

Modélisation VER de composites thermoplastiques à renforts discontinus

Y. Nait Abdelaziz^a, J.L. Bouvard^b, D. Pino Muñoz^c, M. Bernacki^d, N. Saintier^e

a. MINES ParisTech, PSL Research University, CEMEF, CNRS UMR 7635, CS 10207 06904 Sophia Antipolis Cedex, France. yacine.nait_abdelaziz@mines-paristech.fr

b. MINES ParisTech, PSL Research University, CEMEF, CNRS UMR 7635, CS 10207 06904 Sophia Antipolis Cedex, France. jean-luc.bouvard@mines-paristech.fr

c. MINES ParisTech, PSL Research University, CEMEF, CNRS UMR 7635, CS 10207 06904 Sophia Antipolis Cedex, France. daniel.pino_muoz@mines-paristech.fr

d. MINES ParisTech, PSL Research University, CEMEF, CNRS UMR 7635, CS 10207 06904 Sophia Antipolis Cedex, France. marc.bernacki@mines-paristech.fr

e. I2M-DuMAS, CNRS UMR5295, Arts et Métiers ParisTech, Esplanade des Arts et Métiers, 33405 Talence, France, nicolas.saintier@ensam.fr

Mots clés : VER ; Tomographie ; Composite renforcé fibres de verre courtes.

Résumé

Cette étude vise à développer des volumes élémentaires représentatifs (VERs) de composites polymères à renforts discontinus à partir d'image de tomographies au rayons X [1-2]. La génération et la simulation de ces microstructures a pour but de mieux comprendre l'influence des principales caractéristiques de la microstructure (fraction volumique de charges, qualité de l'interface fibre/matrice, distributions d'orientation et/ou de longueur de fibres, comportement de la résine) sur le comportement mécanique du composite. Le matériau de l'étude est un polyamide PA66 renforcé fibres de verre courtes.

1. Introduction

Dans le cadre de cette étude, nous nous intéresserons plus particulièrement à étudier l'influence du choix de modélisation de la résine en termes de lois de comportement (viscoélastiques ou viscoplastiques) sur le comportement global et local du composite. Ces lois ont été identifiées sur une résine PA66 pour différents taux d'humidité de la matrice.

Les simulations ont été réalisées en utilisant le code C++ Cimlib développé au CEMEF [3-5]. Une approche dite immergée (contexte éléments finis-approche level set - adaptation de maillage) pour la génération des VERs et une approche lagrangienne multidomaine classique concernant la sollicitation de ces VERs ont été utilisées (Figure 2). Des simulations numériques sous chargement de traction sur différentes microstructures ont été réalisées. Une analyse plus locale des concentrations de contrainte a également été menée pour des VERs chargés parallèlement ou perpendiculairement à la direction des fibres.

2. Observation des mécanismes de déformation et d'endommagement au niveau microscopique.

Plusieurs techniques expérimentales peuvent être utilisées pour mettre en évidence la relation entre microstructure et propriétés mécaniques. Par exemple, la microscopie électronique à balayage (MEB) a été utilisée par [1] pour déterminer les orientations des fibres hétérogènes affichées par la structure peau (fibres orientées parallèlement à l'écoulement) et coeur (fibres orientées perpendiculairement à l'écoulement). Des études de référence dans le domaine des endommagements sous sollicitations quasi-statiques ou cycliques ont été réalisées par Horst [2] et Sato [3,4] en utilisant la fractographie au MEB et l'émission acoustique. Ils ont pu observer et proposer les principaux mécanismes d'endommagement évoluant dans les composites thermoplastiques à fibres courtes sous chargement. Les auteurs ont constaté que l'initiation des dommages était principalement due à la microfissure aux extrémités des fibres. En effet, les extrémités des fibres sont caractérisées par une mauvaise adhésion fibre-matrice en raison de l'absence d'ensimage.

Cependant, le MEB ne fournit que des observations de surface alors que la microstructure composite est une structure 3D. La tomographie à rayons X permet des observations dans le volume. Par conséquent, cette technique est de plus en plus utilisée pour mieux comprendre la relation entre le processus et la microstructure (par exemple [5-7]) ainsi que les mécanismes d'endommagement à l'échelle microscopique. En ce qui concerne le mécanisme de déformation sur composites thermoplastiques à fibres courtes, seuls quelques travaux sont disponibles dans la littérature. Les études de [8,9] ont porté sur l'évolution des micro vides lors d'essais de traction et de fatigue interrompus. Cependant, leur analyse ne tient compte que de la quantité globale de vides dans le volume analysé et n'a pas apporté d'informations relatives au scénario d'initiation des endommagements dans le matériau. Des travaux de référence sur les observations de microtomographie à rayons X in situ associées à des analyses quantitatives de dommages ont été effectués par N. Saintier et al.

Dans les études suivantes [10-13], les auteurs ont présenté six mécanismes d'endommagement (rupture de fibre, dommages aux extrémités des fibres, décollement, cavitation, fibrillation et croissance des dommages dans la matrice) et ont étudié l'effet de l'humidité relative et de l'orientation des fibres sur ces différents mécanismes d'endommagement (par exemple, la figure 1 montre les dommages aux extrémités des fibres).

En ce qui concerne la littérature scientifique, nous n'avons pas connaissance d'études similaires à notre projet. L'utilisation de telles observations par tomographie à rayons X (avec une résolution de 0,7 μm) apportera une forte valeur ajoutée à la modélisation des dommages qui sera réalisée dans ce projet.

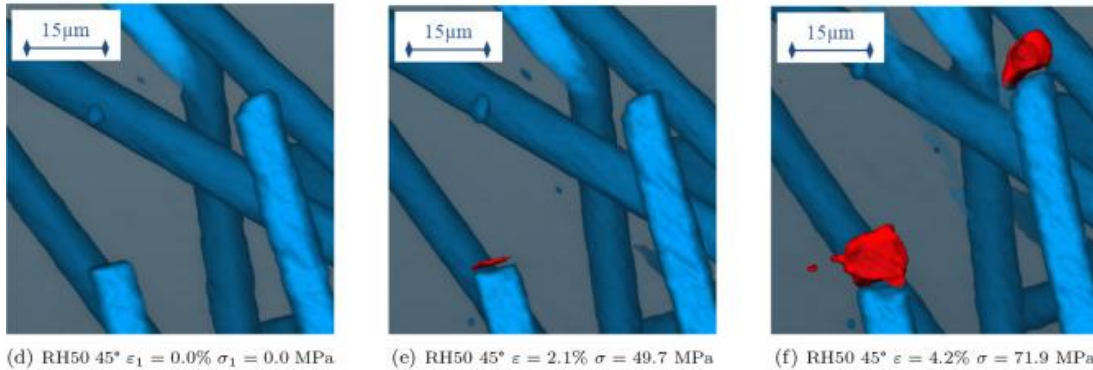


Figure 1: Evolution de l'endommagement en bout de fibre (traction quasi-statique) [13]

2.1. Generation et simulation de microstructures complexes de composites

Les calculs numériques à l'échelle microstructurale du matériau sont basés sur des techniques d'homogénéisation reposant sur des informations microstructurales (telles que les propriétés mécaniques de phase, la fraction volumique, les formes et l'orientation de phase, etc.) afin de modéliser les propriétés mécaniques effectives du composite. Il existe deux grandes catégories d'homogénéisation :

- i) les méthodes à champ moyen (basées sur des modèles analytiques) ;
- ii) les méthodes complètes (basées sur des modèles numériques).

Pour les techniques analytiques d'homogénéisation, on peut citer le modèle d'Eshelby [14], le schéma autocohérent [15], le modèle de Mori-Tanaka [16] et le modèle d'Advani-Tucker [17], entre autres. Les principales faiblesses de ces modèles sont qu'elles «idéalisent» la microstructure du matériau et ne tiennent donc pas compte de la microstructure complexe (présentée par la distribution de la longueur des fibres, la désorientation locale des fibres, les propriétés des matériaux complexes, etc.), ce qui conduit à des prédictions imprécises.

Dans ce projet, nous nous concentrerons sur des méthodes complètes. Les méthodes de champ complet sont basées sur une modélisation numérique de la microstructure pour obtenir le champ local et les propriétés effectives du matériau hétérogène. Cette technique est réalisée en deux étapes :

- i) Génération du VER à partir d'une microstructure réelle ou statistiquement représentative ;
- ii) Simulation numérique VER.

Génération du VER : En ce qui concerne la génération d'une microstructure statistiquement représentative, l'un des algorithmes les plus utilisés pour générer une microstructure aléatoire a été l'algorithme RSA (Random Sequential Addition) [18]. Il consiste à sélectionner des positions aléatoires dans le volume du ferrailage en évitant tout contact entre elles. L'algorithme RSA a été appliqué pour la première fois aux cylindres par [19]. Sa principale faiblesse est la difficulté d'atteindre des fractions de volume élevé avec un nombre élevé de fibres avec un temps de calcul acceptable [20-22]. Pour atteindre une fraction volumique supérieure, différentes méthodes ont été développées :

- i) la méthode de Monte Carlo (MC) [23-24] peut être assez lente pour atteindre un volume sans chevauchement de fibres ;

- ii) méthodes basées sur la dynamique moléculaire qui peuvent accélérer le processus d'élimination du contact entre les fibres [25] et ;
- iii) méthode basée sur la contraction mécanique en volume associée à une vitesse de particule spécifique s'il y a détection de contact entre les renforcements [26].

Sur la base de ces méthodes, plusieurs études ont porté sur la génération VER de composites thermoplastiques à fibres courtes ([27-28]) pour une fraction volumique habituelle de 30%. Toutefois, l'état de l'art ne montre que peu d'œuvres consacrées à la fraction volumique de fibres élevée dans les composites thermoplastiques à fibres courtes. Le travail le plus intéressant a été réalisé par [29] et a permis d'atteindre une fraction volumique de fibres proche de 50%.

En ce qui concerne la génération de microstructures réelles à partir de la tomographie à rayons X, les auteurs ([7,30], entre autres) ont utilisé un logiciel développé pour les données de tomographie à rayons X (comme Avizo®) afin de générer un maillage directement à partir des données de tomographie traitées. La principale faiblesse de ces méthodes est qu'elles fournissent une taille de maille uniforme le long de la microstructure. Pour satisfaire la conformité du maillage à l'interface entre la résine et les fibres, la taille de l'élément doit être suffisamment petite, ce qui entraîne un temps de calcul élevé.

Récemment, une approche par éléments finis basée sur des méthodes d'adaptation de maillage anisotrope et des méthodes de Level Set a été développée par le CEMEF pour modéliser les VER contenant des grappes de particules (Milesi et al., 2011, voir Miled 2010, Hitti et al. 2012, 2013, 2016, Scholtes et al. 2015, 2016 et Shakoore 2016; Shakoore et al. 2015a, b, 2016). Dans le cadre de ce projet, nous prévoyons d'utiliser les fonctionnalités de la bibliothèque éléments finis du CEMEF Cimlib [13,14 Bernacki et al. 2011; Digonnet et al. 2007] en termes de stratégie immergée ou adaptée au corps (contexte FE - cadre de niveau défini - adaptation de maillage) pour la génération exacte ou statistique de VER ainsi que pour le raffinement du maillage à l'interface résine / fibre. En 2016, un projet de recherche post-master co-conseillé par l'IP et M. Bernacki a montré les capacités de la bibliothèque FE actuelle CimLib @ pour générer une microstructure de composites complexes à partir d'images tomographiques (voir Figure 2).

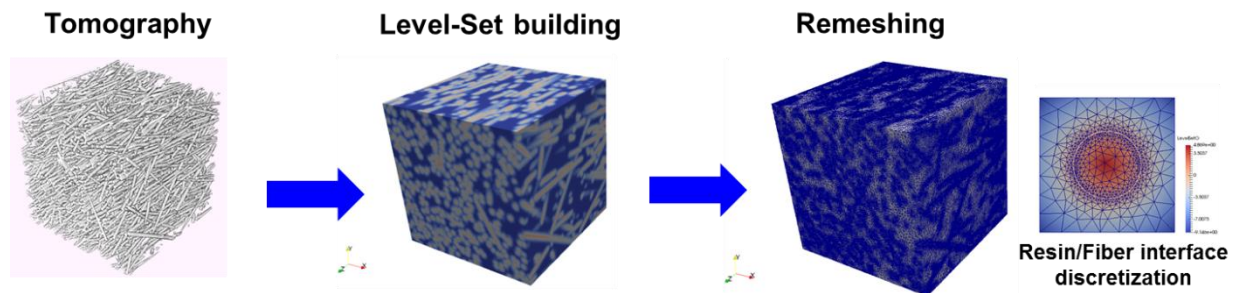


Figure 2: Méthodologie de generation du VER à partir de données microtomographiques

Simulation numérique du VER : Deux méthodes principales sont utilisées pour calculer le champ local et les propriétés effectives d'une microstructure 3D. Le premier est basé sur l'algorithme FFT (Fast Fourier Transforms) proposé par [31]. Cette méthode est basée sur la discrétisation de la microstructure en voxels, puis en résolvant pour chaque voxel le comportement du matériau dans l'espace de Fourier. Cette technique a été appliquée pour calculer les propriétés effectives de composites thermoplastiques à fibres courtes ([32,33] entre autres). La méthode FFT est intéressante car elle n'exige pas un maillage complet de la microstructure et le temps de calcul est relativement rapide. Cependant, dans notre cas,

cette méthode présente un inconvénient majeur: la discrétisation de l'interface résine / fibre qui sera composée de voxel «composite» représentant les deux matériaux. Cette méthode ne pourra pas pour l'instant modéliser correctement les mécanismes d'endommagement à l'interface ainsi que l'apparition d'une troisième phase représentant des vides.

La seconde méthode est basée sur la méthode éléments finis et sera privilégiée dans notre projet. Le temps de calcul sera relativement élevée cependant nous pensons qu'elle permettra de mieux modéliser les mécanismes d'endommagement à l'interface résine/fibre.

Références :

- [1] M. Vincent, T. Giroud, A. Clarke, C. Eberhardt, Description and modeling of fiber orientation in injection molding of fiber reinforced thermoplastics, *Polymer*, Volume 46, Issue 17, 2005, Pages 6719-6725.
- [2] Horst JJ, Spoomaker JL. Mechanisms of fatigue in short glass fiber reinforced polyamide 6. *Polym Eng Sci* 1996;36(22):2718e26.
- [3] Sato N, Kurauchi T, Sato S, Kamigaito O. Mechanism of fracture of short glass fibre-reinforced polyamide thermoplastic. *J Mater Sci* 1984;19:1145e52.
- [4] Sato N, Kurauchi T, Sato S, Kamigaito O. Microfailure behaviour of randomly dispersed short fibre reinforced thermoplastic composites obtained by direct SEM observation. *J Mater Sci* 1991; 26:3891e8.
- [5] M. De Monte, E. Moosbrugger, M. Quaresimin, Influence of temperature and thickness on the off-axis behaviour of short glass fibre reinforced polyamide 6.6 – Quasi-static loading, *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, Volume 41, Issue 7, July 2010, Pages 859-871, ISSN 1359-835X
- [6] S. Kleindel , D. Salaberger , R. Eder , H. Schretter , C. Hochenauer , *Int. Polym. Process.* 2015 , 30 , 366
- [7] Ayadi, A., Nouri, H., Guessasma, S. and Roger, F. (2016), Large-Scale X-Ray Microtomography Analysis of Fiber Orientation in Weld Line of Short Glass Fiber Reinforced Thermoplastic and Related Elasticity Behavior. *Macromol. Mater. Eng.*, 301: 907–921. doi:10.1002/mame.201500463
- [8] F. Cosmi, A. Bernasconi, Micro-CT investigation on fatigue damage evolution in short fibre reinforced polymers, *Composites Science and Technology*, Volume 79, 18 April 2013, Pages 70-76, ISSN 0266-3538, <http://dx.doi.org/10.1016/j.compscitech.2013.02.008>.
- [9] Cosmi, F., and C. Ravalico. "Threshold Identification for Micro-Tomographic Damage Characterisation in a Short-Fibre-Reinforced Polymer." *Strain* 51.3 (2015): 171-179.
- [10] M.F. Arif, N. Saintier, F. Meraghni, J. Fitoussi, Y. Chemisky, G. Robert, Multiscale fatigue damage characterization in short glass fiber reinforced polyamide-66, *Compos Part B*, 61 (2014), pp. 55–65
- [11] M.F. Arif, F. Meraghni, Y. Chemisky, N. Despringre, G. Robert " In situ damage mechanisms investigation of pa66gf30 composite: effect of relative humidity *Compos Part B*, 58 (2014), pp. 487–495"
- [12] Rolland, Héloïse, Nicolas Saintier, and Gilles Robert. "Damage mechanisms in short glass fibre reinforced thermoplastic during in situ microtomography tensile tests." *Composites Part B: Engineering* 90 (2016): 365-377.
- [13] Rolland, H., Saintier, N., Wilson, P., Merzeau, J., & Robert, G. (2017). In situ X-ray tomography investigation on damage mechanisms in short glass fibre reinforced thermoplastics: Effects of fibre

orientation and relative humidity. *Composites Part B: Engineering*, 109, 170-186.

- [14] Eshelby, J., 1957. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proc. R. Soc. Lond. Ser. A Math. Phys. Sci.* 241, 376–396.
- [15] Hill, R., 1965. A self-consistent mechanics of composite materials. *J. Mech. Phys. Solids* 13, 213–222.
- [16] Mori, T., Tanaka, K., 1973. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metall.* 21, 571–574.
- [17] Advani, S. G. and Tucker, C. L. (1987). The use of tensors to describe and predict fiber orientation in short fiber composites. *Journal of Rheology*, 31(8) :751–784.
- [18] B. Widom. Random sequential addition of hard spheres to a volume. *Journal of Chemical Physics*, 44(10):3888–3894, 1966.
- [19] Jens Feder. Random sequential adsorption. *Journal of Theoretical Biology*, 87(2):237–254, 1980.
- [20] SEGURADO, J. and LLORCA, J. (2002). A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50, 2107-2121.
- [21] Barello, R.B., Lévesque, M., 2008. Comparison between the relaxation spectra obtained from homogenization models and finite elements simulation for the same composite. *Int. J. Solids Struct.* 45, 850–867.
- [22] Lubachevsky, B., Stillinger, F., 1990. Geometric properties of random disk packings. *J. Stat. Phys.* 60, 561–583.
- [23] A. Gusev. Representative volume element size for elastic composites: numerical study. *J. Mech Phys Solids*, 45:1449–1459, 1997.
- [24] D. Duschlbauer, H.J. Bohm, and H. E. Pettermann. Computational simulation of composites reinforced by planar random fibers: homogenization and localization by unit cell and mean field approaches. *J Compos Mater*, 40:2217–2234, 2006.
- [25] E. Ghossein and M. Lévesque. Random generation of periodic hard ellipsoids based on molecular dynamics: A computationally-efficient algorithm. *J Comp Phys*, 253:471–490, 2013.
- [26] S. Williams and A. Philipse. Random packings of spheres and spherocylinders simulated by mechanical contraction. *Phys Rev E*, 67:1–9, 2003.
- [27] Hui Liu, Danielle Zeng, Yang Li, Liying Jiang, Development of RVE-embedded solid elements model for predicting effective elastic constants of discontinuous fiber reinforced composites, *Mechanics of Materials*, Volume 93, February 2016, Pages 109-123,
- [28] Wenlong Tian, Lehua Qi, Jiming Zhou, Junhao Liang, Yuqin Ma, Representative volume element for composites reinforced by spatially randomly distributed discontinuous fibers and its applications, *Composite Structures*, Volume 131, 1 November 2015, Pages 366-373
- [29] Schneider, M., The sequential addition and migration method to generate representative volume elements for the homogenization of short fiber reinforced plastics, *Comput Mech* (2017) 59: 247. doi:10.1007/s00466-016-1350-7
- [30] Abderrahmane Ayadi, Hedi Nouri, Sofiane Guessasma, Frederic Roger, An original approach to assess elastic properties of a short glass fibre reinforced thermoplastic combining X-ray tomography and finite element computation, *Composite Structures*, Volume 125, July 2015, Pages 277-286
- [31] MOULINEC, H. and SUQUET, P. (1998). A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 157, 69- 94.

- [32] Viktor Müller, Matthias Kabel, Heiko Andrä, Thomas Böhlke, Homogenization of linear elastic properties of short-fiber reinforced composites – A comparison of mean field and voxel-based methods, *International Journal of Solids and Structures*, Volumes 67–68, 15 August 2015, Pages 56-70
- [33] Matti Schneider, An FFT-based fast gradient method for elastic and inelastic unit cell homogenization problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Volume 315, 1 March 2017, Pages 846-866, ISSN 0045-7825