Génération de VERs et calcul d'homogénéisation : application aux composites thermoplastiques à renforts discontinus

I. Coppo[a], D. Pino Munoz[a], M. Bernacki[a], J.L Bouvard[a]

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

Résumé:

Cette étude vise à développer des volumes élémentaires représentatifs (VERs) de composites polymère à renforts discontinus. La génération et l'homogénéisation de ces microstructures permet de mieux comprendre l'influence de la fraction volumique des fibres, de la qualité de l'interface fibre/matrice, des distributions d'orientation et/ou de longueur de fibres sur le comportement mécanique du composite. Le matériau de l'étude est un polyamide PA66 renforcé fibres de verre courtes. Les simulations ont été réalisées en utilisant le code C++ Cimlib développé au CEMEF qui permet d'introduire une approche dite immergée (contexte éléments finis-approche level set - adaptation de maillage) pour la génération des VERs et une approche lagrangienne multidomaine avec remaillage conforme pour la simulation de ces VERs ont été utilisées. Des simulations numériques sous chargement de traction ont été réalisées sur différentes microstructures en régime élastique dans le but de déterminer les modules de Young longitudinaux et transverses. Une analyse plus locale des concentrations de contrainte a également été menée.

Abstract:

This study aims to develop representative elementary volumes (RVEs) of polymer composites with discontinuous reinforcements. The generation and homogenization of such element will help to better understand the influence of parameters such as fibers volume fraction, fiber orientation and length distributions on the mechanical behavior of the composite. The composite investigated in this study is a Polyamide 6-6 (PA 6.6) reinforced with short glass fibers. Numerical simulations were performed using a parallel C++ library Cimlib developed at CEMEF that allows introduction of an immersed FE strategy (FE context - level set framework - meshing adaptation) for RVEs generation and a classical multidomain lagrangian formulation with an enhanced body-fitted remeshing framework when dealing with RVEs deformation. Numerical simulations under tensile loading were performed on different elastic microstructures in the aim of determining the longitudinal and transversal Young moduli. Local stress concentration was also analyzed.

Mots clefs : Thermoplastique renforcé fibres courtes; VER; Méthode Level Set ; Remaillage

1 Introduction

Les pressions écologiques et économiques poussent les secteurs des transports aéronautiques, navals et terrestres à faire de plus en plus appel à des pièces d'habitacles ou de structure en composites techniques. Les composites, alliant légèreté et résistance mécanique, participent à l'allègement des pièces structurales et contribuent à la réduction de la dépendance des véhicules à l'énergie fossile, mais également à la réduction de leur impact environnemental. Toutefois, la compréhension de leur comportement mécanique reste imparfaite due à la complexité de leur microstructure. Ceci est un frein considérable à l'usage de ces matériaux lorsque la sécurité du véhicule est engagée ou à l'optimisation de leur utilisation, le dimensionnement ne présentant pas un degré de confiance suffisant.

Cette étude vise à développer des volumes élémentaires représentatifs (VERs) de composite polymère à renforts discontinus. La génération et l'homogénéisation de ces microstructures permettra de mieux comprendre l'influence de la fraction volumique de charges, de la qualité de l'interface fibre/matrice, des distributions d'orientation et/ou de longueur de fibres sur le comportement mécanique du composite. De nombreux modèles d'homogénéisation sur microstructures idéalisées [1-4] et par méthodes à champ complet (que ce soit par des calculs FFT [5-7] ou éléments finis (EF) [8,9]) ont été appliqués pour modéliser les matériaux composites. Dans cette étude, nous nous focaliserons sur une approche d'homogénéisation champ complet EF associant méthode level-set et techniques de remaillage qui est beaucoup moins fréquente dans la littérature. Le matériau de l'étude est un polyamide PA66 renforcé fibres de verre courtes. Les simulations ont été réalisées en utilisant le code C++ Cimlib ([10-12]) développé au CEMEF.

Dans le cadre de cette étude, une approche dite immergée (contexte EF - 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. Des simulations numériques sous chargement de traction ont été réalisées sur différentes microstructures en régime élastique dans le but de déterminer les modules de Young longitudinaux et transverses. Une analyse plus locale des concentrations de contrainte a également été menée pour des VERs chargés parallèlement ou perpendiculairement à la direction des fibres. Les résultats en termes de modules élastiques simulés ont été comparés aux modèles de Mori-Tanaka et d'Advani et Tucker [3,4].

2 Génération de VERs

Nous avons utilisé dans cette étude des outils numériques et des méthodologies basées sur une combinaison de méthode Level-Set [13] et des outils d'adaptation de maillage [11,12,14,15]. Une fonction Level-Set, Φ, est définie sur un domaine Ω au travers d'une fonction distance euclidienne, Φ, d'une interface Γ et pour n'importe quel point x de Ω par:

$$\begin{cases} \phi(x) = \pm d(x,\Gamma), x \in \Omega \\ \Gamma = \{x \in \Omega, \phi(x) = 0\} \end{cases} \quad (1)$$

Ainsi à l'interface Γ, la fonction level-set, Φ, vaut zéro et par convention est généralement définie comme positive à l'intérieur du domaine définit par Γ et négatif à l'extérieur. Pour obtenir une estimation correcte des champs de déformation et de contrainte calculés à l'interface, le maillage est raffiné autour cette dernière. L'adaptation de maillage est réalisée par le mailleur/remailleur Fitz développé par [11,12] avec la métrique développée dans [16] et adoptée dans [17]. Plusieurs exemples de discrétisation de l'interface en 2D (coupe orthogonale à la direction principale d'une fibre) sont donnés dans la Fig. 1.

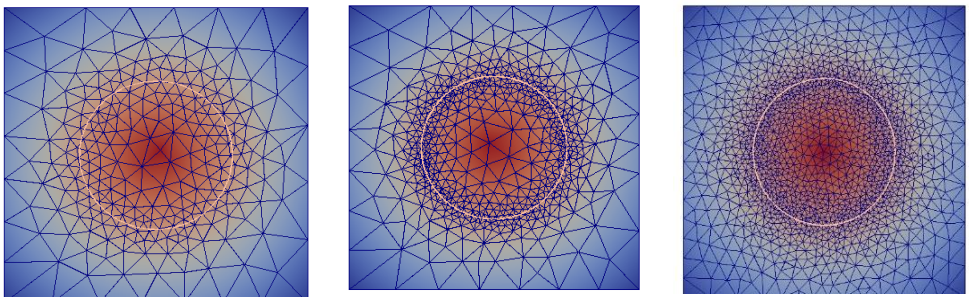


Fig. 1 Différents maillages dont la taille de maille est localement liée à la courbure de l'interface.

À l'aide de la méthode level-set et des techniques d'adaptation de maillage, des VERs ont été générés à partir de microstructures réelles (obtenues à partir de tomographies par rayons X) ou statistiques (générées à partir du logiciel Digimat FE). Dans la Fig. 2, nous présentons la méthodologie de génération de VERs à partir de tomographies par rayons X réalisées dans le cadre de [18]. Comme cela est illustrée Fig. 2, les fonctions distances aux interfaces sont obtenues à partir des images seuillées de tomographies. Ces fonctions ont ensuite été immergées dans un maillage EF. Des méthodes de remaillage sont ensuite appliquées afin d'obtenir une bonne discrétisation de l'interface résine / fibres.

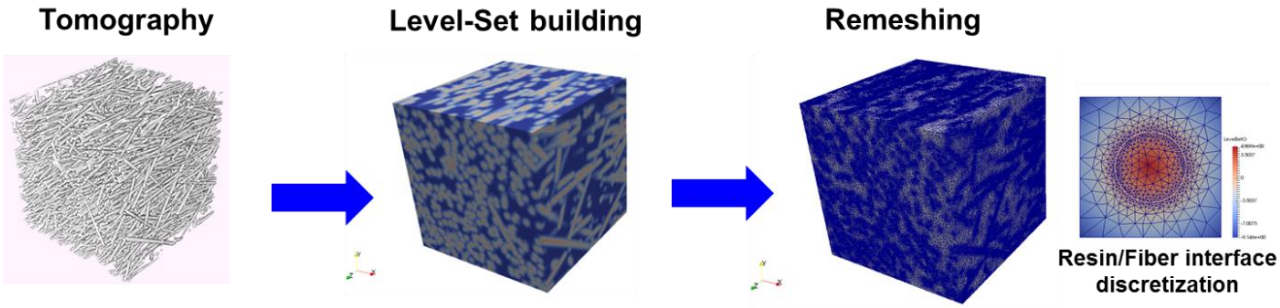


Fig. 2 Méthodologie de génération de VERs à partir de microstructures réelles.

2 Résultats et discussion

Après avoir effectué une étude de convergence sur la taille du VER, des calculs ont été menés sur une taille de VER de 380 µm x 380 µm x380 µm (11 millions d'éléments) pour une microstructure réelle. Ces calculs ont été réalisés en utilisant des propriétés élastiques pour les fibres et la résine. Les résultats présentant le champ de contrainte local pour différentes directions de chargement (parallèle et perpendiculaire à l'orientation principale des fibres) sont détaillés en Fig. 3. Nous avons observé que les concentrations de contrainte sont principalement localisées dans les fibres lorsque le VER est déformé dans la direction des fibres. Pour les chargements réalisés perpendiculairement à la direction des fibres, les concentrations de contrainte sont principalement localisées dans la résine à proximité de fortes désorientations de fibres. De telles observations sont en accord avec [19] et sont encourageantes

pour une future introduction de mécanismes d'endommagement au niveau de la résine, des fibres et à leurs interfaces.

En résumé, une stratégie numérique a été développée pour générer des VERs à partir de microstructures réelles ou statistiquement représentatives. Une étude de convergence a été effectuée afin de valider la taille des VERs. Les champs de contrainte globaux et locaux ont été analysés. En ce qui concerne les modules élastiques simulés partir de microstructure statistique générée par Digimat FE, nous avons trouvé un bon accord avec le modèle d'Advani-Tucker. Cependant, nous avons observé une surestimation des modules élastiques de la microstructure réelle par le modèle d'Advani-Tucker qui s'explique par un gradient complexe d'orientation des fibres dans le cas d'une telle microstructure.

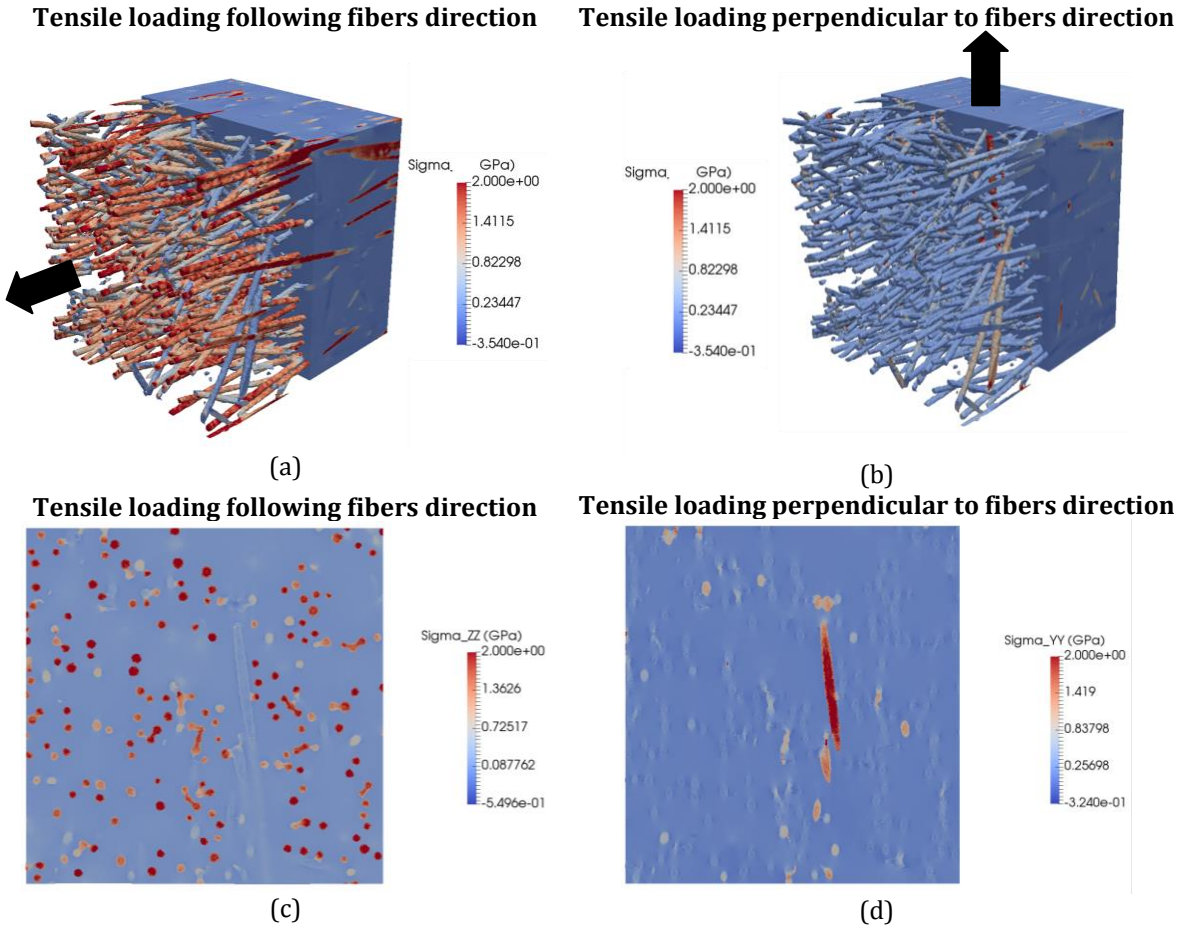


Fig. 3 Champ de contrainte local dans le VER: (a) pour une simulation réalisée pour un chargement dans la direction des fibres; (b) pour une simulation réalisée pour un chargement dans la direction perpendiculaire à l'orientation des fibres; (c) coupe du VER simulé dans la direction des fibres; (s) coupe du VER simulé dans la direction perpendiculaire à l'orientation des fibres;

Références

[1] J. Eshelby, 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, 1957.

[2] R. Hill, A self-consistent mechanics of composite materials. J. Mech.Phys. Solids, 13, 213-222, 1965.

[3] T. Mori, K. Tanaka, Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions, Acta Metall., 21, 571–574, 1973.

[4] S. G. Advani, C. L. Tucker, The use of tensors to describe and predict fiber orientation in short fiber composites, Journal of Rheology, 31(8), 751–784, 1987.

[5] H. Moulinec and P. Suquet, A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 157, 69- 94, 1998.

[6] V. Müller, M. Kabel, H. Andrä , T. 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, 67–68, 56-70, 2015.

[7] M. Schneider, An FFT-based fast gradient method for elastic and inelastic unit cell homogenization problems, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 315, 846-866, ISSN 0045-7825, 2017.

[8] O. Plerard, C. Gonzalez, J. Segurado, J. LLorca, I. Doghri, Micromechanics of elasto-plastic materials reinforced with ellipsoidal inclusions. In: International Journal of Solids and Structures, 44 (21), 6945-6962, 2007.

[9] A. Ayadi, H. Nouri, S. Guessasma, F. Roger, Determination of orthotropic properties of glass fibre reinforced thermoplastics using X-ray tomography and multiscale finite element computation, Composite Structures, 136, 635-649, 2016.

[10] H. Digonnet, L. Silva, and T. Coupez, Cimlib: a fully parallel application for numerical simulations based on components assembly, in MATERIALS PROCESSING AND DESIGN; Modeling, Simulation and Applications; NUMIFORM'07; Proceedings of the 9th International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes, vol. 908, pp. 269-274, AIP Publishing, 2007.

[11] M. Shakoor, M. Bernacki, and P.-O. Bouchard, A new body-fitted immersed volume method for the modeling of ductile fracture at the microscale: analysis of void clusters and stress state effects on coalescence, Engineering Fracture Mechanics, vol. 147, pp. 398-417, 2015.

[12] M. Shakoor, P.O. Bouchard, M. Bernacki, An adaptive level-set method with enhanced volume conservation for simulations in multiphase domains, International Journal for Numerical Methods in Engineering 109 (4), 555-576, 2017.

[13] J. Sethian, Level Set Methods and Fast Marching Methods: Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1999.

[14] C. Gruau and T. Coupez, 3D tetrahedral, unstructured and anisotropic mesh generation with adaptation to natural and multidomain metric. In: Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 194.48, pp. 4951–4976, 2005.

[15] M. Bernacki, R. Logé, and T. Coupez, Level set framework for the finite-element modelling of recrystallization and grain growth in polycrystalline materials". In: Scripta Materialia 64.6, pp. 525–528, 2011.

[16] D.L. Quan, T. Toulorge, E. Marchandise, J.F. Remacle, G. Bricteux, Anisotropic mesh adaptation with optimal convergence for finite elements using embedded geometries, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 268, 65–81, 2014.

[17] M. Shakoor, Three-dimensional numerical modeling of ductile fracture mechanisms at the microscale, PhD Thesis, MINES ParisTech, 2016.

[18] V. Fabre, Étude de l'endommagement en fatigue d'un composite thermoplastique à fibres courtes: cas du polyamide 6,6 renforcé de fibres de verre courtes, Thèse de doctorat en Sciences et génie des matériaux, 2015.

[19] H. Rolland, N. Saintier, P. Wilson, J. Merzeau, G. Robert, 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, 2017.