5 – Assemblage du matériaux composite. a) Phase d'aluminium, b) Phase d'alumine et c) Assemblage des phases a) et b).

2.4 Simulation numérique du transfert thermique

Dans ces conditions, les deux phases sont assemblées puis maillées. Il est à noter des difficultés de maillage pour des diamètres de particules inférieurs à $300 \mu\text{m}$. En effet, les particules interconnectées génèrent des surfaces de contact très fines ne permettant pas d'être correctement détectées par le mailleur du logiciel. Après maillage de la structure, l'équation de conduction de la chaleur (loi de Fourier) est résolue par la méthode des éléments finis en tout point du domaine.

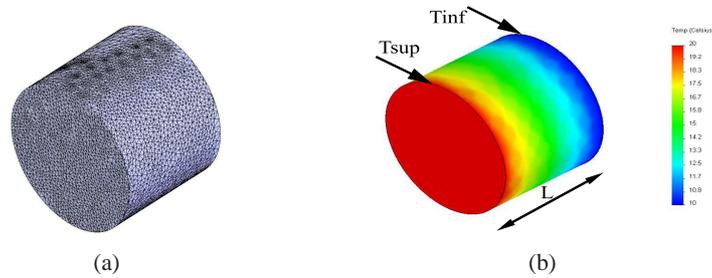


FIGURE 6 – Modélisation du matériau composite. a) Maillage par la MEF et b) Calcul du gradient de température par la MEF.

Afin de limiter le temps de calcul, des hypothèses de périodicité et de symétrie ont été faites et la détermination du Volume Élémentaire Représentatif (VER) de l'échantillon a été menée. Le VER est défini par la valeur minimale du volume utilisé pour l'évaluation de la conductivité thermique effective (k_{eff}) au-dessus de laquelle sa valeur ne varie plus de manière significative. La méthode retenue consiste à imposer une différence de température sur les deux faces opposées de l'échantillon (Fig. 6 b), l'ensemble des autres faces étant supposées adiabatiques. Le flux de chaleur lorsque l'équilibre est atteint, permet alors de calculer la conductivité apparente (Eq. 4).

$$k_{eff} = \sum q_i \cdot \frac{L}{A} \cdot \frac{1}{(T_{sup} - T_{inf})} \quad (4)$$

avec $\sum q_i$, L , A , et $(T_{sup} - T_{inf})$ respectivement la somme des flux de chaleur (W), l'épaisseur du matériau (m), l'aire de la section du matériau (m^2), et l'écart de température (K) entre les deux faces opposées.

3 Résultats et discussions

3.1 Influence de la rigidité de contact normale k^n

La Fig. 7 montre l'évolution de la pénétration (U^n) et du rayon de l'aire de contact R_c en fonction des valeurs de la rigidité de contact normale k^n . Les calculs sont obtenus pour un empilement monodisperse (rayon des particules = $500 \mu\text{m}$) soumis à une vitesse de compression constante. On remarque que le rayon de contact augmente avec la rigidité normale k^n . Cependant, l'évolution devient négligeable au-delà d'une rigidité de 1000 N/m . Ainsi, on pourra définir des valeurs de la rigidité pour lesquelles on peut

déterminer la taille des interconnexions et étudier leurs effets sur le calcul de la conductivité thermique du matériau.

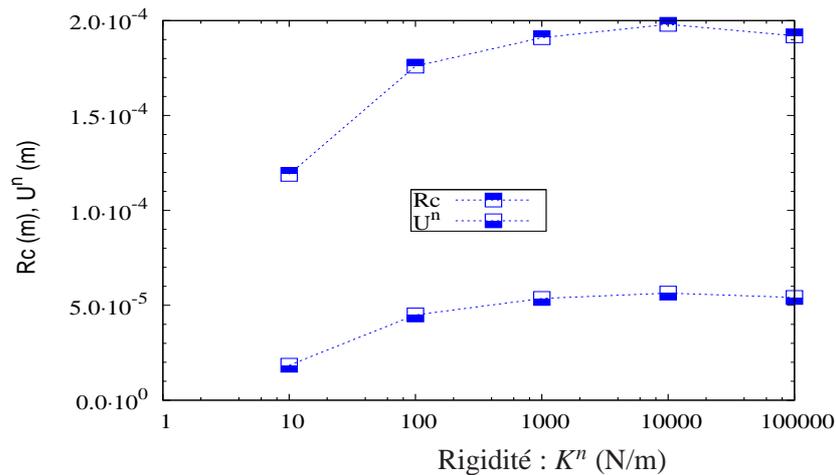


FIGURE 7 – Evolution du rayon de l'aire de contact R_c et de la pénétration U^n en fonction de la rigidité des particules, dans un empilement granulaire monodisperse (rayon des billes = $500 \mu\text{m}$).

3.2 Optimisation du VER

L'objectif de cette partie est de définir un Volume Élémentaire Représentatif (VER) pour le calcul de la conductivité thermique du matériau. Différentes simulations ont été réalisées sur des VER cubiques d'arêtes L contenant des particules d'aluminium ayant un rayon de $500 \mu\text{m}$. La Fig. 8 montre l'évolution de la conductivité thermique effective du matériau en fonction du rapport de la taille du cube L sur le rayon des particules R pour des tailles d'interconnexions moyennes (30 et $90 \mu\text{m}$).

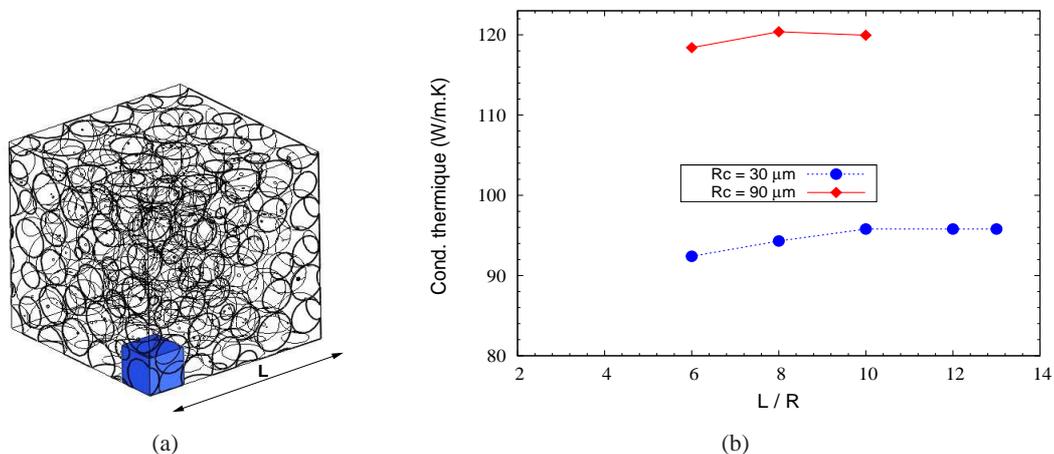


FIGURE 8 – (a) Dimensions du VER - (b) Evolution de la conductivité thermique effective en fonction de la taille du VER pour 2 interconnexions.

On note d'une part que la conductivité thermique dépend de la taille d'interconnexion des particules. Sachant que d'un point de vue expérimental, il n'est pas possible d'infiltrer des préformes céramiques (cf. Fig. 3) pour des diamètres d'interconnexions inférieurs à $75 \mu\text{m}$, cette étude permet de conclure qu'un VER d'arête 10 fois supérieure au rayon des particules conduit à des valeurs représentatives de la conductivité thermique du matériau.

3.3 Influence du nombre de billes

L'effet du nombre de particules sur la conductivité thermique est montré sur la Fig. 9. Le calcul a été obtenu avec un diamètre moyen d'interconnexions de $35 \mu\text{m}$. On remarque que la conductivité thermique du matériau évolue de 85 W/m.K pour 8 billes jusqu'à 95 W/m.K avec 100 particules. Au-delà, la valeur de la conductivité thermique ne varie plus de façon significative et elle conserve quasiment la même valeur avec 250 particules.

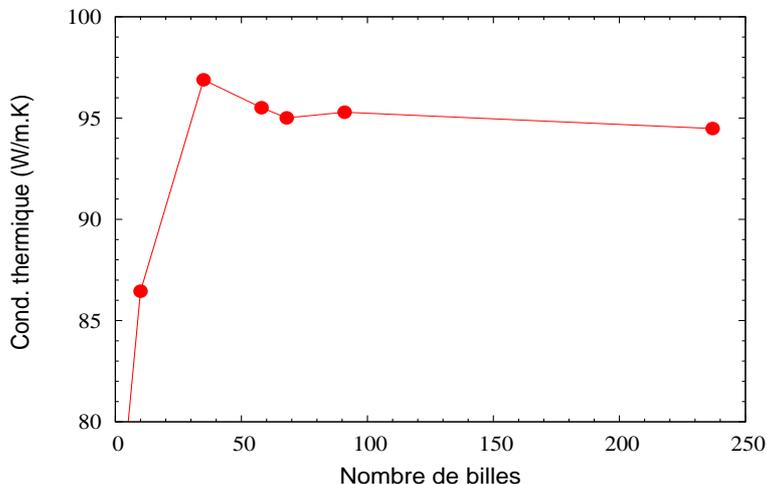


FIGURE 9 – Evolution de la conductivité thermique effective en fonction de l'accroissement du nombre de billes dans le matériau composite (rayon moyen d'interconnexion de $35 \mu\text{m}$).

3.4 Influence de la taille des billes

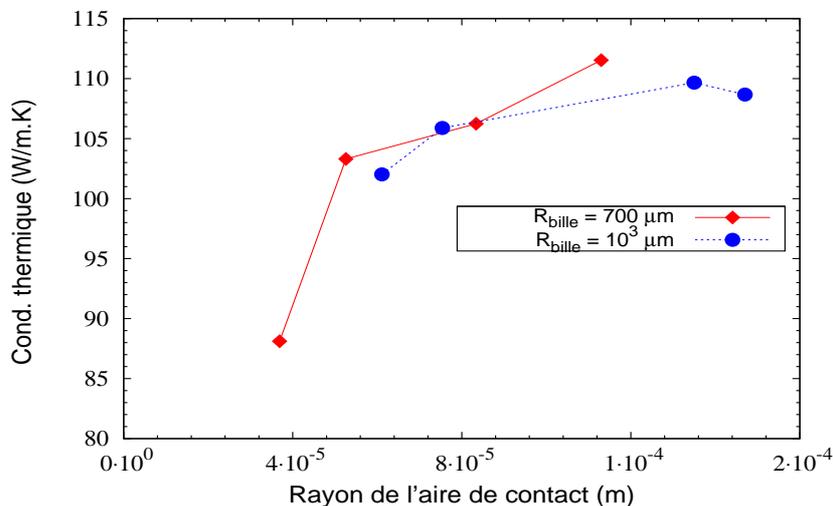


FIGURE 10 – Evolution de la conductivité thermique effective en fonction de la taille des billes dans le matériau composite.

La Fig. 10 montre l'évolution de la conductivité thermique effective en fonction du rayon moyen d'interconnexion pour différentes tailles de billes. On remarque une augmentation de cette conductivité avec l'augmentation de la taille des interconnexions. Les résultats semblent montrer une stabilisation de la conductivité thermique effective lorsque la taille des interconnexions augmente. On peut mettre aussi en évidence une conductivité du matériau plus importante avec des tailles de billes plus petites à taille d'interconnexions équivalentes. En effet, avec des particules de petites tailles, la fraction volumique d'aluminium (phase conductrice) augmente.

4 Conclusion et perspectives

En conclusion, un procédé original d'élaboration de matériaux à gradient de fonction a été développé, en vue d'améliorer ses propriétés thermiques. La maîtrise du procédé nécessite une meilleure connaissance de l'architecture des phases en présence, des interconnexions entre particules et de la nature des interfaces. En parallèle, un modèle numérique a été développé afin de caractériser la conductivité thermique effective du matériau. Ce modèle tient compte des caractéristiques physiques et géométriques de chaque phase. Après optimisation du volume élémentaire représentatif, les premiers résultats mettent en évidence l'influence de la taille des particules et de leurs diamètres d'interconnexions sur l'amélioration de la conductivité thermique effective du matériau.

A court terme, le modèle sera validé à partir des essais expérimentaux sur des matériaux prototypes. De plus, une analyse paramétrique du modèle sera réalisée pour identifier les paramètres clés du modèle.

Références

- [1] P.A. Cundall, O.D.L. Strack. *A discrete numerical model for granular assemblies*, Géotechnique, 29, 47-65, 1979.
- [2] M. Descamps, O. Richart, P. Hardouin et al. *Manufacture of macroporous β -tricalcium phosphate bioceramics*, J. of European Ceramic society, 28, 149 - 157, 2008.
- [3] M. Descamps, O. Richart, P. Hardouin et al. *Synthesis of macroporous β -tricalcium phosphate with controlled porous architectural*, Ceramics International, 34, 1131 - 1137, 2008.
- [4] J.K. Farooqi, M.A. Sheikh. *Finite element modelling of thermal transport in ceramic matrix composites*, Computational Materials Science, 37, 361 - 373, 2006.
- [5] S. Grandjean, J. Absi, D. Smith. *Numerical calculations of the thermal conductivity of porous ceramics based on micrographs*, J. of the European Ceramic Society, 26, 2669 - 2676, 2006.
- [6] Itasca Consulting Group. *PFC3D : particle flow code in three dimensions, Ver. 4.0*, Minneapolis, 2008.
- [7] A. Michot, D.S. Smith, S. Degot et al. *Thermal conductivity and specific heat of kaolinite : Evolution with thermal treatment*, Journal of the European Ceramic Society, 28, 2639 - 2644, 2008.
- [8] M. Miyamoto, W.A. Kaysser, B.H. Rabin, et al. *Functionally Graded Materials Design*, Processing and Applications, Kluwer Academic, Dordrecht, 1999.
- [9] A. Öchsner, G.E. Murch and M.J.S. de Lemos. *Cellular and Porous Materials*, WILEY-VCH, 398-417. 2008.
- [10] F. Raether, M. Iuga. *Effect of particle shape and arrangement on thermoelastic properties of porous ceramics*, Journal of the European Ceramic Society, 26, 2653 - 2667, 2006.
- [11] S. Suresh and A. Mortensen. *Fundamentals of Functionally Graded Materials*, IOM Communications, London, 1998.
- [12] V.E. Watson, J.J. McCathy. *Conductivity of granular media with stagnant interstitial fluids via thermal particle dynamics simulation*, Int. J. of Heat and Mass Transfer, 45, 4847 - 4857, 2002.
- [13] T.S. Yun, T.M. Evans. *Three-dimensional random network model for thermal conductivity in particulate materials*, Computers and Geotechnics, 37, 991 - 998, 2010.