



HAL
open science

Développement et calibration d'un modèle DEM/SPH pour le binder jetting de poudres céramiques

Nicolas Lauro, Arnaud Alzina, Benoit Nait-Ali, Philippe Michaud, Olivier
Durand

► **To cite this version:**

Nicolas Lauro, Arnaud Alzina, Benoit Nait-Ali, Philippe Michaud, Olivier Durand. Développement et calibration d'un modèle DEM/SPH pour le binder jetting de poudres céramiques. 16ème Colloque National en Calcul de Structures (CSMA 2024), CNRS; CSMA; ENS Paris-Saclay; CentraleSupélec, May 2024, Hyères, France. hal-04610926

HAL Id: hal-04610926

<https://hal.science/hal-04610926v1>

Submitted on 3 Dec 2024

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Développement et calibration d'un modèle DEM/SPH pour le binder jetting de poudres céramiques

N. Lauro¹, A. Alzina², B. Nait-Ali², P. Michaud², O. Durand¹, L. Boyer¹

¹ Centre de Transfert de Technologies Céramiques (CTTC), {n.lauro, o.durand, l.boyer}@cttc.fr

² IRCER, Université de Limoges, {arnaud.alzina, benoit.nait-ali, philippe.michaud}@unilim.fr

Résumé — Un modèle numérique couplant la DEM et la SPH pour modéliser le procédé de binder jetting est en développement. Ce procédé est en plein essor dans l'industrie céramique, mais nécessite de maîtriser un grand nombre de paramètres, à la fois process et matériaux, afin d'obtenir des produits de qualité. Les modèles DEM et SPH, respectivement pour la partie solide et fluide, sont présentés avant de détailler le procédé de calibration du modèle granulaire en prenant exemple sur deux essais standards de caractérisation de poudres. Enfin le principe du couplage des deux méthodes numériques est présenté.

Mots clés — Binder jetting, DEM, SPH.

1 Introduction

Le binder jetting est une technologie en plein essor. Initialement développée par le MIT et commercialisée en 1993 par Z Corporation, cette technologie répond à beaucoup des problématiques industrielles concernant le prototypage rapide et la fabrication de pièces à petite et moyenne échelle. Le binder jetting base son fonctionnement sur la fabrication couche par couche d'une pièce par éjection d'une encre sur un lit de poudre. L'interaction entre la poudre et l'encre permet la solidification des couches grâce à la présence d'additifs tels que des liants organiques ou des ciments. Contrairement aux autres technologies d'impression 3D, le binder jetting permet d'atteindre des volumes de fabrication industrielles. Bien que cette technologie fût initialement développée pour la fabrication de noyaux de fonderie, la gamme de matériaux utilisés s'est rapidement étendue aux métaux, plastiques et céramiques. Aujourd'hui de nombreux acteurs du domaine céramique s'intéressent activement à cette technologie et cherchent à l'intégrer à leurs activités mais se heurtent à des freins techniques.

Du fait de la nature du procédé de fabrication, les produits obtenus présentent souvent une porosité importante, généralement comprise entre 30 et 50% [1]. Cette porosité peut présenter un avantage pour certaines applications, la filtration par exemple, mais est un inconvénient majeur pour des produits voués à subir de fortes sollicitations mécaniques [2]. C'est pour cette raison qu'il est important de maîtriser la porosité des pièces fabriquées. Cela nécessite de maîtriser à la fois la densité du lit de poudre et la pénétration de l'encre dans la poudre, et ce pour chaque matériau à imprimer. Ce travail étant long et coûteux, il a été naturel pour des chercheurs de développer des modèles numériques permettant de prédire le compactage d'un lit de poudre et la pénétration de l'encre dans le lit de poudre.

La méthode des éléments discrets (DEM) est souvent utilisée pour modéliser des systèmes granulaires et régulièrement employée pour simuler le comportement de lits de poudres [3, 4]. Dans cette optique, il est nécessaire de calibrer le modèle à l'aide d'essais expérimentaux afin de s'assurer de modéliser correctement les propriétés cohésives de la poudre [5, 6]. L'hydrodynamique des particules lissées (SPH) est une méthode particulière régulièrement utilisée en infographie pour modéliser des fluides [7]. Elle est cependant de plus en plus utilisée pour la modélisation microfluidique [8]. Le couplage de ces deux méthodes permettrait d'analyser l'influence de la distribution des grains, de la viscosité du liant et des forces d'interaction solide/liquide sur la propagation du liant dans un lit de poudre.

Ce résumé présente un modèle DEM, développé pour modéliser le comportement de poudres céramiques lors de leurs mise en couche et dont les paramètres ont été calibrés grâce à différents essais

expérimentaux. Le modèle DEM est couplé à un modèle SPH pour modéliser l'interaction entre un fluide et le système granulaire.

2 Modélisation des systèmes granulaires et fluides

2.1 Modélisation du système granulaire par DEM

La méthode des éléments discrets considère un milieu comme étant composé d'un ensemble de particules représentatives. Le comportement macroscopique du système est le résultat des interactions individuelles entre les particules. Chacune des particules représentatives i possède une masse m_i et un rayon r_i . La méthode DEM consiste dans un premier temps à détecter les collisions à travers une recherche de voisins et à calculer les forces s'appliquant ainsi aux particules. L'accélération des particules est alors calculée à partir des forces qui leur sont appliquées ainsi que de leur masse :

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \underline{\mathbf{F}}_i^{collision} + m_i \underline{\mathbf{g}} \quad (1)$$

avec $\underline{\mathbf{F}}_i^{collision}$ la somme des forces normale et tangentielle appliquées à la particule i lors de la collision avec une particule j :

$$\underline{\mathbf{F}}_i^{collision} = \underline{\mathbf{F}}_i^n + \underline{\mathbf{F}}_i^t \quad (2)$$

La composante normale $\underline{\mathbf{F}}_i^n$ est définie par :

$$\underline{\mathbf{F}}_i^n = k_n \Delta x - \eta \mathbf{v}_n \quad (3)$$

où k_n est le coefficient de contact, η le coefficient d'amortissement et $\Delta x = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| - (r_i + r_j)$, r_i et r_j étant respectivement le rayon des particules i et j . La composante tangentielle $\underline{\mathbf{F}}_i^t$ est telle que :

$$\begin{cases} \underline{\mathbf{F}}_i^t = \mu_0 \|\mathbf{v}_t\| & \text{si } \|\underline{\mathbf{F}}_i^t\| \leq \mu \|\underline{\mathbf{F}}_i^n\| \\ \underline{\mathbf{F}}_i^t = \mu \|\underline{\mathbf{F}}_i^n\| \frac{\mathbf{v}_t}{\|\mathbf{v}_t\|} & \text{si } \|\underline{\mathbf{F}}_i^t\| > \mu \|\underline{\mathbf{F}}_i^n\| \end{cases} \quad (4)$$

où μ_0 est le coefficient de frottement statique ou d'adhérence et μ le coefficient de frottement dynamique ou de glissement. L'Algorithme 1 présente une étape de calcul lors d'une simulation avec le modèle DEM utilisé dans cette étude.

Algorithm 1 Etape de simulation DEM

```

1: for all particules  $i$  do
2:   trouver les voisins  $j$ 
3:   for all voisin  $j$  do
4:     if  $\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq (r_i + r_j)$  then
5:        $\underline{\mathbf{F}}_{ij}^{collision} = \underline{\mathbf{F}}_i^n + \underline{\mathbf{F}}_i^t$ 
6:     end if
7:   end for
8:    $\underline{\mathbf{F}}_i^{total} = \sum_j \underline{\mathbf{F}}_{ij}^{collision}$ 
9: end for
10: for all particules  $i$  do
11:    $\underline{\mathbf{a}}_i(t + \Delta t) = \frac{\underline{\mathbf{F}}_i^{total}}{m_i} + \underline{\mathbf{g}}$ 
12:    $\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \Delta t \underline{\mathbf{a}}_i(t + \Delta t)$ 
13:    $\mathbf{x}_i(t + \Delta t) = \mathbf{x}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t + \Delta t)$ 
14: end for

```

2.2 Modélisation du fluide par SPH

La méthode SPH considère un fluide comme un ensemble de particules i possédant chacune une masse m_i et des attributs tels qu'une masse volumique ρ_i , une pression p_i ou un volume V_i . Au cours du temps t , la position des particules \underline{x}_i et leurs attributs respectifs sont advectés avec la vitesse locale du fluide \underline{v}_i :

$$\frac{d\underline{x}_i}{dt} = \underline{v}_i \quad (5)$$

La variation de la vitesse locale du fluide en fonction du temps est gouvernée par la forme lagrangienne de l'équation de Navier-Stokes :

$$\frac{d\underline{v}_i}{dt} = -\frac{1}{\rho_i} \nabla p_i + \nu \nabla^2 \underline{v}_i + \frac{\underline{F}_i^{autre}}{m_i} \quad (6)$$

Le terme $-\frac{1}{\rho_i} \nabla p_i$ représente l'accélération de la particule du fait des différences de pression dans le fluide. Le terme $\nu \nabla^2 \underline{v}_i$ décrit l'accélération due aux forces de friction entre les particules de différentes vitesses. Enfin, le terme $\frac{\underline{F}_i^{autre}}{m_i}$ englobe les autres contributions à l'accélération des particules, la gravité par exemple.

La méthode SPH consiste à interpoler les valeurs des attributs des particules fluides à des positions arbitraires et d'approximer les dérivés spatiales de l'Équation 6 pour chacune des particules avec un nombre fini de particules adjacentes. Pour cela, une quantité A_i à une position \underline{x}_i est approximée avec un jeu de quantités A_j à des positions de particules adjacentes \underline{x}_j :

$$A_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} A_j W_{ij} \quad (7)$$

avec W_{ij} une fonction kernel de la forme :

$$W_{ij} = W\left(\frac{\|\underline{x}_i - \underline{x}_j\|}{h}\right) = W(q) = \frac{1}{h^d} f(q) \quad (8)$$

où d indique le nombre de dimensions et h est la longueur de lissage. La résolution d'un modèle SPH se base sur trois étapes : la recherche de voisins, le calcul du gradient pression et l'intégration sur le temps (résolution de l'équation de Navier-Stokes). La recherche de voisin est souvent accélérée par l'utilisation d'une structure d'accès spatial, une hashgrid dans le cas du modèle présenté dans ce résumé. Afin d'obtenir le gradient de pression, présent dans l'équation de Navier-Stokes (Equation 6), la pression p_i est calculée à partir de la masse volumique ρ_i :

$$p_i = k \left(\left(\frac{\rho_i}{\rho_0} \right)^7 - 1 \right) \quad (9)$$

où ρ_0 est la masse volumique des particules au repos et k est une constante de rigidité qui évolue avec la pression. L'Algorithme 2 présente un exemple d'une étape de simulation en SPH.

Le pas de temps Δt est gouverné par la condition de Courant-Friedrich-Levy (CFL), c'est-à-dire $\Delta t \leq \lambda \frac{h}{\|\underline{v}^{max}\|}$ avec $\lambda \approx 0,4$, h étant le diamètre des particules et \underline{v}^{max} la vitesse maximale parmi toutes les particules.

3 Calibration du modèle granulaire

Les étapes de calibration et de validation sont importantes pour la bonne mise en application de modèles DEM. Le modèle granulaire est ici calibré de manière indirecte, c'est-à-dire que certaines propriétés d'écoulement sont mesurées sur la poudre et que les propriétés des particules en sont déduites pour obtenir les paramètres du modèle.

Algorithm 2 Etape de simulation SPH

```
1: for all particules  $i$  do
2:   trouver les voisins  $j$ 
3: end for
4: for all particules  $i$  do
5:    $\rho_i = \sum_j m_j W_{ij}$ 
6:   calcul de  $p_i$  à partir de  $\rho_i$  (Eq. 9)
7: end for
8: for all particules  $i$  do
9:    $\underline{F}_i^{pression} = -\frac{m_i}{\rho_i} \nabla p_i$ 
10:   $\underline{F}_i^{viscosite} = m_i \nabla \nabla^2 v_i$ 
11:   $\underline{F}_i^{autre} = m_i \underline{g}$ 
12:   $\underline{F}_i(t) = \underline{F}_i^{pression} + \underline{F}_i^{viscosite} + \underline{F}_i^{autre}$ 
13: end for
14: for all particules  $i$  do
15:   $v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + \frac{\Delta t \underline{F}_i(t)}{m_i}$ 
16:   $x_i(t + \Delta t) = x_i(t) + \Delta t v_i(t + \Delta t)$ 
17: end for
```

3.1 Essai de l'angle de repos

La mesure de l'angle de repos d'une poudre est un essai standard dans les industries travaillant avec des matériaux granulaires. Il est utilisé comme un indicateur de la qualité de l'écoulement d'une poudre, qui est une propriété importante pour un grand nombre de procédés de mise en forme.

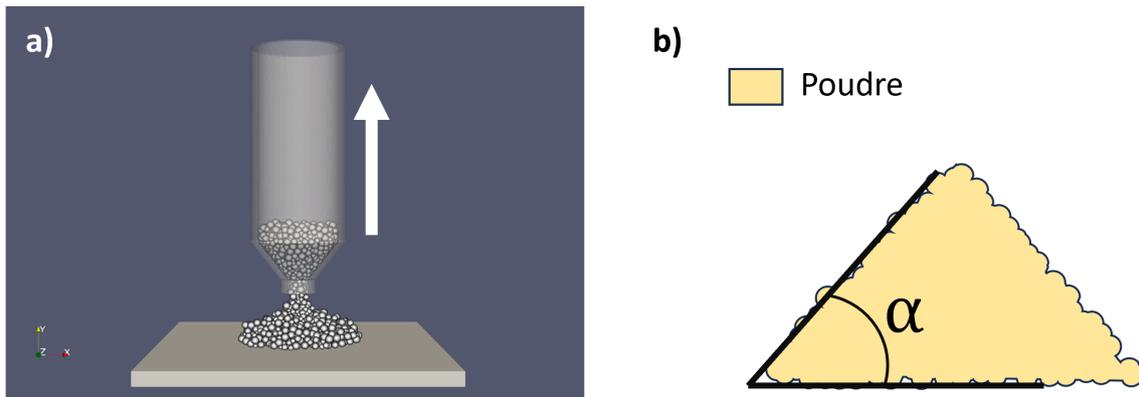


FIGURE 1 – Principe de fonctionnement du test de l'angle de repos : a) écoulement de la poudre depuis un entonnoir se déplaçant vers le haut et b) schéma de l'angle α à mesurer sur le tas de poudre obtenu.

Le principe de fonctionnement de cet essai est présenté sur la Figure 1. De la poudre est déversée sur une surface plane, ici au travers d'un entonnoir présentant un mouvement vertical, et l'angle du tas obtenu est mesuré. Un jumeau numérique de cet essai a été développé afin de calibrer les paramètres du modèle DEM sur des poudres utilisées pour le binder jetting. Cet outil a permis d'étudier l'impact des paramètres du modèle DEM sur l'angle de repos obtenu. La Figure 2 présente les résultats obtenus pour chacun des paramètres : coefficient de contact k_n , coefficient d'amortissement η , coefficient de frottement statique μ_0 , et coefficient de frottement dynamique μ . La plage de valeur d'étude de chacun des paramètres correspond à celle où la stabilité de la simulation n'est pas affectée.

Une variation du coefficient de frottement statique μ_0 , qui traduit physiquement la force nécessaire à amorcer un glissement entre les grains, présente un impact mineur sur l'angle de repos. Une variation du coefficient de contact k_n , présente quant à elle un effet majeur sur l'angle de repos.

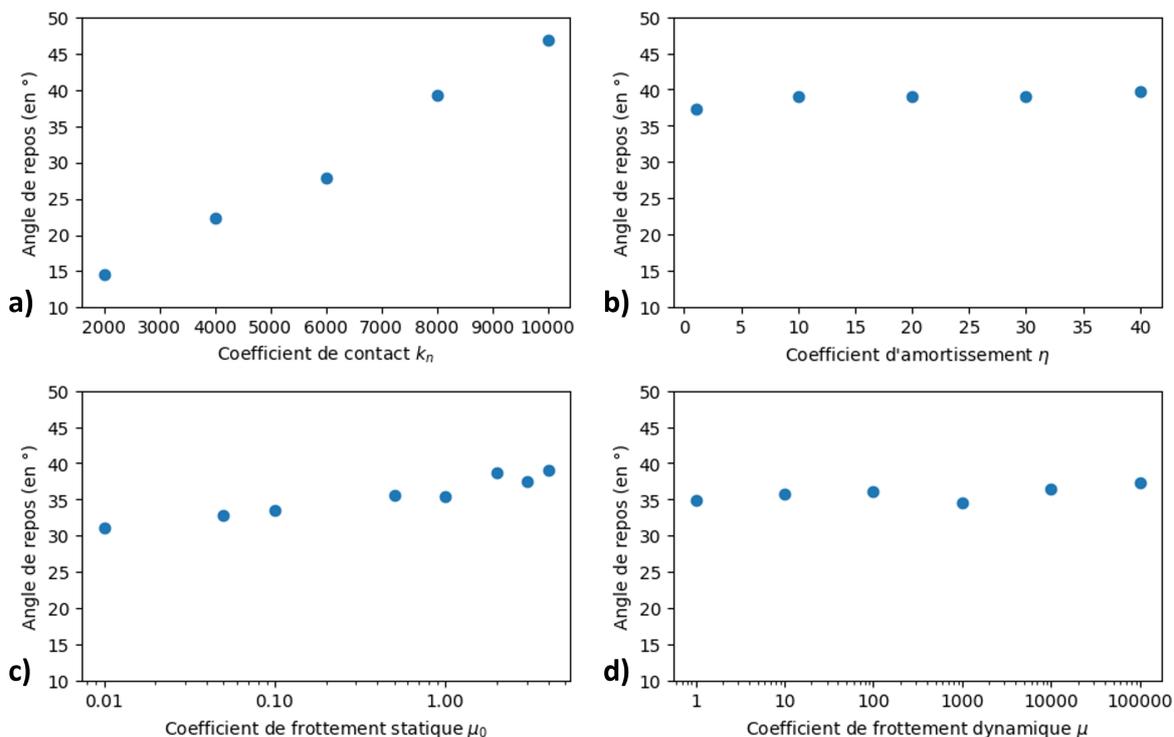


FIGURE 2 – Évolution de l’angle de repos avec a) le coefficient de contact k_n , b) le coefficient d’amortissement η , c) le coefficient de frottement statique μ_0 et d) le coefficient de frottement dynamique μ .

3.2 Essai d’aptitude au tassement

L’essai d’aptitude au tassement d’une poudre permet d’estimer la capacité d’une poudre à se tasser sans contrainte mécanique et est réalisé à l’aide d’un volumétre de tassage. Cette propriété est importante pour le procédé de binder jetting puisqu’un bon tassement améliore la compacité du lit de poudre et donc les propriétés mécaniques du produit final. Un jumeau numérique de cet essai, dont le principe de fonctionnement est présenté sur la Figure 3, a été développé. Ce jumeau numérique se base sur les paramètres de fonctionnement du volumétre STAV II, et respecte les standards définis par la pharmacopée européenne et les normes ISO, avec une hauteur de chute de 3mm et une fréquence de coups de 250min^{-1} .

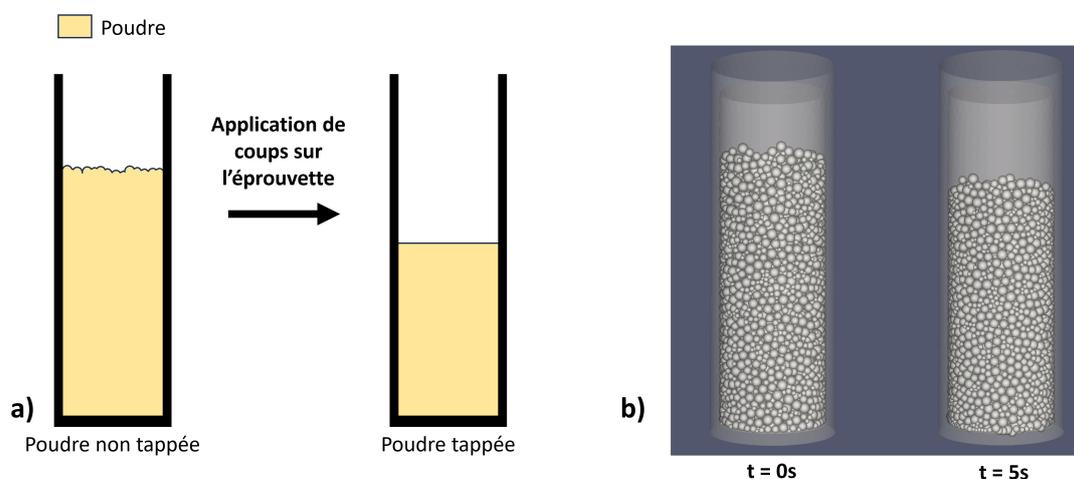


FIGURE 3 – Principe de fonctionnement de l’essai d’aptitude au tassement : a) représentation schématique et b) exemple d’un résultat obtenu sur le jumeau numérique.

A l'instar de l'essai de l'angle de repos, l'influence des paramètres du modèle DEM sur le tassement de la poudre a été évaluée. La grandeur sur laquelle cette influence a été mesurée est le ratio d'Hausner :

$$H = \frac{\rho_{tapped}}{\rho_{bulk}} \quad (10)$$

où ρ_{tapped} est la masse volumique de la poudre après avoir subi les coups en kg.m^{-3} et ρ_{bulk} la masse volumique initiale de la poudre en kg.m^{-3} . Le ratio d'Hausner est souvent compris entre 1,10 et 1,40 pour les poudres de céramiques. Une valeur proche de 1 indique un très bon tassement naturel de la poudre, ce qui est une propriété très intéressante pour le binder jetting.

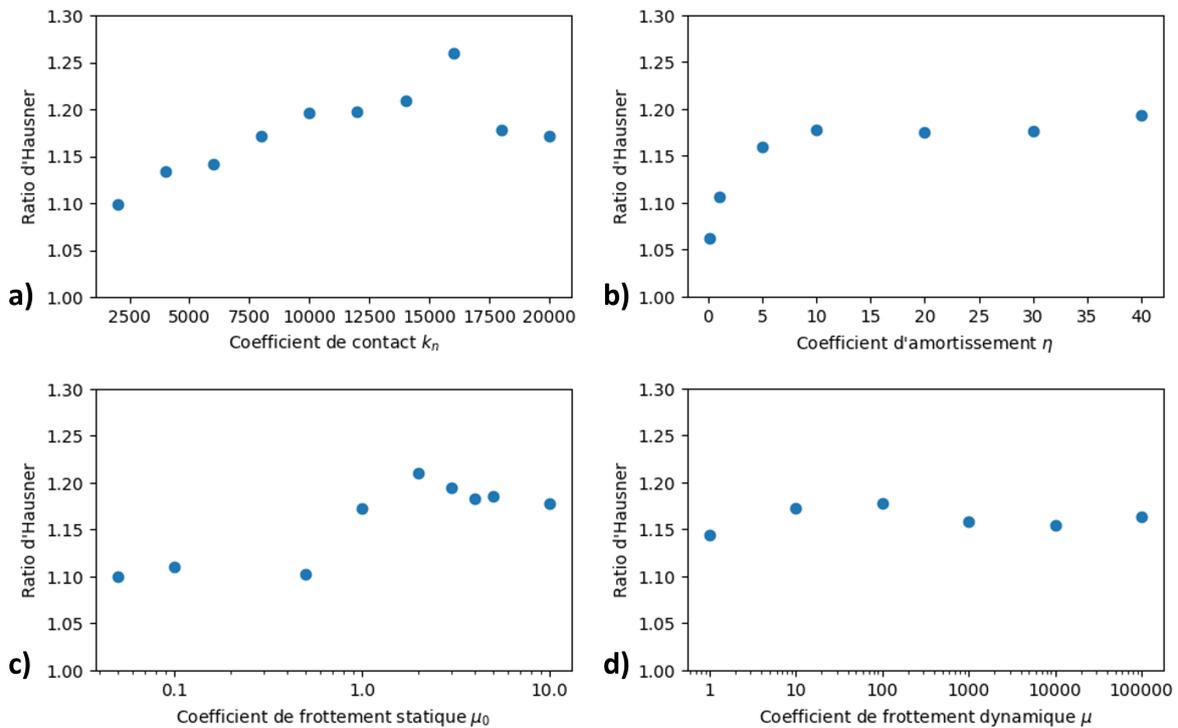


FIGURE 4 – Évolution du ratio d'Hausner avec a) le coefficient de contact k_n , b) le coefficient d'amortissement η , c) le coefficient de frottement statique μ_0 et d) le coefficient de frottement dynamique μ .

La Figure 4 montre un impact majeur des coefficients de contact, d'amortissement et de frottement statique sur le résultat de l'essai. Les ratios d'Hausner obtenus se situent dans la gamme de valeurs des poudres céramiques généralement employées en binder jetting, c'est-à-dire entre 1,1 et 1,3.

3.3 Calibration du modèle DEM sur une poudre d'alumine

Le modèle DEM a été calibré en se basant sur des essais réalisés sur une poudre d'alumine granulée. Cette poudre présente un très bon écoulement avec un angle de repos de $37,8^\circ$ et un ratio d'Hausner de 1,12.

Plusieurs simulations ont été réalisées afin d'identifier un jeu de paramètres permettant d'obtenir des valeurs similaires sur les jumeaux numériques. Les valeurs ainsi retenues pour les paramètres sont : $k_n = 8000$, $\eta = 10$, $\mu_0 = 0,1$ et $\mu = 100$. La Figure 5 présente la comparaison entre le tas de poudre obtenu expérimentalement et celui obtenu par simulation avec le jeu de paramètres identifié, avec des angles de repos respectifs de $37,8^\circ$ et $38,2^\circ$. Le ratio d'Hausner obtenu avec ce jeu de paramètres $H = 1,11$ est lui aussi très proche de la valeur expérimentale $H = 1,12$.

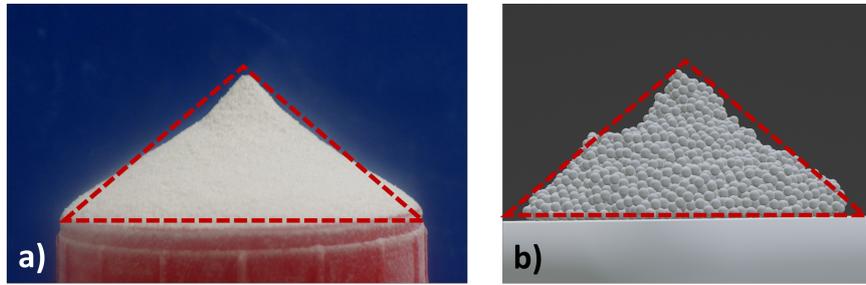


FIGURE 5 – Angle de repos de la poudre d'alumine : a) essai expérimental avec $\alpha = 37,8^\circ$ et b) simulation avec $\alpha = 38,2^\circ$.

4 Couplage des deux modèles

La DEM et la SPH sont des méthodes particulières et cette similitude permet de les coupler de manière directe. Pour cette première approche, le modèle en développement présenté ici repose sur l'hypothèse forte que le fluide ne fait pas bouger les particules solides avec lesquelles il entre en contact, le fluide se déplaçant uniquement par capillarité dans le lit de poudre.

Le modèle se compose de deux catégories de particules : des particules solides, utilisées pour la partie DEM, et des particules fluides, utilisées pour la partie SPH. Lors d'une étape de calcul, les accélérations, vitesses et positions des particules solides sont calculées comme décrit dans l'Algorithme 1. Ces grandeurs sont ensuite calculées pour les particules fluides, en prenant en compte dans un premier temps les interactions fluide-fluide comme décrites par l'Algorithme 2 puis les interactions fluide-solide. Des sous-étapes de simulation sont réalisées afin d'affiner les forces de pression de manière itérative et converger vers une densité proche de la densité initiale du fluide ρ_0 .

Le choix d'une méthode SPH simple a été motivé par la nécessité d'une simulation peu coûteuse en ressources permettant d'obtenir des temps de calcul proches du temps réel. Dans cette optique, les simulations présentées dans ce résumé ont aussi été parallélisées sur un GPU. La combinaison de ces deux facteurs permet d'obtenir des temps de calcul proches du temps réel.

5 Conclusion

Le binder jetting de matériaux céramiques est une technologie qui nécessite encore un grand travail expérimental afin de pouvoir atteindre son plein potentiel. Un modèle numérique du binder jetting est en développement, qui permettra d'accélérer le travail de recherche de matériaux ainsi que de mieux comprendre de l'influence des paramètres matériaux et procédé sur le produit imprimé. Le modèle combine deux méthodes particulières, la DEM et la SPH, pour prédire le comportement d'un lit de poudre et son imprégnation par une encre.

La calibration de la partie DEM du modèle pour des poudres céramiques s'appuie sur une comparaison entre des essais expérimentaux et des jumeaux numériques de ces derniers. L'utilisation de deux essais différents pour la calibration permet de converger vers un jeu de paramètres commun plus représentatif du comportement réel de la poudre. L'influence des paramètres du modèle sur les résultats des essais a été étudié puis le modèle a été calibré sur une poudre d'alumine granulée.

Enfin le modèle DEM/SPH en développement a été présenté brièvement en introduisant les notions essentielles à son fonctionnement. Le modèle est écrit en langage Python et s'appuie sur une parallélisation des calculs sur GPU pour converger vers des simulations en temps réel.

Références

- [1] H. Zhao, A. Wang, G. Li, Q. Hu, C. Ye, M. Shen, Y. Xiao, S. Liu, D. Ji. *Improving the properties of binder jetted ceramics via nanoparticle dispersion infiltration*, Ceramics International, Elsevier, 33580-33587, 2022.
- [2] T. Yu, Z. Zhao, J. Li. *Effect of sintering temperature and sintering additives on the properties of alumina ceramics fabricated by binder jetting*, Ceramics International, Elsevier, 9948-9955, 2023.
- [3] M. Horio, S. Kajikawa. *DEM simulation of industrial issues in fluidized bed reactors*, Handbook of Conveying and Handling of Particulate Solids, Elsevier Science B.V., 547-559, 2001.
- [4] A. Mussatto, R. Groarke, A. O'Neill, M. A. Obeidi, Y. Delaure, D. Brabazon. *Influences of powder morphology and spreading parameters on the powder bed topography uniformity in powder bed fusion metal additive manufacturing*, Additive Manufacturing, Elsevier, 2021.
- [5] C. Meier, R. Weissbach, J. Weinberg, W. A. Wall, A. J. Hart. *Modeling and characterization of cohesion in fine metal powders with a focus on additive manufacturing process simulations*, Powder Technology, Elsevier, 855-866, 2019.
- [6] C.R.K. Windows-Yule, A. Neveu. *Calibration of DEM simulations for dynamic particulate systems*, Papers in physics, 140010, 2022.
- [7] M. Ihmsen, J. Orthmann, B. Solenthaler, A. Kolb, M. Teschner. *SPH fluids in computer graphics*, Eurographics, 2014.
- [8] S. Fuchs, P. Praegla, C. Cyron, W. Wall, C. Meier. *A versatile SPH modeling framework for couple microfluid-powder dynamics in additive manufacturing : binder jetting, material jetting, directed energy deposition and powder bed fusion*, Engineering with Computers, 38 :4853-4877, 2022.