

# Modélisation de la microstructure de composites particulaires à haute teneur en fibres

Ghazal Afshar, A. Couture, V François, J-C Cuillière, Éléonore Bourdier

*ERICCA, Université du Québec à Trois-Rivières, Canada, {Vincent.Francois, Jean-Christophe.Cuilliere}@uqtr.ca*

---

**Résumé** — L'objectif de cet article est de proposer une méthode automatique de génération de modèles géométriques et de modèles de calcul de composites particulaires numériques qui soient le plus fidèles à ceux que l'on rencontre en pratique. Les échantillons numériques présentent des fibres avec des formes proches de celles des fibres réelles et ont une localisation et une orientation semblables à la réalité. Des outils de CAO sont utilisés pour produire ces modèles. Certains enjeux de convergence des méthodes de calcul découlent de ce choix et des solutions possibles sont émises.

**Mots clefs** — Homogénéisation, CAO, modèle EF.

---

## 1. Introduction

Depuis plusieurs années, les composites particulaires à base de fibres naturelles sont étudiés afin d'éventuellement remplacer les fibres d'origine pétrolière. Dans l'espoir de décarboner nos futurs matériaux, de nombreux tests de mélanges sont réalisés. Pour minimiser le nombre d'essais pratiques, l'utilisation des méthodes numériques pour déterminer les caractéristiques de ces nouveaux matériaux s'avère être une bonne solution. Dans cet article, l'expérience avec l'outil développé pour modéliser et calculer des échantillons de composites particulaires est résumée. Cet outil [1] met en œuvre divers concepts afin d'effectuer une modélisation précise de la structure des matériaux étudiés. Il a été validé dans le cadre de la détermination de propriétés mécaniques et thermiques de matériaux [1, 2]. Dans cet article, des réflexions et des solutions sont proposées dans le but de résoudre certains problèmes et limitations de cet outil.

## 2. Modélisation par CAO

L'objectif est de présenter une approche automatique dans le but de réaliser des simulations numériques pour obtenir les propriétés de nouveaux matériaux composites. Pour cela, le processus de test pratique est simulé numériquement de la manière la plus fidèle possible. En effet, la démarche s'appuie sur un ensemble de tests numériques, réalisés sur un ensemble d'échantillons afin d'évaluer de manière statistique les propriétés recherchées. La première étape consiste à créer des échantillons de nouveaux matériaux composés d'une matrice et d'un ensemble de fibres courtes (de propriétés identiques ou non) orientées aléatoirement. La variabilité des propriétés des fibres, due à la provenance naturelle de ces fibres, doit aussi être prise en compte. La solution choisie est de produire un Volume Élémentaire Représentatif (VER) qui est constitué d'un ensemble de Volumes Élémentaires Statistiques (VES). Les calculs sont faits sur chaque VES et les propriétés du VER sont obtenues en moyennant les propriétés calculées sur chaque VES. Le choix du nombre et de la taille des VES permet de prendre en compte la variabilité naturelle des propriétés des fibres. En effet, les VES numériques sont de taille plus petite que celle des échantillons pratiques afin d'avoir des modèles numériques pouvant être simulés

dans des temps acceptables. Pour obtenir des VES réalistes et proches de la réalité, les fibres doivent être représentées le plus fidèlement possible. Un choix efficace est d'utiliser une approche [3] qui intègre des outils de CAO avec des outils d'éléments finis pour automatiser la construction des modèles géométriques des VES et l'exécution des simulations par éléments avec les outils les plus performants de modélisation et les outils les plus performants de calcul. Le modèle de chaque VES est un modèle solide au sens CAO du terme, où les fibres sont modélisées avec des primitives de base et où la matrice est représentée par un modèle solide qui englobe toutes les fibres. Ainsi n'importe quelle forme de fibre peut être représentée. Pour le moment, la mise en œuvre de l'approche permet de modéliser trois formes de fibres : sphérique, cylindrique et torique (Figure 1). Dans cette approche, il n'y a aucune difficulté à ajouter d'autres formes, y compris des formes non élémentaires. En effet, dans cette approche, il est facilement envisageable d'utiliser une modélisation de formes libres (Free Form Solid) afin de modéliser des fibres de forme plus complexe et d'être plus proche de la réalité physique des fibres.

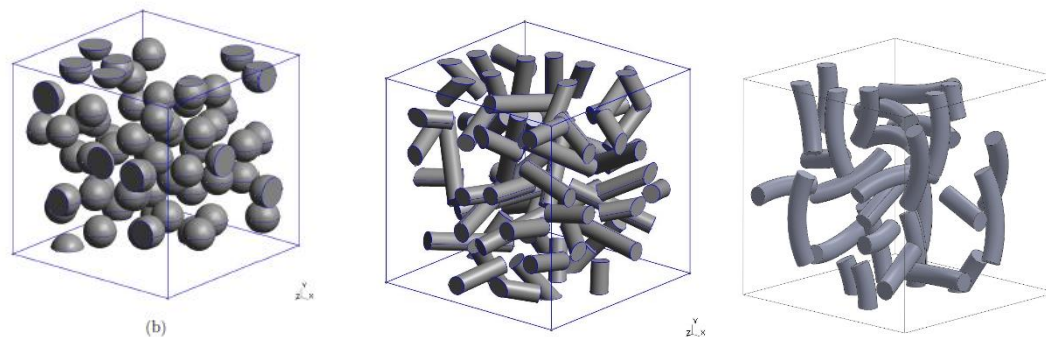


Figure 1 – Exemple de VES contenant des sphères, cylindres et tores

L'ensemble des solides créés à l'intérieur d'un VES forment un assemblage. La validité de l'assemblage afin d'en déduire un maillage conforme pour les éléments finis repose sur la création de faces d'interface uniques entre les fibres et la matrice. Le concept de coface, présent dans la norme ISO10303 [4] est utilisé pour cela. Chaque interface est modélisée par une face unique qui est ensuite référencée, dans chaque solide en contact, par une entité appelée coface en l'orientant adéquatement (Figure 2). Ce principe de la norme ISO10303, qui n'est que rarement implémenté dans les solutions CAO commerciales, est implémenté dans OpenCascade[5]. Notre plateforme [3] permet aussi d'utiliser le concept de coface même si la CAO originale ne le fait pas. Ainsi, un assemblage de solides comprenant des interfaces fibres-matrice parfaitement définies de manière unique et cohérente constitue le modèle.

### 3. Répartition des fibres dans la matrice

Un aspect crucial de la construction du modèle de calcul est la répartition des fibres dans la matrice afin de reproduire la réalité le plus fidèlement possible. Les fibres doivent être réparties de manière aléatoire tant au niveau de la position qu'au niveau de l'orientation. Au niveau global, pour le type de matériaux étudiés, chaque VES doit être le plus homogène possible et le plus isotrope possible afin que le VES représente un matériau macroscopiquement homogène et isotrope. Dans cet objectif, deux méthodes sont implantées pour automatiser la construction des VES :

- La méthode RSA (Random Sequential Adsorption) qui est basée sur l'insertion des fibres de manière séquentielle. Chaque position et orientation d'une fibre est tirée aléatoirement. Le volume de la fibre est créé et inséré dans la matrice si cette fibre n'intersecte pas avec une autre fibre déjà créée antérieurement. Si la fibre est partiellement située hors du domaine d'étude, elle est coupée pour ne conserver que la partie située dans le domaine d'étude.

L'algorithme s'arrête quand le pourcentage de fibres désiré est atteint.

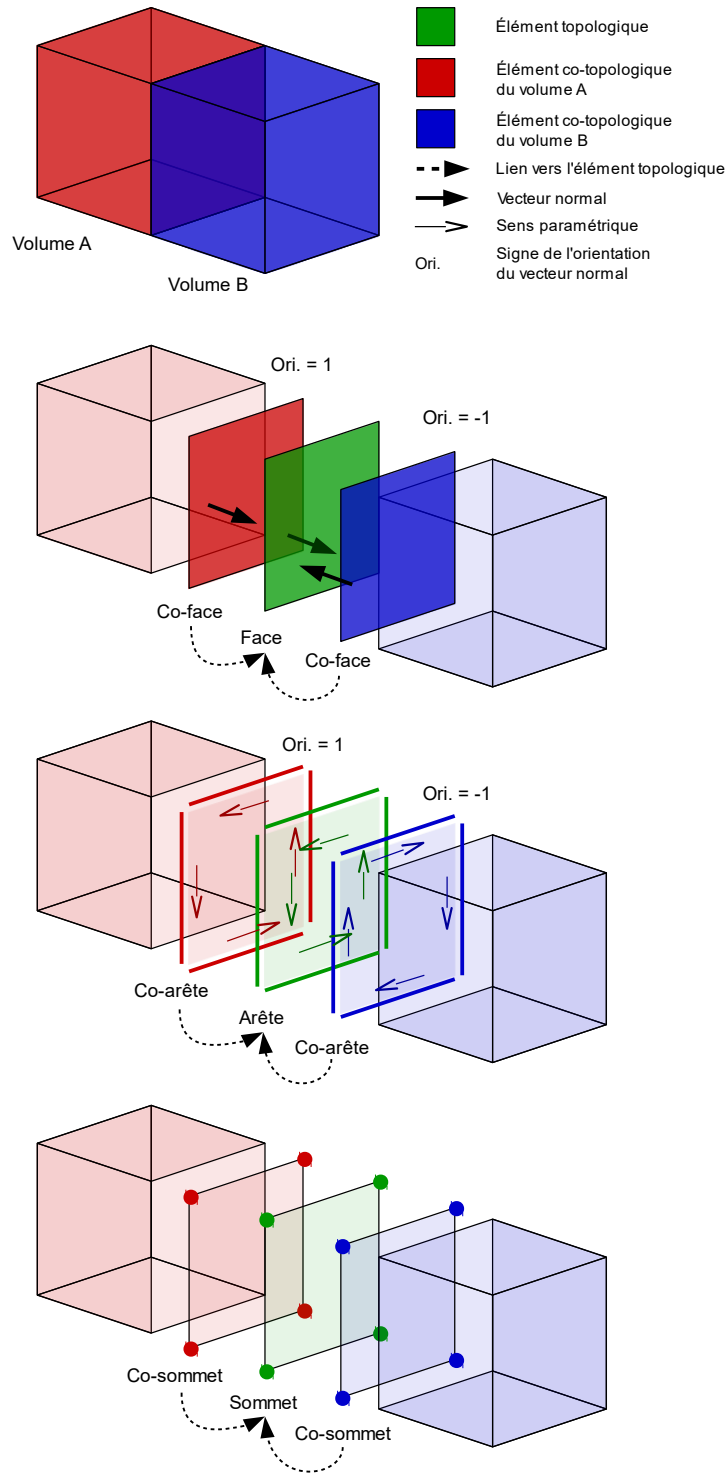


Figure 2 – Concept de topologie et co-topologie

- La méthode DCR (Dynamique des Corps Rigides) qui est basée sur le positionnement et l'orientation des fibres en simulant une agitation d'un ensemble de fibres construites au préalable. Les fibres sont construites pour respecter le pourcentage de fibres visé dans le matériau composite et une simulation dynamique des corps rigides est ensuite effectuée afin que les fibres s'arrangent parfaitement entre-elles pour occuper l'espace disponible sans s'intersecter. Le domaine de cette simulation de la dynamique des corps rigides est un peu plus grand que le domaine du VES afin d'éviter les effets de bord de positionnement des particules (Figure 3).

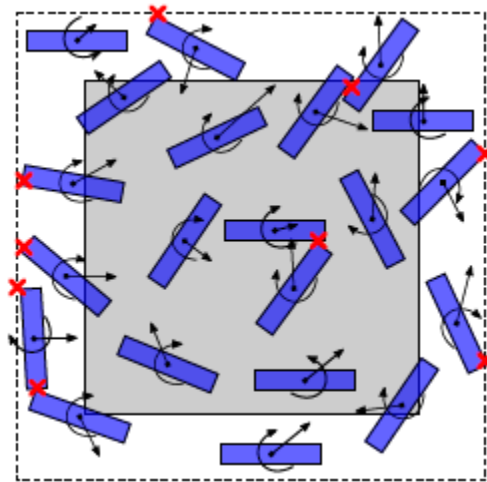


Figure 3 – Illustration de la méthode DCR.

La méthode RSA converge bien pour des pourcentages de fibres allant de 5% à 10%, selon les cas, pour des particules de même taille. Cette méthode ne fonctionne donc que pour de faibles pourcentages de fibres. Il existe des variantes de la méthode RSA afin d'améliorer la convergence de la méthode et augmenter le pourcentage de fibres mais elles ne font gagner que quelques pourcents seulement [6]. La méthode DCR permet d'obtenir des pourcentages beaucoup plus élevés que la méthode RSA. Elle permet donc de modéliser des composites particulières à haute teneur en fibres.

Cependant, quelle que soit la méthode utilisée, on rencontre des problèmes aux frontières des VES. En effet, le modèle géométrique construit automatiquement est ensuite utilisé pour effectuer plusieurs calculs par éléments finis. Ce modèle géométrique doit donc être maillé en assurant la convergence des algorithmes de maillage. Il arrive fréquemment que des singularités de matrice (faibles épaisseurs de matière et petites cavités) se créent entre la frontière de l'échantillon et les fibres. Ces singularités peuvent être maillées uniquement si la densité du maillage est augmentée autour de la singularité. L'origine de ces singularités est :

- un petit angle (proche de zéro) entre la frontière et une fibre
- une petite distance entre deux fibres ou entre une fibre et la frontière
- l'insertion d'une partie de fibre de très faible volume

L'apparition de ces singularités entraîne une augmentation importante du nombre d'éléments du maillage, si bien que le modèle maillé est inutilisable pour la simulation numérique parce beaucoup trop gros. Durant le processus de création des fibres, il est donc préférable d'empêcher ces singularités de se former. Avec la méthode RSA, les fibres qui créent une singularité ne sont pas insérées et la séquence d'insertion continue. L'algorithme finit par converger mais la répartition des fibres n'est pas homogène. En effet, la répartition des fibres est plus dense au cœur du VES et moins dense sur ses frontières. Avec

la méthode DCR, les fibres qui créent une singularité sont éliminées, si bien qu'à la convergence de l'algorithme, il manque des fibres près des frontières de l'échantillon (Figure 4) et le pourcentage global de fibres visé n'est pas atteint. De plus, en DCR, comme le pourcentage de fibres peut être plus élevé, le problème potentiel est plus important qu'en RSA. Ainsi, un traitement doit être envisagé pour pallier ce manque de fibres aux frontières de nos échantillons.

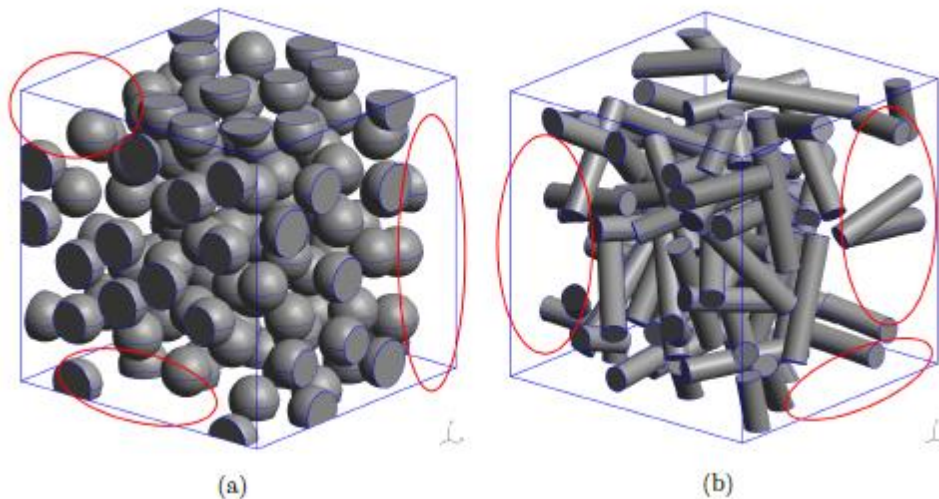


Figure 4 – Absence de particules

#### 4. Érosion de la solution

La solution proposée dans [1] est, dans un premier temps, de mener les calculs d'homogénéisation sur ces modèles non parfaitement homogènes et ceci quelle que soit la manière de les générer. Notre plateforme utilise Code Aster [7] comme code de calcul aussi bien en mécanique qu'en thermique. Dans un deuxième temps, après avoir fait les calculs sur ces modèles non parfaitement homogènes, un post traitement sur chaque VES est effectué, qui consiste à ne considérer la solution des calculs que sur la portion de modèle homogène ayant un pourcentage de fibres correspondant à la cible visée pour le composite étudié. Ce post traitement est appelé *Érosion des résultats*. L'exemple illustré (Figures 5 et 6) correspond à un résultat obtenu pour un matériau non périodique [1].

Au vu des résultats obtenus, comme détaillé [1], cette approche donne des résultats satisfaisants mais certaines réserves peuvent être formulées quant à la rigueur de l'approche basée sur l'érosion des résultats :

- La frontière des résultats utilisée pour notre analyse ne correspond pas aux frontières du modèle ce qui implique que l'on ne peut pas garantir que le critère de Hill-Mandell soit respecté [8]
- La portion du VES utilisée pour les résultats n'est pas forcément soumise exactement au même chargement que le VES lui-même. Également, ce chargement n'est pas forcément parfaitement homogène.
- A ce stade, il n'existe pas de critère clair pour choisir automatiquement la distance d'érosion.

Globalement ces réserves sont fondées mais les résultats pratiques obtenus sont très cohérents [1].

Ainsi, même si cette approche ne repose actuellement sur aucun fondement théorique, les résultats pratiques sont très acceptables [1, 2].

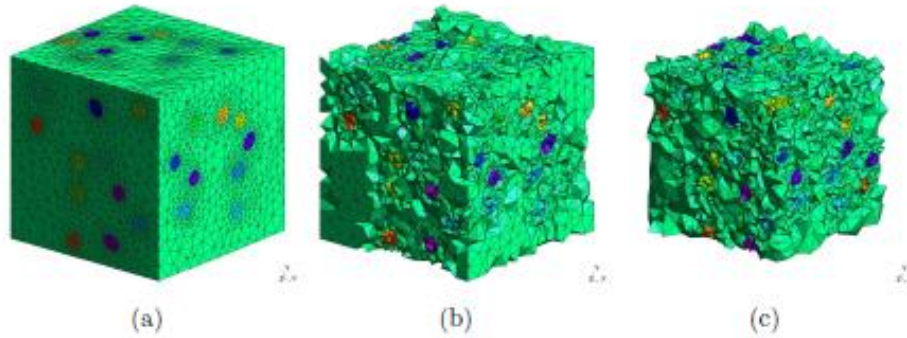


Figure 5 – Érosion du VES : a) Sans érosion, b) distance d'érosion de 0.1, c) distance d'érosion de 0.2 (pour un cube d'arête de longueur 1)

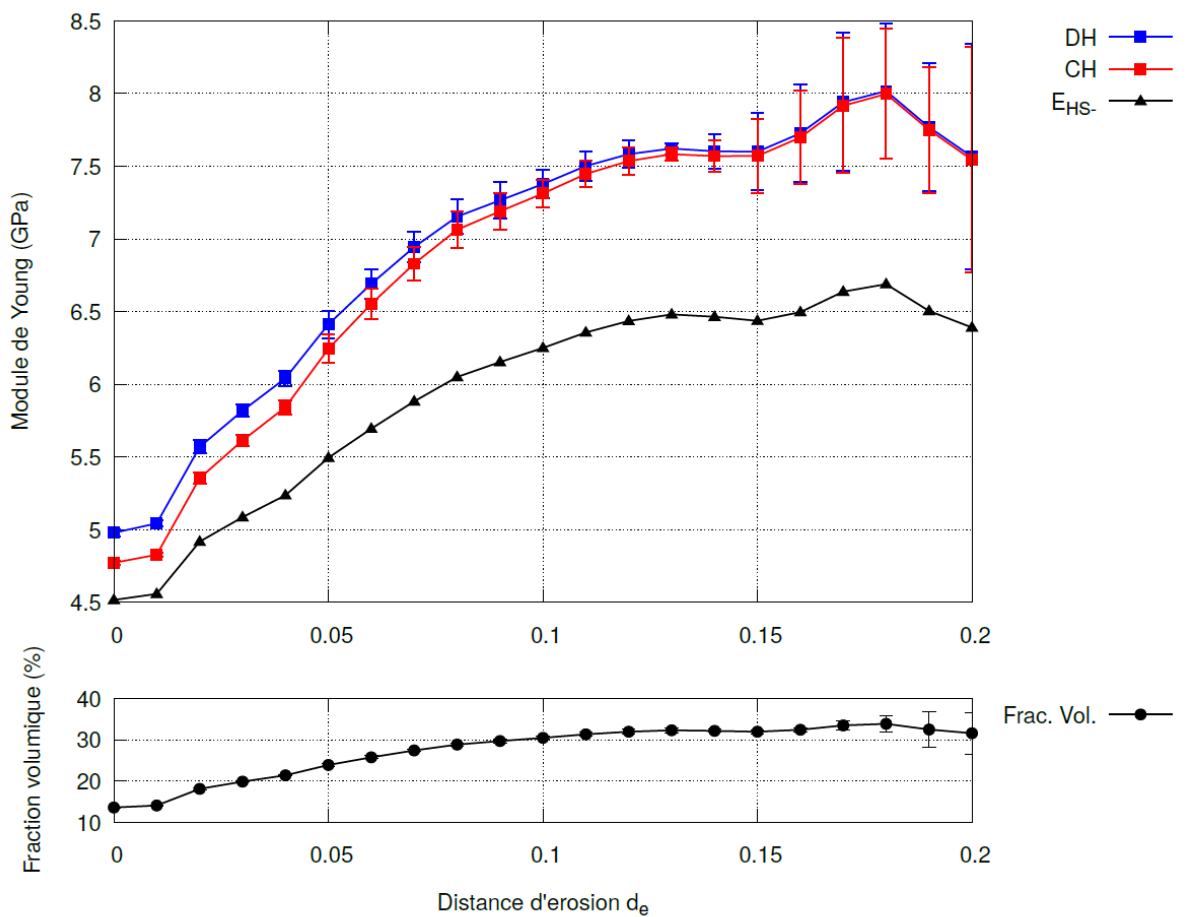


Figure 6 – Résultat principal : évolution du module de Young et de la fraction volumique de fibres en fonction de la distance d'érosion. DH représente des conditions aux limites non périodique en déformations homogènes, CH des conditions aux limites non périodique en contraintes homogènes. Ehs- est la borne analytique inférieur de Hashin-Shtrikman

## 5. Une nouvelle approche pour obtenir des modèles homogènes

Afin de tenir compte des réserves formulées dans le paragraphe précédent, une nouvelle approche est proposée afin d'obtenir des modèles d'échantillons les plus homogènes possibles. En effet, étant donné que la méthode DCR permet d'obtenir des échantillons de matériaux composites qui sont homogènes au cœur des VES créés, l'idée est de faire les calculs d'homogénéisation uniquement au cœur des VES mais sans érosion des résultats.

Notre nouvelle approche consiste à :

- créer un VES de plus grande taille que celui souhaité au départ. La méthode DCR crée un grand VES non homogène dont le cœur correspond à la taille souhaitée et est homogène.
- mailler ce grand VES. Aucun problème de convergence du maillage n'apparaît parce que ce grand VES ne présente pas de singularité puisque des fibres problématiques ont été retirées sur sa frontière.
- découper dans le maillage obtenu, un cube au cœur du VES qui correspond à la taille d'échantillon souhaitée tout en appliquant un ensemble de traitements destinés à générer un maillage conforme de ce cube (en vert sur la Figure 7).
- optimiser le maillage ainsi découpé en adaptant des pratiques classiques d'optimisation de maillage.
- faire les calculs d'homogénéisation sur le maillage découpé et optimisé en imposant les conditions aux limites sur ce maillage.
- interpréter les résultats sur le maillage du cœur du volume de départ qui a servi au calcul.

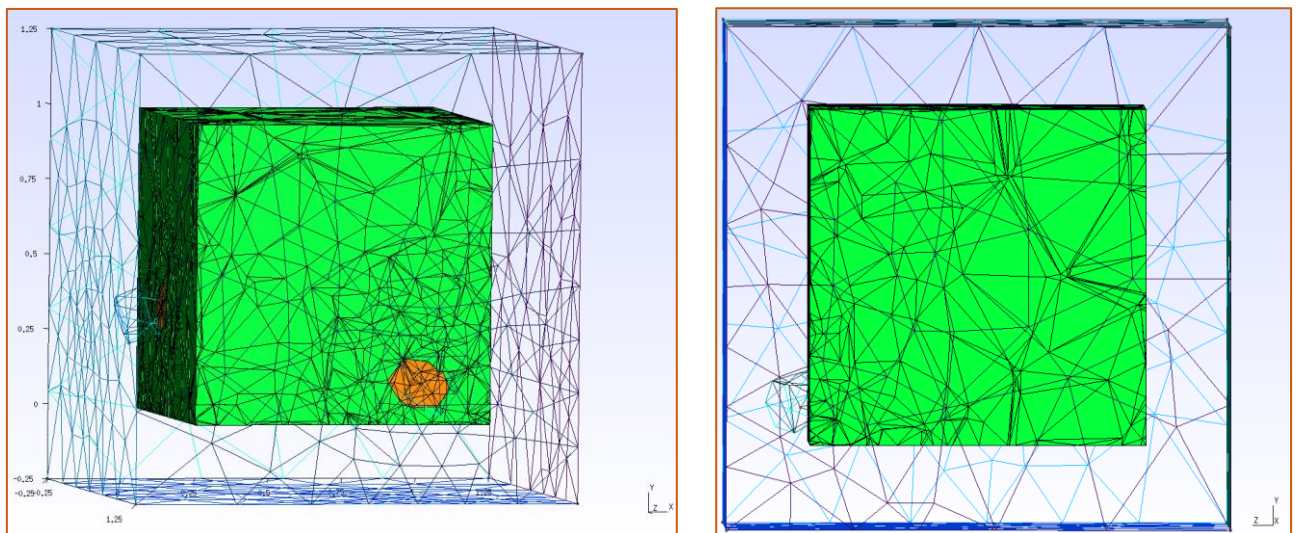


Figure 7 – Exemple d'une coupe du maillage.

Cette approche permet d'effectuer des calculs d'homogénéisation sur des modèles numériques homogènes issus d'une génération par la méthode DCR et donc pour des taux de fibres beaucoup plus importants qu'avec la méthode RSA. Elle permet d'éviter le post traitement des résultats par érosion et d'obtenir directement les résultats recherchés. Cependant elle est plus complexe à opérer. Cette approche vise notamment à évaluer la précision des résultats obtenus en utilisant la méthode d'érosion. En effet, obtenir des résultats semblables à ceux obtenus en utilisant la méthode d'érosion constituerait une autre

validation pratique de cette méthode d'érosion, bien que cela n'en constitue pas une validation théorique. Valider la méthode d'érosion des résultats présente un intérêt important étant donné que cette méthode est à la fois simple et rapide.

## 6. Conclusion

Notre approche de modélisation des composites particulaires est résumée et différents problèmes rencontrés sont exposés. La méthode proposée permet de générer des modèles de matériaux composites à haut pourcentage de fibres, et ceci avec n'importe quelles formes de fibres. La nécessité de mailler ces structures avec un nombre de mailles réaliste pour faire un calcul nécessite de prendre des décisions sur le fait de conserver ou non des fibres situées aux frontières des échantillons. Finalement, les modèles de calcul de nos échantillons n'étant pas parfaitement homogènes, des traitements particuliers doivent être appliqués afin d'en tenir compte. Une méthode d'érosion des résultats qui donne des résultats acceptables, mais qui ne présente pas de fondement théorique est utilisée. Une deuxième méthode est en cours de développement dans l'objectif d'obtenir des modèles éléments finis homogènes sans érosion. Cette nouvelle méthode doit permettre de valider numériquement les résultats obtenus avec la méthode d'érosion, car la méthode d'érosion permet d'obtenir les résultats de manière plus simple et plus rapide.

## Références

- [1] Couture, A., et al., *Automatic generation of statistical volume elements using multibody dynamics and an erosion-based homogenization method*. Computational Mechanics, 2022. **69**(4): p. 1041-1066.
- [2] Couture, A., et al., *Automatic statistical volume element modeling based on the unified topology model*. International Journal of Solids and Structures, 2020. **191-192**: p. 26-41.
- [3] Cuillière, J.C. and V. Francois, *Integration of CAD, FEA and topology optimization through a unified topological model*. Computer-Aided Design and Applications, 2014. **11**(5): p. 1-15.
- [4] ISO. *Industrial automation systems and integration - Product data representation and exchange - Part 203: Application protocol: Configuration controlled 3D designs of mechanical parts and assemblies*. 2003. Norme ISO10303.
- [5] *OpenCascade*. Available from: [www.opencascade.com](http://www.opencascade.com).
- [6] Segurado, J. and J. Llorca, *A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2002. **50**(10): p. 2107-2121.
- [7] EDF. *Code\_Aster, Analysis of Structures and Thermomechanics for Studies & Research*. 2020; Available from: [www.code-aster.org](http://www.code-aster.org).
- [8] Bornert, M., T. Bretheau, and P. Gilormini, eds. *Homogénéisation en mécanique des matériaux, Tome 1 : Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*. 2001, Hermes science. 250 pages.