

MODELISATION DU COMPORTEMENT MECANIQUE DES COMPOSITES RENFORCES PAR DES FIBRES VEGETALES

A. Béakou, C. Mattrand, K. Charlet, *Institut Pascal, UMR 6602 UBP/CNRS/IFMA B.P. 265, 63175 Aubière Cedex. Téléphone : 04 73 28 80 00, Télécopie : 04 73 28 81 00, Adresse électronique : Alexis.Beakou@ifma.fr*

Mots clés : Modèles numériques, propriétés locales, microstructure, mesures morphométriques, développement de Fourier, contour simulé.

1. INTRODUCTION

L'utilisation des fibres végétales s'est intensifiée ces dernières années dans l'industrie, notamment pour remplacer les fibres de verre dans les matériaux composites. Le dimensionnement des pièces en composites à renfort végétal exige la connaissance des propriétés mécaniques de ces matériaux. Dans un souci de réduction des coûts, les industriels cherchent à réduire le nombre d'essais de caractérisation en estimant ces propriétés au stade de développement des produits. La démarche naturelle consiste à appliquer à ces matériaux, les modèles déjà développés pour l'étude des composites à renfort synthétique. Toutefois, les fibres végétales présentent un certain nombre de particularités à prendre en compte dans les modèles : elles se présentent le plus souvent sous forme de faisceaux (fibres techniques) comportant une à vingt fibres élémentaires, ont une structure hiérarchique complexe induisant une anisotropie des comportements et présentent une grande variabilité géométrique et mécanique. Ces complexités excluent de fait l'utilisation de modèles analytiques et conduisent naturellement au développement de modèles numériques.

Le développement des techniques d'imagerie et des plateformes logicielles sur des ordinateurs de plus en plus puissants a favorisé les recherches sur les matériaux numériques. En France, les premières journées sur cette thématique ont été organisées du 12 au 14 février 2013 à Loches (JMN 2013). Même si ces journées ont surtout été axées sur les matériaux métalliques ou les géomatériaux, les méthodologies de recherche qui sont présentées sont applicables aux composites à fibres végétales. Pour l'estimation des propriétés homogénéisées, l'approche peut se résumer schématiquement de la façon suivante : numérisation de la microstructure suivie d'une segmentation et d'une analyse morphologique des images, reconstruction d'une microstructure (réelle ou virtuelle) suivie de l'estimation des propriétés homogénéisées.

Cette communication traite des modèles numériques d'estimation des propriétés mécaniques des composites à fibres végétales, la modélisation des procédés de fabrication n'est pas abordée. Seuls les comportements macroscopiques des composites à fibres continues unidirectionnelles seront étudiés, les phénomènes locaux conduisant à la rupture ne sont pas abordés. Les renforts de taille nanométrique comme les fibrilles de cellulose sont également exclus du cadre de cette communication. La première section de ce document fait un état de l'art succinct des modèles et souligne les verrous scientifiques et technologiques restant à lever. La deuxième section décrit quelques techniques de mesure des propriétés locales des phases et des interfaces. Enfin, dans la troisième et dernière section, nous présenterons des travaux en cours de développement dans notre laboratoire visant à modéliser la variabilité observée sur la section des fibres dans le composite.

2. MODELES NUMERIQUES DE COMPOSITES A FIBRES VEGETALES

Afin de rendre compte de la structure hiérarchique des fibres, certains modèles sont multiéchelles tandis que d'autres sont enrichis par incorporation de paramètres issus d'échelles inférieures. Ces modèles relèvent tous de la mécanique des milieux continus même si à l'échelle de la matrice extracellulaire, cette hypothèse est discutable. L'homogénéisation numérique utilise souvent la méthode des éléments finis alors que dans certains cas, le calcul FFT pourrait se révéler plus adapté. Dans un premier temps, nous présenterons les modèles numériques développés pour l'estimation des propriétés mécaniques des fibres, étape indispensable dans la modélisation des composites.

2.1 Modèles de fibres élémentaires et de faisceaux

Ce sont essentiellement des modèles de type « essai virtuel » développés en vue d'estimer des propriétés anisotropes non accessibles par l'expérimentation, ces propriétés servant de données d'entrée aux modèles de composites. Kent Persson (2000) a développé un modèle numérique d'homogénéisation multiéchelle des trachéides (Figure 1), puis du bois. Il part de la microfibrille, constituée de cellulose, d'hémicellulose et de lignine, et supposée être organisée en unités répétitives. Cette organisation, qui n'est pas bien connue, repose sur les schémas de Preston (1974) et de Fengel (1970). De plus, les propriétés mécaniques des polymères de base, leurs fractions volumiques dans les sous-couches pariétales ne sont pas connues avec précision et font encore l'objet de nombreuses études.



Figure 1. Essai virtuel sur une fibre de bois (Kent Persson 2000)

Qing et Mishnaevsky (2009) ont utilisé un pavage hexagonal (Figure 2) pour modéliser le bois, assimilable à un faisceau de trachéides. Les propriétés élastiques des sous-couches pariétales ont été estimées à partir des équations d'Halpin-Tsai. L'influence de l'humidité sur les propriétés mécaniques a été étudiée. Comme précédemment, les propriétés des polymères de base (cellulose, hémicellulose, lignine), la composition biochimique locale dans les sous-couches pariétales ne sont pas connues avec précision.

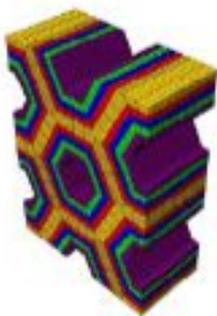


Figure 2. Volume élémentaire représentatif du bois d'après Qing et Mishnaevsky (2009)

Beakou et Ntenga (2011) ont utilisé la partition de Voronoï d'une part, et la squelettisation par zone d'influence (SKIZ) des lumens d'autre part (Figure 3), pour simuler virtuellement des essais en vue d'estimer les propriétés anisotropes d'un faisceau de fibres issues de racines aériennes d'une liane tropicale. Si le modèle géométrique est amélioré par rapport aux travaux antérieurs, la difficulté liée au manque de données reste entière.

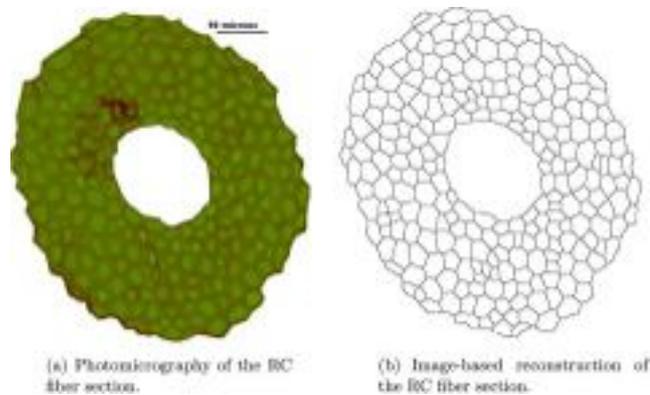


Figure 3. Reconstruction surfacique d'une section de faisceau de fibres (Beakou et Ntenga 2011)

Les travaux de Rafsanjani et al. (2013) marquent un progrès dans la qualité des données. En utilisant les résultats de mesure de densité locale, d'épaisseurs de couches et d'angle de microfibrilles dans les sous-couches pariétales effectuées par Lanvermann et al. (2013), les auteurs ont développé un modèle numérique multiéchelle de l'hygroexpansion de l'épicéa.

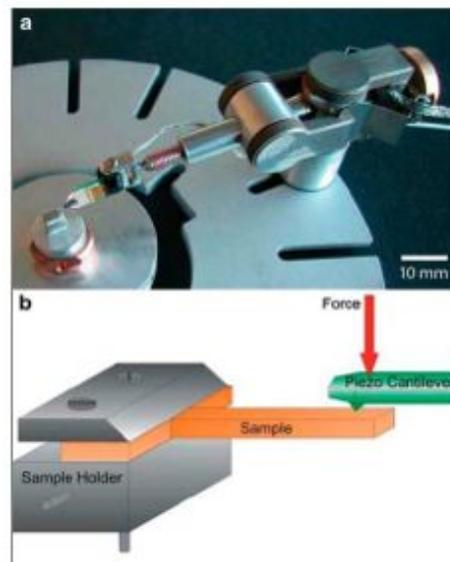
2.2 Modèles numériques de composites à fibres végétales unidirectionnelles

Il n'existe presque pas de modèle numérique de composites à fibres végétales ou plutôt rien ne distingue les modèles actuels de ceux utilisés pour les autres composites. Deux raisons peuvent être avancées pour expliquer cette situation. La première est liée à la nature séquentielle et découplée des modèles numériques utilisés. L'estimation (ou la mesure) des propriétés des renforts n'est donc pas liée au modèle. Toutefois, comme souligné en introduction, la morphologie particulière des fibres techniques exige un traitement approprié car elle a une grande influence sur les propriétés mécaniques transverses du composite. La deuxième raison est liée au manque de données fiables aux échelles inférieures induisant des écarts importants entre propriétés macroscopiques estimée et mesurée.

Pour conclure cette section, nous pouvons dire que des travaux de recherche doivent être entrepris pour développer des modèles numériques des composites à fibres végétales. Les connaissances élaborées sur d'autres types de matériaux (matériaux métalliques, géomatériaux, biomatériaux) peuvent être avantageusement adaptées aux composites à fibres végétales dans les domaines de l'analyse morphologique, la reconstruction des microstructures et l'homogénéisation numérique (éléments finis ou FFT). A l'échelle de la matrice extracellulaire, des connections doivent être établies entre modèles de dynamique moléculaire et de milieux continus afin de mieux rendre compte des mécanismes physiques réelles et pallier au manque de données. Aux échelles intermédiaires, des essais doivent être mis en œuvre pour une validation étape par étape de ces modèles multiéchelles.

3. MESURE LOCALE DE PROPRIETES MECANIQUES

Le développement de techniques modernes d'essais permet aujourd'hui d'effectuer des mesures locales de propriétés à des échelles intermédiaires, les valeurs mesurées pouvant servir à valider des propriétés estimées issues de grandeurs aux échelles inférieures ou à alimenter le calcul numérique vers les échelles supérieures. Quatre exemples de mesure locale de propriétés mécaniques sont proposés ci-après. Le premier est issu des travaux d'Orso et al. (2006) et vise à mesurer par flexion le module d'élasticité de la double paroi de trachéides de bois. La méthode consiste à découper à l'aide d'un faisceau d'ions (FIB) une éprouvette dans la paroi végétale puis à solliciter une de ses extrémités par la pointe d'une sonde piezorésistive de microscope AFM montée sur un micromanipulateur, l'autre extrémité de l'éprouvette étant encastrée (Figure 4). L'observation au microscope électronique à balayage permet de relever la flèche induite par l'effort appliqué et de calculer le module d'élasticité de la double paroi.



Extract-Fig. 2 (a) The testing device (b) Schematic of the bending test method

Figure 4. Equipement de mesure et schéma de principe de l'essai (Orso et al. 2006)

Le deuxième exemple vise également la détermination du module d'Young de la paroi végétale, cette fois-ci par nanoindentation (Moon et al. 2006). Une série d'indentation à effort croissant est effectuée dans la paroi par la sonde d'un microscope à force atomique (Figure 5). En traçant la courbe représentant la force d'indentation en fonction de la profondeur de l'empreinte, les auteurs ont calculé le module d'élasticité, le module de relaxation et la dureté de la paroi. Bournaud et Baley (2012) ont également utilisé la nanoindentation de la paroi végétale pour évaluer l'influence de la maturité des fibres et de leur position dans la section sur leur comportement mécanique.

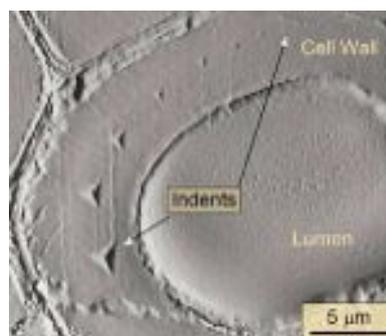


Figure 5. Mesure locale de module élastique par nanoindentation (Moon et al. 2006)

Les deux derniers exemples de travaux présentés dans cette section visent à évaluer les propriétés d'interface : interface fibre de lin / PLLA par essai de la microgoutte (Le Duigou et al. 2012) (Figure 6) et interface fibre / fibre dans un faisceau par essai de cisaillement (Charlet et al. 2011).

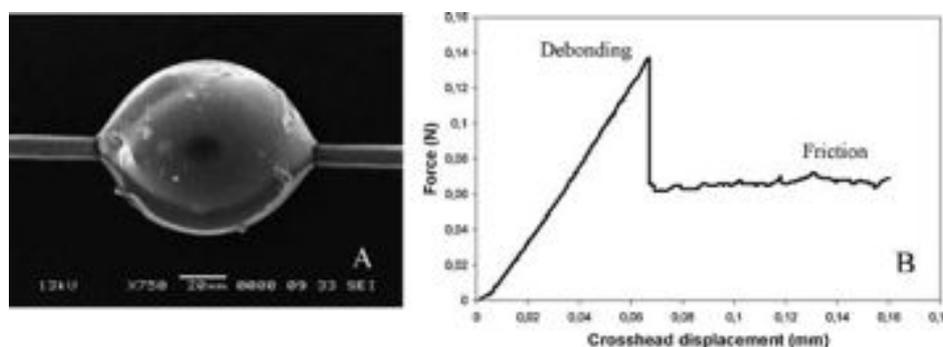


Figure 6. Test de la microgoutte et courbe force / glissement (Le Duigou et al. 2012)

4. UNE METHODE DE SIMULATION DE MICROSTRUCTURE VIRTUELLE

Nous décrivons ici une partie des travaux en cours dans notre équipe de recherche ayant pour objectif final le calcul des propriétés homogénéisées d'un composite lin / époxy et les variabilités associées, à partir de microstructures simulées. La première étape consiste à générer des contours virtuels de fibres et de faisceaux à partir d'une image de la microstructure réelle du matériau. Seule cette étape sera brièvement décrite dans cette communication. Puis, les contours des fibres et des faisceaux sont distribués dans une cellule à l'aide d'un algorithme approprié et les renforts virtuels reconstruits. Enfin, des simulations numériques sont effectuées sur la cellule pour le calcul des propriétés homogénéisées et la propagation des variabilités.

Pour la description quantitative du contour des renforts, nous sommes partis d'une image de microstructure de composite lin / époxy comportant 850 fibres élémentaires et 175 faisceaux. Après avoir segmenté l'image, des paramètres morphométriques caractérisant les sections des renforts ont été calculés. Il s'agit de l'aire de la surface, du périmètre, de la largeur de Feret, du ratio de Feret, de la circularité géodésique, de la tortuosité et de la convexité. Les coordonnées bidimensionnelles de chaque pixel appartenant au contour d'un renfort définissent un nombre complexe et l'ensemble des pixels du contour définit une fonction discrète de la variable complexe. Une transformation de Fourier discrète est alors appliquée et les coefficients de Fourier obtenus sont utilisés dans une transformation inverse pour la reconstruction des contours. Pour réduire le bruit et ne prendre que l'information essentielle pour la reconstruction des contours réels, les fonctions résultant de la transformation inverse sont tronquées, l'ordre de troncature étant défini à partir de l'erreur sur les paramètres morphométriques. L'étape suivante consiste à introduire de la variabilité pour chaque catégorie de renfort (fibre élémentaire, faisceau) en considérant que chaque vecteur de coordonnées des pixels de contour est une réalisation d'un processus aléatoire à deux dimensions. Les méthodes classiques d'inférence sont alors utilisées pour identifier le type et les paramètres du processus sous-jacent. La méthode de reconstruction de contour proposée a été validée par des simulations de Monte Carlo.

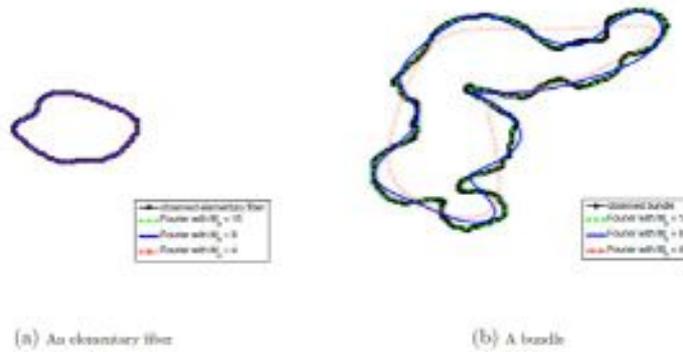


Figure 7. Contours réels reconstruites en fonction de l'ordre de troncature (Mattrand et al. 2014)

5. CONCLUSION

La modélisation du comportement mécanique des matériaux composites à fibres végétales devrait bénéficier des développements en cours autour de la thématique des matériaux numériques. Si la méthodologie générale est commune avec d'autres types de matériau, il existe certaines spécificités qui doivent être traitées pour parvenir à des modèles efficaces d'estimation des propriétés homogénéisées. Au nombre de ces spécificités, figurent la variabilité de la géométrie des fibres, la structure hiérarchique de ces renforts et enfin, le manque de données aux différentes échelles pour alimenter les modèles ou valider leurs résultats. La levée de ces verrous constitue un des défis pour la communauté scientifique travaillant sur ces matériaux.

REFERENCES

- JMN, <http://www.jmatnum.org/> (consulté le 16/01/2014).
- Persson K., "Micromechanical modelling of wood and fibres properties", *Doctoral Thesis*, Lund University, (2000).
- Preston R.D., "The Physical Biology of Plant Cell Walls", *Chapman and Hall Eds* (1974).
- Fengel D., "The Physics and Chemistry of Wood Pulp Fibres", *TAPPI Eds* (1970).
- Qing H. & Mishnaevsky L., "Moisture-related mechanical properties of softwood: 3D micromechanical modeling", *Computational Materials Science*, **46**, 2, (2009), pp. 310-320.
- Beakou A. & Ntenga R., "Structure, morphology and mechanical properties of Rheckophyllum camerunense (RC) plant-fiber Part II: Computational homogenization of the anisotropic elastic properties", *Computational Materials Science*, **50**, 2, (2011), pp. 1550-1558.
- Rafsanjani A. & Lanvermann C. & Niemz P. & Carmeliet J. & Derome D., "Multiscale analysis of free swelling of Norway spruce", *Composite Part A*, **54**, (2013), pp. 70-78.
- Lanvermann C. & Evans R. & Schmitt U. & Hering S. & Niemz P., "Distribution of structure and lignin within growth rings of Norway spruce", *Wood Science and Technology*, **47**,3, (2013), pp. 627-641.
- Orso S. & Wegst U.G.K. & Arzt E., "The elastic modulus of spruce wood cell wall material measured by an in situ bending technique", *Journal of Materials Science*, **41**,16, (2006), pp. 5122-5126.
- Moon R.J. & Frihart C.R. & Wegner T., "Nanotechnology applications in the forest products industry", *Forest Products Journal*, **56**,5, (2006), pp. 4-10.
- Bourmaud A. & Baley C., "Nanoindentation contribution to mechanical characterization of vegetal fibers", *Composite Part B*, **43**,7, (2012), pp. 2861-2866.
- Le Duigou A. & Bourmaud A. & Balnois E. & Davies P. & Baley C., "Improving the interfacial properties between flax fibres and PLLA by a water fibre treatment and drying cycle", *Industrial Crops and Products*, **39**, (2012), pp. 31-39.
- Charlet K. & Beakou A., "Mechanical properties of interfaces within a flax bundle Part I: Experimental analysis", *International Journal of Adhesion and Adhesives*, **31**, 8, (2011), pp. 875-881.
- Mattrand C. & Beakou A. & Charlet K., "Numerical modelling of the flax fiber morphology variability", soumis à *Composite Part A*, (2014).