

# Modélisation multi-échelle des couches minces

I. Bencheikh, F. Bilteryst, M. Nouari

LEMTA, CNRS-UMR 7563, Lorraine University,

LARIOPAC : Laboratoire commun de recherche public-PME, LabCom – Vague 2 – 2013,  
GIP-InSIC, 27 rue d’Hellieule F-88100 Saint-Dié-des-Vosges, [issam.bencheikh@univ-lorraine.fr](mailto:issam.bencheikh@univ-lorraine.fr),  
[francois.bilteryst@univ-lorraine.fr](mailto:francois.bilteryst@univ-lorraine.fr), [mohammed.nouari@mines-nancy.univ-lorraine.fr](mailto:mohammed.nouari@mines-nancy.univ-lorraine.fr)

## Résumé :

*Lors d’un chargement extrême -thermique et/ou mécanique-, l’utilisation des revêtements peut s’avérer indispensable pour améliorer la résistance à l’usure des substrats. La compréhension et l’étude du comportement de ces revêtements conduisent à une meilleure maîtrise de leur impact sur la structure globale. Dans cet objectif, le modèle MAX-FEM a été étendu à la description du comportement de ce type de structures, garantissant la précision des résultats sans raffinement particulier du maillage dans la couche mince. La capacité du schéma numérique proposé a été démontrée par la résolution d’un problème mécanique bidimensionnel. L’efficacité du modèle est testée en termes de convergence et de temps de calcul, et par comparaison systématique à une solution éléments finis de référence.*

## Abstract:

*During the last years, the wear resistance of substrates has been used to be improved by the deposit of single or multilayered coatings on their surface. During the extreme thermal and mechanical loading the coatings greatly enhances the wear resistance of the substrate. The study of the coating behavior leads to a better understanding of its impact on the overall structure. For this purpose, the MAX-FEM model has been extended in order to describe the behavior of such structures, ensuring accurate results without special mesh refinement. The ability of the proposed numerical scheme is demonstrated by solving a 2D mechanical problem. The effectiveness of the model has been tested in terms of convergence and computational time, and systematically compared to a classical finite elements solution.*

**Mots clefs :** Revêtement, X-FEM, développements asymptotiques raccordés, MAX-FEM

## 1 Introduction

Les revêtements se présentent sous la forme de couches minces d’environ un à quelques micromètres d’épaisseur, déposées sur un substrat pour le protéger. Ils sont utilisés dans de nombreuses applications industrielles comme de barrières thermiques pour protéger et isoler le substrat ou améliorer le frottement dans un contact entre deux solides, [1-3]. L’utilisation des outils de coupe revêtus en usinage par exemple revêt une importance capitale, permettant en partie de fonctionner efficacement dans des environnements plus difficiles comme l’usinage à sec [4] et l’usinage à grande vitesse des matériaux

très durs par exemple (alliages de titane, alliage de nickel, aciers inox, etc.). De plus en plus, les industriels et les scientifiques s'intéressent au comportement thermomécanique des revêtements afin de comprendre et prévenir leurs modes de dégradations. En outre, le développement des méthodes numériques permet de s'affranchir à la fois des études expérimentales coûteuses et complexes à mettre en œuvre, et de l'imprécision des méthodes analytiques classiques.

Plusieurs méthodes ont été développées pour traiter la problématique des couches minces. Dans le cas des revêtements, la méthode des éléments finis classiques demeure souvent la plus utilisée [4-6]. Un maillage très raffiné près de la couche mince est nécessaire pour atteindre des résultats précis dans ce cas. D'autres auteurs utilisent des approches théoriques [8,12] en se basant sur des hypothèses simplificatrices. La méthode MAX-FEM [9] a été initialement introduite pour surmonter les limitations précédentes dans le cas des joints soudés ou brasés. Son principe est basé sur une approximation de la solution globale "macro" par un terme de perturbation issu de l'analyse locale "micro" au niveau de la couche mince, elle est donnée par l'approche analytique des développements asymptotiques raccordés (MAE) [8]. Le couplage MAE-X-FEM consiste alors à intégrer les informations données par la MAE dans la partie enrichie du modèle X-FEM. Ainsi, en se basant sur des travaux antérieurs [9-11], la méthode MAX-FEM est ici étendue au cas des revêtements.

## 2 Application du modèle MAX-FEM au cas du revêtement

### 2.1 Principe

Le modèle MAX-FEM est issu initialement de la modélisation multi-échelles des brasures [10]. Il s'agit d'une adaptation de la méthode FEM standard par une correction de la matrice de rigidité qui exploite la similitude entre les deux méthodes MAE et X-FEM pour définir une procédure décrivant le comportement hétérogène d'une structure contenant une couche mince (

Figure 1), sans raffinement de maillage et tout en gardant une bonne précision.

$$\begin{array}{ccc}
 \text{MAE} & & \text{X-FEM} \\
 \mathbf{u}(x) = \mathbf{u}^0(x) + \varepsilon \mathbf{u}^1(x) & & \mathbf{u}(x) = \sum_i^N N_i(x) \mathbf{u}_i + \sum_k^{N_{\text{enr}}} N_k(x) \psi_k(x) \mathbf{b}_k
 \end{array}$$

Figure 1. Principe du couplage MAE-X-FEM

En effet, la couche mince est assimilée à une interface de discontinuité qui crée un saut de champ inconnu. La nouvelle configuration contenant la singularité est décrite en utilisant une formulation MAX-FEM spécifique, définissant les paramètres d'enrichissements  $\mathbf{b}_k$  de la X-FEM depuis la valeur de ces sauts calculés par l'approche MAE. Le principe de cette dernière est basé sur un développement intérieur par le biais d'un changement d'échelle « problème intérieur » et un deuxième développement dit 'extérieur' qui restitue le comportement global du champ de déplacements 'problème extérieur'. Cette méthode est détaillée par Ifis *et al.* [10].

### 2.2 Mise en œuvre dans le cas d'un problème 2D mécanique

Le modèle de la structure revêtue est composé de deux domaines  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$  (Figure 2). Ils représentent respectivement le revêtement avec les caractéristiques mécaniques  $(E_1, \vartheta_1)$  et le substrat  $(E_2, \vartheta_2)$ . Ce modèle permet de décrire plus finement la méthode MAX-FEM.

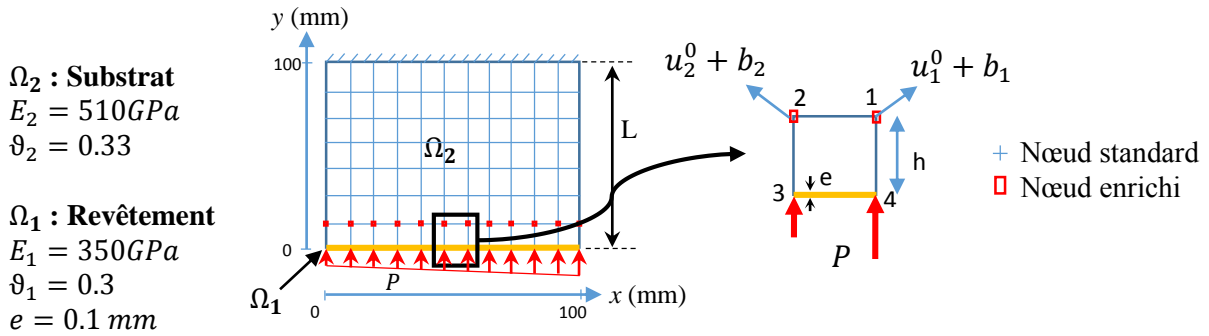


Figure 2. Modèle de la structure revêtue avec des éléments Q4

Le modèle est caractérisé par le paramètre de perturbation  $\varepsilon = e/L$  qui représente l'épaisseur relative du revêtement ( $\varepsilon \ll 1$ ),  $h$  est la taille adimensionnée de l'élément qui doit respecter la condition  $h \geq e$ . La structure est encastée pour le bord  $y = 100\text{ mm}$ , alors que le déplacement suivant l'axe  $x$  est bloqué à  $y = 0\text{ mm}$ . Seuls les nœuds 1 et 2 de chaque élément contenant la perturbation seront enrichis par les données de la MAE (2), les nœuds 3 et 4 portant les conditions limites. Nous nous plaçons dans le cadre de l'élasticité linéaire en contraintes planes.

## 2.2.1 La formulation de la MAX-FEM

Dans le cas d'éléments quadratiques structurés, et à l'aide de la formulation X-FEM et MAE, les expressions des déplacements dans les nœuds de l'élément enrichi s'expriment de la façon suivante :

MAE	X-FEM
$\begin{cases} U_{x_1} = U_{x_1}^0 + \varepsilon U_{x_1}^1 \\ U_{x_2} = U_{x_2}^0 + \varepsilon U_{x_2}^1 \end{cases} \quad \begin{cases} U_{y_1} = U_{y_1}^0 + \varepsilon U_{y_1}^1 \\ U_{y_2} = U_{y_2}^0 + \varepsilon U_{y_2}^1 \end{cases}$	$\begin{cases} U_{x_1} = U_{x_1}^0 + b_{x_1} \\ U_{x_2} = U_{x_2}^0 + b_{x_2} \end{cases} \quad \begin{cases} U_{y_1} = U_{y_1}^0 + b_{y_1} \\ U_{y_2} = U_{y_2}^0 + b_{y_2} \end{cases}$

Le terme  $U^0$  représente la solution non perturbée. Par égalité entre les expressions de MAE et X-FEM, les paramètres d'enrichissement  $\mathbf{b}_k$  peuvent s'exprimer en fonction de la perturbation  $\varepsilon$ , la taille de l'élément  $h$  et le saut de déplacement :

$$\mathbf{b}_k = \varepsilon(1 - h)[[\mathbf{U}^1]](x, 0) \quad \text{pour } k = 1, 2 \quad (1)$$

Il reste à définir l'expression du saut de déplacement avec la MAE. En se basant sur les travaux [11], l'algorithme de calcul MAE du saut a été adapté au cas des revêtements. Ainsi, l'expression du saut obtenu s'écrit :

$$[[\mathbf{U}^1]](x, 0) = \begin{Bmatrix} \left[ \begin{matrix} U_x^1 \\ U_y^1 \end{matrix} \right] \end{Bmatrix} = \frac{1}{2} \left\{ \begin{array}{l} \left( \frac{E_2(1 + \vartheta_1)}{E_1(1 + \vartheta_2)} - 1 \right) [U_{x,y}^0(x, 0) + U_{y,x}^0(x, 0)] \\ \left( \frac{E_2\vartheta_2}{1 - \vartheta_2^2} - \vartheta_1 \right) U_{x,x}^0(x, 0) + \left( \frac{E_2}{1 - \vartheta_2^2} - 1 \right) U_{y,y}^0(x, 0) \end{array} \right\} \quad (2)$$

Cette expression révèle une relation linéaire liant le saut de déplacement aux dérivées du champ continu  $\mathbf{U}^0$ . L'équation (1) peut alors s'écrire alors sous une forme matricielle :

$$\mathbf{b}_k = \frac{\varepsilon}{2}(1-h) \begin{bmatrix} 0 & 0 & c \\ a & b & 0 \end{bmatrix} \mathbf{B}(x,0)\mathbf{U}^0 \quad (3)$$

Avec :

$$a = \left( \frac{\frac{E_2 \vartheta_2}{1 - \vartheta_2^2}}{\frac{E_1}{1 - \vartheta_1^2}} - \vartheta_1 \right), \quad b = \left( \frac{\frac{E_2}{1 - \vartheta_2^2}}{\frac{E_1}{1 - \vartheta_1^2}} - 1 \right) \quad \text{et} \quad c = \left( \frac{E_2(1 + \vartheta_1)}{E_1(1 + \vartheta_2)} - 1 \right)$$

où  $\mathbf{B}(x,0)$  représente la matrice gradient contenant les dérivées des fonctions de forme.

La formulation X-FEM peut s'écrire alors sous la forme suivante :

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}^0 + \mathbf{H}\mathbf{b} \quad (4)$$

avec  $\mathbf{H}$  la matrice contenant les valeurs nodales de la fonction de Heaviside [10].

$$\mathbf{H} = \begin{cases} -1 & \text{si } y < 0 \\ 1 & \text{si } y \geq 0 \end{cases}$$

Elle permet de capturer les nœuds enrichis et de les situer par rapport à la perturbation, mais aussi elle permet de générer la discontinuité du champ recherché. La matrice de rigidité élémentaire des éléments enrichis peut être définie sous la forme d'une correction de celle des éléments standards. En remplaçant le paramètre  $\mathbf{b}$  de l'équation (4) par l'expression (3), la matrice de rigidité devient :

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}^0(\mathbf{I} + \mathbf{H}\mathbf{C})^{-1} \quad (5)$$

avec  $\mathbf{K}^0 = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} \, d\Omega$  la matrice de rigidité des éléments standards et  $\mathbf{C} = \mathbf{b}/\mathbf{U}^0$ .

## 2.2.2 Implémentation numérique et résultats

Un calcul FEM standard avec un raffinement de maillage (9750 éléments, pour une taille de maille minimale  $h_{min} = 0.01 \, mm$ ), au voisinage et dans la couche mince, est considéré comme une solution de référence (Figure 3 (a)).

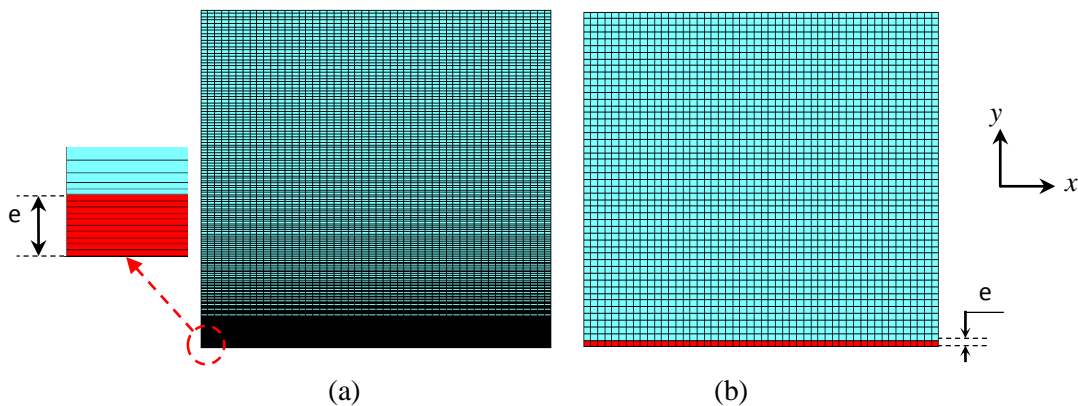


Figure 3. Maillage de la structure pour les deux modèles : (a) FEM. (b) MAX-FEM

Un maillage uniforme structuré de 2500 éléments de taille  $h = 2 \, mm$  est choisi pour le cas de la MAX-FEM (Figure 3 (b)).

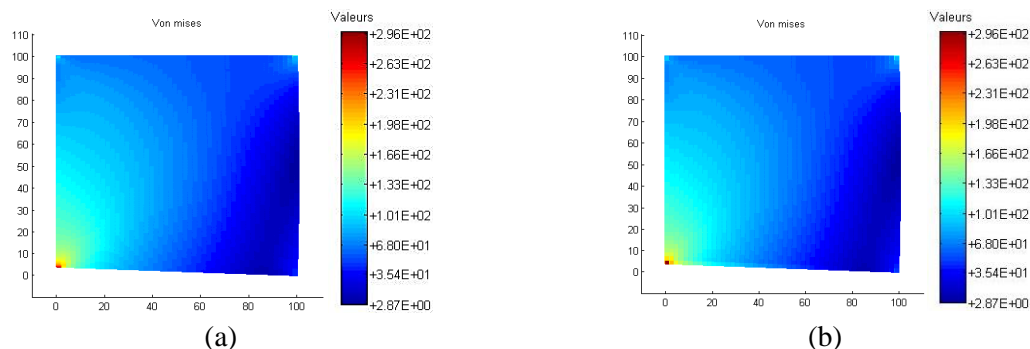
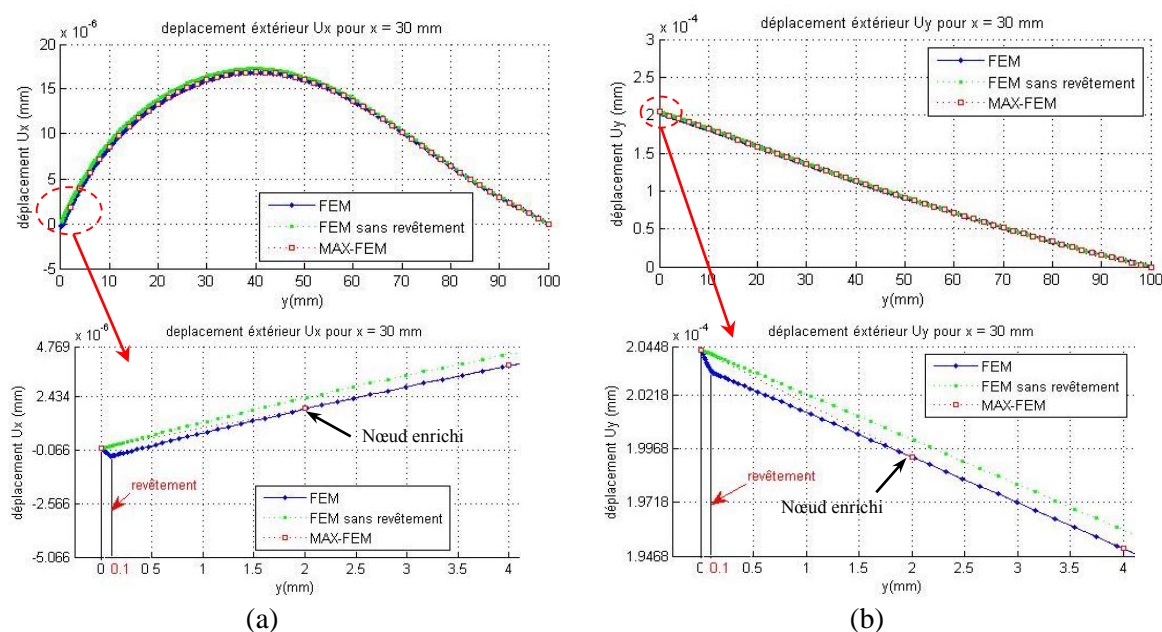


Figure 4. Contrainte de Von Mises en [MPa] : (a) FEM. (b) MAX-FEM

La Figure 4 montre une comparaison des résultats obtenus pour la distribution des contraintes, La solution donnée par la MAX-FEM est très proche de celle de référence, cette précision de la méthode est confirmée par une représentation des solutions FEM et MAX-FEM des champs des déplacements ( $U_x, U_y$ ) dans la section  $x = 30$  mm.

Figure 5. La distribution des champs de déplacements dans la section  $x = 30$  mm.  
(a) déplacement  $U_x$  et (b) déplacement  $U_y$ 

En analysant les résultats de la Figure 5, il apparaît que la solution MAX-FEM rejoint la solution de référence au niveau des nœuds de l'élément enrichi. Un grand avantage de la méthode MAX-FEM reste, sans conteste, l'absence de raffinement de maillage dans la zone revêtue ce qui apparaît en terme de temps de calcul comme un point fort par rapport à la méthode FEM, notamment pour des analyses explicites transitoires pour lesquelles la discrétisation en temps dépend de la taille de l'élément.

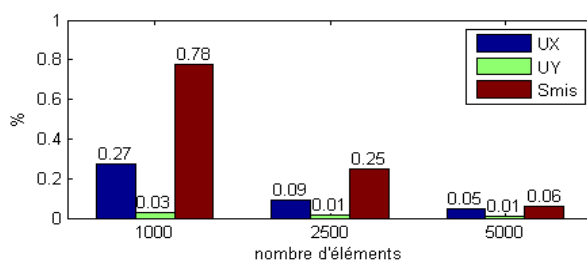


Figure 6. Etude de convergence : erreur relative en % en fonction du nombre d'éléments

Une étude de convergence est effectuée en utilisant l'erreur relative définie par :

$$err_{relative} = |u_{FEM}^i - u_{MAX-FEM}^i| / u_{FEM}^i$$

L'erreur introduite par la MAX-FEM en fonction du nombre d'éléments est présentée sur la Figure 6. Même pour un maillage grossier (1000 éléments), un taux de convergence optimal est obtenu (inférieur à 1%) en terme de déplacements et de contraintes. Cela montre l'efficacité de la méthode.

### 3 Conclusion

Contrairement aux autres méthodes décrites précédemment, le couplage MAE-X-FEM permet de ramener l'algorithme de résolution X-FEM à un "simple" algorithme FEM standard corrigé. Cela reste un des avantages de la MAX-FEM. La méthode peut se substituer à l'approche FEM par sa grande précision et son gain en terme de temps de calcul, notamment pour les calculs en régime transitoire en faisant appel à un maillage grossier tout en gardant une bonne précision. Cela sera un résultat attendu lors des travaux futurs, ainsi que la prise en compte de l'effet de la courbure de la géométrie pour à terme disposer d'outils de simulation.

Malgré ces avantages, la MAX-FEM reste un outil limité quand il s'agit de traiter des géométries courbées, ou bien d'épaisseur non-uniforme des couches minces.

### Références

- [1] R. M'Saoubi, S. Ruppì, Wear and thermal behaviour of CVD  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and MTCVD Ti(C,N) coatings during machining, CIRP Annals - Manufacturing Technology, Volume 58, Issue 1, 2009, Pages 57-60.
- [2] D. Jianxin, L. Jianhua, Z. Jinlong, S. Wenlong, N. Ming, Friction and wear behaviors of the PVD ZrN coated carbide in sliding wear tests and in machining processes, Wear, Volume 264, Issues 3-4, 4 February 2008, Pages 298-307.
- [3] W. Grzesik, Z. Zalisz, P. Nieslony, Friction and wear testing of multilayer coatings on carbide substrates for dry machining applications, Surface and Coatings Technology, Volume 155, Issue 1, 3 June 2002, Pages 37-45.
- [4] F. Kone, C. Czarnota, B. Haddag, M. Nouari, Finite element modelling of the thermo-mechanical behavior of coatings under extreme contact loading in dry machining, Surface and Coatings Technology, Volume 205, Issue 12, 2011, Pages 3559-3566.
- [5] M. Kot, W. Rakowski, J. M. Lackner, L. Major, Analysis of spherical indentations of coating-substrate systems: Experiments and finite element modeling, Materials & Design, Volume 43, 2013, Pages 99-111.
- [6] O. Casals, S. Forest, Finite element crystal plasticity analysis of spherical indentation in bulk single crystals and coatings, Computational Materials Science, Volume 45, Issue 3, 2009, Pages 774-782.
- [7] X. He, A review of finite element analysis of adhesively bonded joints, International Journal of Adhesion and Adhesives, Volume 31, Issue 4, 2011, Pages 248-264.
- [8] D. Leguillon, R. Abdelmoula, Mode III near and far fields for a crack lying in or along a joint, International Journal of Solids and Structures, Vol.37, 2000, pp. 2651-2672.
- [9] A. Ifis, F. Bilteryst, M. Nouari, Transient thermomechanical analysis of thin layers using a hybrid "MAX-FEM" model, Finite Elements in Analysis and Design, Volume 69, 2013, Pages 73-87
- [10] A. Ifis, F. Bilteryst, M. Nouari, A new finite elements method for transient thermal analysis of thin layers, International Journal of Thermal Sciences, Volume 86, 2014, Pages 148-165
- [11] D.H. Nguyen, M. Lazard, F. Bilteryst, P. Lamesle, G. Dour, Modelling the brazed assembly by the coupling of the eXtended Finite Element and the matched asymptotic development methods, International Journal of Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, Vol. 2, 2008, pp. 321-331.
- [12] G. Mishuris, Imperfect transmission conditions for a thin weakly compressible interface. 2D problems, Archives of Mechanics 56.2 (2004): 103-115.