



Titre: Développement d'une méthode d'homogénéisation de milieu non périodique par enrichissement d'enveloppe
Title:

Auteur: Florian Vazeille
Author:

Date: 2023

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Vazeille, F. (2023). Développement d'une méthode d'homogénéisation de milieu non périodique par enrichissement d'enveloppe [Mémoire de maîtrise, Polytechnique Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/54390/>
Citation:

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/54390/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Louis Laberge Lebel
Advisors:

Programme: Génie mécanique
Program:

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

**Développement d'une méthode d'homogénéisation de milieu non périodique
par enrichissement d'enveloppe**

VAZEILLE FLORIAN

Département de génie mécanique

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*

Génie mécanique

Juin 2023

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé :

Développement d'une méthode d'homogénéisation de milieu non périodique par enrichissement d'enveloppe

présenté par **Florian VAZEILLE**

en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

Frédéric GOSSELIN, président

Louis LABERGE LEBEL, membre et directeur de recherche

David MÉLANÇON, membre

DÉDICACE

A ma famille et mes amis pour leur soutien indéfectible.

REMERCIEMENTS

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude envers Louis Laberge Lebel pour son dévouement et son expertise tout au long de ma maîtrise. Grâce à son encadrement attentif, j'ai pu élargir mes horizons intellectuels, approfondir ma compréhension du domaine et développer des compétences essentielles. Sa confiance et ses conseils éclairés m'ont permis de réaliser des travaux dont je suis fier. Cette expérience a été très enrichissante et me suivra tout au long de ma carrière professionnelle à venir.

J'aimerais remercier mes collègues de travail du laboratoire de Structure de Fibres et Composites Avancés (LabSFCA) ainsi que les partenaires du projet : The Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada, PRIMA Quebec, FilSpec Inc, Pultrusion Techniques; et Bauer Hockey Ltd.

Je tiens à remercier mes parents et Nicolas Beauchamp pour leur aide précieuse lors de la relecture de ce mémoire ainsi que toutes les personnes ayant manifestées leur intérêt concernant mon sujet de recherche qui mène à la rédaction du présent mémoire.

RÉSUMÉ

L'automatisation de la fabrication des composites à renforts fibreux présente un double enjeu en termes de gain de productivité et d'une forte adaptation des propriétés locales. L'utilisation du tressage et de la pultrusion, pour la fabrication de tubes creux permet ainsi de répondre à ces objectifs. Cependant la caractérisation des propriétés mécaniques s'avère d'autant plus difficile à réaliser que la structure se complexifie pour répondre aux exigences imposées. L'homogénéisation est une technique qui intervient pour tenter de proposer un moyen d'encadrer les valeurs effectives du tenseur de rigidité notamment. Associées aux techniques d'éléments finis, l'homogénéisation en champ complet permet de prédire efficacement les propriétés d'une structure à l'aide d'une décomposition à double échelle de celle-ci. Cette méthode est très bien documentée pour l'étude de microstructure présentant une périodicité. En réalité, le procédé de tressage pultrusion introduit de fortes déformations de la structure annulant toute périodicité de celle-ci. L'objectif de ce mémoire est de développer et de valider une méthode permettant d'obtenir les propriétés mécaniques macroscopiques d'un tube creux tressé pultrudé. La méthode développée consiste à ajouter une enveloppe autour de la microstructure étudiée afin de permettre l'application des conditions de périodicité nécessaire à la détermination des propriétés effective de la microstructure.

La première partie de ce mémoire est issue d'un article soumis dans la revue Composite Structures. Celui-ci examine en détail l'influence des paramètres de l'enveloppe dans le but de proposer une méthode encadrée. L'épaisseur et la densité du maillage de l'enveloppe sont étudiées en fonction de la convergence des termes du tenseur de rigidité. L'influence des valeurs initiales du matériau de l'enveloppe est également évaluée. Il porte ensuite sur l'application de la méthode pour un cas simple et bien documenté. Un matériau composite composé d'inclusions sphériques est analysé à l'aide de la méthode proposée, avec l'objectif de déterminer ses propriétés élastiques en le considérant comme isotrope. La matrice du tenseur de rigidité est ainsi calculée pour le cas des inclusions sphériques avec différentes fractions volumiques. Les résultats sont ensuite comparés à ceux obtenus à partir d'un modèle périodique et à ceux d'une étude similaire, permettant ainsi d'évaluer l'efficacité de la méthode.

Le second volet du mémoire aborde l'application de la méthode à un modèle numérique de renforts tressés triaxiaux. La position des fibres est extraite de la simulation d'un procédé de pultrusion. Le modèle est décomposé selon des Volumes Élémentaires Représentatifs (VER)

non-périodiques pour constituer un modèle macroscopique. L'homogénéisation de chaque VER est réalisée à partir de la méthode développée.

La principale contribution de ce mémoire est de développer et d'appliquer la méthode proposée sur différents cas d'études. Cela permet non seulement de vérifier la polyvalence de la méthode et de proposer une démarche claire pour l'emploi de celle-ci. Les résultats démontrent qu'il est possible d'obtenir la convergence des termes du tenseur de rigidité pour les cas étudiés. De plus les résultats obtenus sont cohérents avec les modèles empiriques lorsque ceux-ci sont disponibles.

ABSTRACT

The automation of the manufacture of fibre-reinforced composites presents a double opportunity in terms of productivity gains and a strong control over of local properties. The use of braiding and pultrusion, for the manufacture of hollow tubes helps to meet these objectives. However, the characterization of the mechanical properties is more difficult to achieve as the structure becomes more complex to meet the imposed requirements. Homogenization is a method that suggests a means of defining effective qualities such as the stiffness tensor. When combined with finite element methods, full field homogenization forecasts a structure's properties through a multi scale breakdown of the structure itself. This method is very well documented for micro-structures demonstrating periodicity. In practice, the pultrusion braiding process introduces strong deformations of the structure cancelling any periodicity. The objective of this thesis is to develop and apply an adapted method to obtain the macroscopic mechanical properties of a pultruded braided hollow tube. The method consists in adding an envelope around the microstructure to allow the application of the periodicity conditions necessary to determine the effective properties of the microstructure.

The first part of this paper is based on an article submitted in the journal Composite Structures. It examines the influence of the envelope parameters to adapt them for a given work-case. The thickness and density of the mesh of the envelope are studied as a function of the convergence of the terms of the stiffness tensor. The influence of the initial values of the shell material is also evaluated. It then details the application of the method to a simple and well documented case. A composite material composed of spherical inclusions is analyzed using the proposed method, with the objective of determining its elastic properties considering it as isotropic. The stiffness tensor matrix is calculated for the case of spherical inclusions with different volume fractions. The results are then compared to those obtained from a periodic model and to those of a similar study, thus allowing to evaluate the effectiveness of the method.

The second part of the thesis deals with the application of the method to a numerical model of triaxial braided reinforcements. The position of the fibers is extracted from the simulation of a pultrusion process. The model is decomposed into non-periodic Representative Volume Elementary (RVE) to constitute a macroscopic model. The homogenization of each RVE is performed using the developed method.

The main contribution of this thesis is to validate the proposed method on different case studies. This allows not only to verify the versatility of the method but also to propose a clear approach for the use of this method. The results show that it is possible to obtain the convergence of the terms of the stiffness tensor for the studied cases. Moreover, the results obtained are consistent with the empirical models when available.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	III
REMERCIEMENTS.....	IV
RÉSUMÉ	V
ABSTRACT	VII
TABLE DES MATIÈRES.....	IX
LISTE DES FIGURES	XII
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	XIV
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE.....	4
2.1 Description du Volume Élémentaire Représentatif	4
2.1.1 Discrétisation du milieu	5
2.1.2 Technique de Voxel.....	6
2.1.3 Maillage direct.....	7
2.1.4 Éléments imbriqués	7
2.2 Conditions limites	8
2.2.1 Définition	8
2.2.2 Implémentation des conditions limites	9
2.3 Homogénéisation	10
2.3.1 Homogénéisation en champ moyen.....	10
2.3.2 Homogénéisation en champ complet.....	11
2.3.3 Méthode par transformée de Fourier	13
2.3.4 Méthode de perturbation.....	13

	x
2.3.5 Autres méthodes en champ complet.....	14
2.4 Conclusion et problématique	14
CHAPITRE 3 ARTICLE 1: ENVELOPE ENRICHEMENT METHOD FOR HOMOGENEIZATION OF NON-PERIODIC STRUCTURES	16
3.1 Abstract.....	16
3.2 Introduction.....	16
3.3 Periodic homogenization problem.....	19
3.3.1 Support domain Creation.....	20
3.3.2 Full-field homogenization	21
3.4 Implementation workflow.....	23
3.4.1 Model creation.....	24
3.4.2 Finite Element work case definition.....	25
3.4.3 Homogenization and enrichment process.....	25
3.5 Validation.....	26
3.5.1 Envelope thickness	27
3.5.2 Mesh density.....	28
3.5.3 Initial envelope properties	29
3.6 Application to non-periodic material.....	30
3.6.1 Spherical inclusions modeling.....	30
3.6.2 Results and discussion	31
3.7 Conclusion	33
3.8 Acknowledgements	34
3.9 Data Availability.....	34
CHAPITRE 4 APPLICATION DE LA METHODE POUR UN CAS DE TRESSE TRIAXIALE.....	35

	xi
4.1 Modélisation par éléments finis.....	36
4.1.1 Définition de la microstructure.....	36
4.1.2 Création du VER enveloppé.....	38
4.1.3 Procédé d'homogénéisation.....	38
4.2 Résultats.....	39
4.3 Conclusion	41
CHAPITRE 6 CONCLUSION	42
RÉFÉRENCES	44

LISTE DES FIGURES

Figure 1-1 : Illustration d'un système de tressage thermoplastique. Le système reçoit des fils mélangés tressés provenant de la machine à tresser. Les fibres polymères fondent dans les filières chauffées après préchauffage, saturent les fibres de renforcement et se solidifient après refroidissement. Adapté de [9]	2
Figure 2-1 : Illustration de la notion de transition d'échelle. Un point $x \in \mathcal{M}$ un macro modèle supposé homogène est associé à un volume microscopique $\mathcal{V}$ qui peut être constitué d'un milieu continue microscopique $\mathcal{M}^*$ et de pores $\mathcal{H}$ donnant $\mathcal{V} = \mathcal{M}^* \cup \mathcal{H}$. σ et σ représentent la contrainte macroscopique et microscopique au point x et x respectivement. Inspiré de [16]	5
Figure 2-2 : Illustration en vue 3D et 2D de différentes techniques de modélisations : (a) Voxel, (b) Maillage direct, (c) Eléments imbriqués où les renforts sont superposés au milieu hôte maillé	6
Figure 2-3 : Illustration du champ de contrainte dans un VER soumis à des conditions aux frontières (a)de déformation uniforme, (b) périodique, (c) de traction uniforme.....	9
Figure 2-4 : Illustration du processus d'homogénéisation volumique pour la simulation d'une structure présentant une hétérogénéité de structure à l'échelle inférieure.....	12
Figure 3-1: Four 2D rectangular RVE with different periodicity conditions of their mesh or microstructure at their boundaries	17
Figure 3-2 : Illustration of (a) Support domain with periodic mesh on the boundary. (b) Node projection on parallel faces.....	20
Figure 3-3 : Illustration of (a) Input model of the inclusions. (b) Creation of the RVE. (c) Creation of the envelope volume around the RVE.....	21
Figure 3-4 : Description of the procedure for the EE method	24
Figure 3-5 : Perfect hexagonal unit cell.....	27
Figure 3-6 : Convergence of C_{11} for 10 iterations with the EE method with envelope thickness of 0.1, 0.15, 0.20, 0.25	27

Figure 3-7 : Convergence of C_{11} for 10 iterations with the EE method with envelope thickness of 0.1, 0.15, 0.20, 0.25	29
Figure 3-8 : Illustration of 3D models of (a) periodic RVE and (b) cropped non-periodic RVE of randomly generated spheres.....	30
Figure 3-9 : Values of C_{11} , C_{44} and C_{12} according to the volume fraction predicted by different models.....	32
Figure 4-1 : Illustration de la modélisation des fibres extraites à partir d'éléments 1D selon (a) une section du tube et (b) un grossissement de l'arrangement des fibre du tube complet (c).....	36
Figure 4-2 : Illustration des 3 différents VER possibles sur la structure d'un tube creux rectangulaire	37
Figure 4-3 : Image des fibres modélisées avec une FV de (a) 1.6% et (b) 5.2%	38
Figure 4-4 : Illustration d'un VER enveloppé contenant des fibres imbriquées en noir selon une vue (a) en perspective et (b) frontale	38
Figure 4-5 : Évolution de la différence relative des termes C_{ij} du tenseur entre l'itération i et $i+1$	39
Figure 4-6 : Évolution des termes C_{11} , C_{22} et C_{33} du tenseur de rigidité le long de la structure.	40
Figure 4-7 : Évolution des termes C_{44} , C_{55} et C_{66} du tenseur de rigidité le long de la structure	41
Figure 4-8 : Évolution des termes C_{12} , C_{23} et C_{13} du tenseur de rigidité le long de la structure.	42

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

Sigles :

a, λ, W	Dimensions géométriques
b	Forces extérieures
C	Tenseur de rigidité
E	Module de Young
f	Champ de déformation
$\mathcal{H}$	Phase de vide
$\mathcal{L}$	Longueur caractéristique
$\mathcal{M}$	Corps macroscopique
N	Normale
n	Nœud
ρ	Second tenseur de Piola–Kirchhoff
r	Rayon
$\mathcal{R}$	Configuration de référence
t	Contrainte de traction
u	Champ de déplacement
V	Volume
X	Vecteur position
ε	Gradient de déformation
μ	Corps microscopique
σ	Contrainte
θ	Angle de tressage
ν	Coefficient de Poisson

Abréviations :

CAO	Conception Assistée par Ordinateur
CREPEC	Centre de REcherche sur les systèmes Polymères Et Composites
DU	Condition de Déformation Uniforme (<i>Kinematic Uniform Boundary Conditions</i>)
EF	Éléments finis (<i>Finite Element</i>)
FFT	<i>Fast Fourier Transform</i>
FV	Fraction Volumique
HA	Homogénéisation Asymptotique (<i>Asymptotic Homogenization</i>)
LabSFCA	Laboratoire de Structures de Fibres et de Composites avancés
MPC	<i>Multi Point Constraints</i>
SiC	Carbure de Silicium
TU	Condition de Traction Uniforme (<i>Stress Uniform Boundary Conditions</i>)
UHMWPE	Ultra-High Molecular Weight Polyethylene
VER	Volume Elémentaire Représentatif

Opérateur :

- $\bar{\bullet}$ Intégration de $\bullet$ sur le volume V considérée
- $\dot{\bullet}$ Dérivée relative de $\bullet$

INTRODUCTION

À mesure que les matériaux composites continuent d'évoluer et de s'améliorer, il existe un besoin croissant de méthodes robustes pour prédire leurs propriétés macroscopiques effectives démontrées expérimentalement. Les matériaux composites sont populaires dans diverses industries en raison de leur potentiel à ajuster finement les propriétés du produit final. Lorsqu'il s'agit de structures en fibres de carbone contenues dans une matrice polymérique, le procédé le plus répandu est celui des stratifiés. Cette technique requiert une forte intervention manuelle pour disposer chaque renfort.

Afin d'anticiper de possibles disruptions dans les chaînes d'approvisionnement et d'avoir un plus grand contrôle des paramètres de fabrications, la question de la relocalisation d'une partie des chaînes de production de produits composites en Amérique du Nord et en Europe s'est légitimement posée. Pour envisager cela, il faut considérer une automatisation des procédés de fabrication. Ceci afin de limiter au maximum l'intervention humaine et donc l'augmentation des coûts de production [1]. Cette démarche doit également s'accompagner d'une plus-value et d'une bonne maîtrise des propriétés des produits manufacturés pour les pièces de hautes performances ou d'autres qualités distinctives comme la recyclabilité avec l'emploi de matrice thermoplastique [2,3]. Dans cette optique, plusieurs procédés permettent l'automatisation partielle ou complète des chaînes de production, à l'image de l'enroulement filamentaire, la pultrusion continue ou le placement automatisé de préimprégnés [4–7]. La pultrusion-tressage dont le procédé est illustré en Figure 1, permet la production continue de renforts tressés en composites thermoplastiques. Leur emploi se justifie par de bonnes propriétés de résistance en flexion et de légèreté [8].

La conception des éléments composites issus de processus de production automatisés est rendue possible grâce aux avancées de la Conception Assistée par Ordinateur (CAO). Les techniques de caractérisation numériques, conjuguées à la validation expérimentale sur des échantillons physiques, servent à confirmer l'exactitude des modèles utilisés. Cette approche innovante facilite également la création de produits dont les propriétés sont finement ajustées pour répondre à des exigences spécifiques, sans perturber fondamentalement les méthodes de fabrication établies. La structure ainsi que les paramètres de fabrication et de finition du composite sont donc méticuleusement adaptés en amont, en fonction d'un ensemble de paramètres qui peuvent interagir de manière complexe, afin d'atteindre un objectif prédéfini.

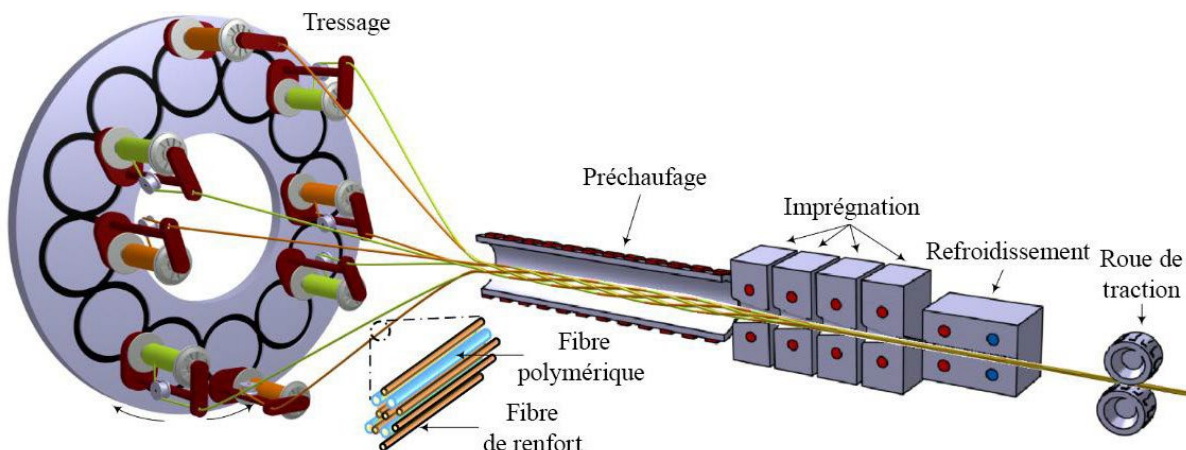


Figure 1-1 : Illustration d'un système de tressage thermoplastique. Le système reçoit des fils mélangés tressés provenant de la machine à tresser. Les fibres polymères fondent dans les filières chauffées après préchauffage, saturent les fibres de renforcement et se solidifient après refroidissement. Adapté de [9]

Les propriétés effectives dépendent des caractéristiques de la microstructure, des matériaux constitutifs et de leur agencement géométrique. Concernant les composites à renforts tressés, les caractéristiques mécaniques dépendent majoritairement de la fraction volumique de fibres et de leurs orientations. La tâche de caractérisation est complexe car de petites variations de la microstructure peuvent avoir un impact important sur les propriétés effectives. Une discrétisation au niveau microscopique est donc nécessaire. L'échelle microscopique fait généralement référence au placement individuel des fibres. L'échelle mésoscopique correspond aux torons. L'échelle macroscopique fait référence à la pièce entière.

Une multitude de méthodes mathématiques ont été mises en place pour offrir un cadre théorique en matière de modélisation constitutive de matériaux composites et d'analyse par éléments finis. La plupart de ces approches peuvent requérir une structure et un maillage périodique, ce qui limite leur utilisation avec des microstructures fortement stochastiques ou lorsque celle-ci est voulue non périodique. Une grande disparité entre les phases, notamment en présence de vides ou de constituants de rigidité perçue comme infinie peut également être problématique. Ces enjeux sont abordés plus tard dans la revue de littérature. La création d'un modèle numérique fidèle à la microstructure réelle est un enjeu important pour déterminer les propriétés effectives d'un échantillon à l'aide de méthodes numériques disponibles [10–14].

Cette tâche est rendue complexe par les nombreuses interactions générées par la friction entre fibres et entre les fibres et le moule de pultrusion. Une consolidation des fibres est également observée à l'issue du procédé de pultrusion ce qui affecte la microstructure de manière inhomogène [15].

L'objectif principal de ce mémoire est de proposer une méthode permettant l'évaluation des propriétés élastiques de matériaux composites qui présentent une non-périodicité de la microstructure. Cela se décompose en quatre objectifs :

1. Création d'un volume élémentaire représentatif comportant une enveloppe extérieure.
2. Implémentation d'une méthode d'homogénéisation par élément finis sur le modèle créé.
3. Validation de la méthode sur des cas de structures non périodiques.
4. Démonstration de la méthode sur un composite tressé pultrudé

Une revue de littérature est d'abord présentée au chapitre 2. Les différents trois premiers objectifs sont réalisés au travers d'un article en parution retranscrit dans le chapitre 3. L'article, soumis au journal '*Composite Structures*' examine l'influence des paramètres de l'enveloppe et la détermination du tenseur de rigidité complet pour un cas d'inclusions sphériques. Le chapitre 4 présente l'application de la méthode développée sur un tube creux réalisé par pultrusion de renforts fibreux tressés. Une décomposition d'un modèle issu de la simulation des fibres est exploité pour ensuite procéder à l'homogénéisation à l'aide de la méthode d'enrichissement d'enveloppe.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTERATURE

Dans ce chapitre une revue permettant de mieux comprendre les enjeux de la détermination des propriétés effectives élastiques d'un renfort tressé pultrudé est présentée. L'implémentation des méthodes d'homogénéisation requièrent tout d'abord une description des hétérogénéités du milieu, étape préliminaire essentielle à l'emploi de techniques multiéchelles. Cette description se traduit généralement par la définition d'un Volume Élémentaire Représentatif (VER), décrit dans la section 2.1. Une application appropriée de conditions limites, présentées dans la section 2.2 sur ce VER est ensuite nécessaire pour l'implémentation des méthodes d'homogénéisation. Un échantillon de ces dernières est ensuite fourni dans la section 2.3.

2.1 Description du Volume Élémentaire Représentatif

Pour mieux comprendre les comportements physiques observés au niveau macroscopique, la capacité de transcrire des informations à travers différentes échelles est cruciale. L'emploi de ces dernières est interdépendant des méthodes de discrétisation du milieu étudié. La simulation complète d'une macrostructure est ainsi souvent inenvisageable à cause du coût de calcul trop important pour simuler les milieux complexes fortement hétérogènes. Une approximation plus ou moins poussée de l'architecture du matériau, de ses constituants individuels, ainsi que des interactions entre eux est ainsi nécessaire. L'incorporation de ces paramètres est essentielle pour représenter fidèlement le comportement du matériau et se matérialise par la création d'un VER. Celui-ci permet de réduire le cas d'étude à une structure contenant suffisamment d'informations pour décrire fidèlement le milieu d'échelle supérieur. La constitution d'un VER pour la détermination des propriétés effectives par homogénéisation, doit ainsi satisfaire une condition de séparation des échelles [16], illustrée sur la Figure 2-1. Dans un cas de mécanique linéaire élastique, cela se traduit par l'inégalité suivante :

$$\mathcal{L}_\mu \ll \mathcal{L}_{VER} \ll \mathcal{L}_\mathcal{M} \quad 2.1$$

Avec $\mathcal{L}$ la longueur caractéristique associée aux caractéristiques microstructurales μ (comme la taille des inclusions dans les composites bi-composants matrice-inclusions), la taille du RVE et la taille caractéristique du corps macroscopique $\mathcal{M}$.

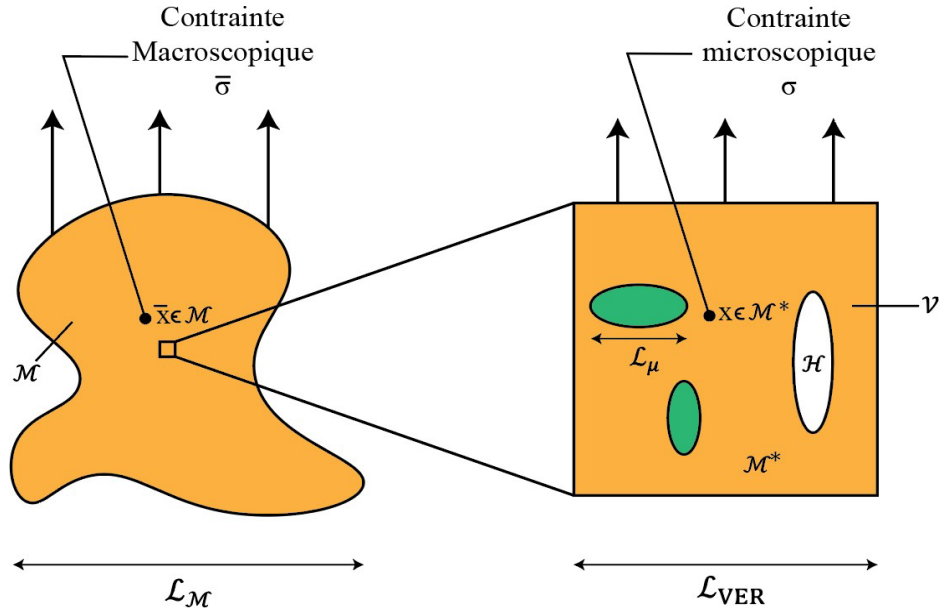


Figure 2-1 : Illustration de la notion de transition d'échelle. Inspiré de [17]

Cette condition assure une transition d'échelle statistiquement fidèle aux fluctuations (comme les contraintes et les déformations) observées en un point du modèle macroscopique de telle sorte qu'elles soient égales à la moyenne des champs respectifs des variables microscopiques sur le volume du VER [17]. Un point $\bar{x} \in \mathcal{M}$ du macro modèle supposé homogène est associé à un volume microscopique $\mathcal{V}$ qui peut être constitué d'un milieu continue microscopique $\mathcal{M}^*$ et de pores $\mathcal{H}$ donnant $\mathcal{V} = \mathcal{M}^* \cup \mathcal{H}$. $\bar{\sigma}$ et σ représentent la contrainte macroscopique et microscopique au point $\bar{x}$ et x respectivement.

Les études actuelles portant sur les renforts tressés font des approximations géométriques comme une conservation de la section des fibres et des trajectoires de fibres parallèles entre elles [18]. L'étude par éléments finis par simulation des fibres lors d'un procédé de pultrusion [9] a montré que l'architecture initiale de la tresse est fortement modifiée et que toutes conditions de périodicité de départ sont annulées aux différentes échelles. Les procédés de tressage moderne permettent aussi d'obtenir des tresses elles-mêmes non-périodiques. Pour profiter de la définition précise de la microstructure, l'aspect non-périodique de celle-ci devra être pris en compte dans l'application des techniques d'homogénéisation.

2.1.1 Discrétisation du milieu

La complexité du processus de discrétisation, étroitement liée à la technique de modélisation utilisée, pose également un défi largement étudié [19]. Trois points d'intérêt centraux sont considérés pour la modélisation d'une structure composite :

- Les propriétés des constituants.
- La géométrie des constituants : la distribution, l'orientation, la forme et la fraction volumique.
- La nature et les caractéristiques des interfaces entre les constituants.

Parmi les techniques de modélisation les plus courantes, qu'elles soient utilisées dans le cadre d'analyse, on peut citer la technique de Voxel, de maillage direct et d'éléments imbriqués illustrées sur la Figure 2-2 et détaillées par la suite.

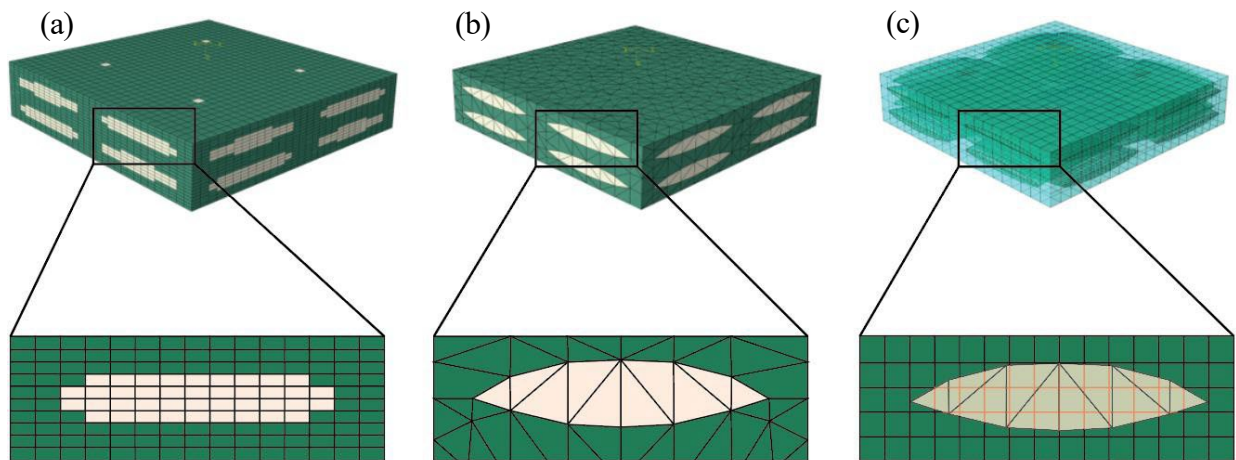


Figure 2-2 : Illustration de la constitution d'un VER d'un tissu à l'aide de différentes techniques de modélisations : (a) Voxel, (b) Maillage direct, (c) Éléments imbriqués

2.1.2 Technique de Voxel

La technique de Voxel vise à une décomposition discrète du VER en une description régulière, indépendante de la microstructure. Cette technique est l'analogie 3D de celle des pixels en 2D et s'avère relativement efficace en termes de coût de calculs. Il existe cependant plusieurs interprétations de ce terme qui peut faire référence à différentes sous-méthodes de modélisation.

La plus classique consiste à créer un maillage régulier, indépendamment de la microstructure. L'affectation des propriétés des éléments se fait en fonction de la phase ou de l'interface présente [20,21]. Certaines études étendent ainsi cette méthode en subdivisant de manière sélective le maillage original pour obtenir une description plus détaillée des interfaces [22]. Cela se fait cependant au détriment du coût de calcul, initialement avantageux de cette méthode comme décrit précédemment. On observe également l'introduction d'importantes distorsions aux interfaces lors de la simulation par éléments finis. La méthode de Voxel induit aussi une anisotropie artificielle, car les normales des surfaces de phase ne peuvent avoir que trois orientations [23]. Pour cette raison et compte tenu de l'architecture complexe exposée par les composites tressés, cette technique n'est pas privilégiée pour l'analyse par éléments finis. En revanche, les méthodes dites « meshless », basées communément sur la transformée de Fourier offrent des avantages distincts avec l'emploi de la décomposition en Voxel. L'association de ces deux méthodes est intéressante pour l'analyse de matériaux périodiques, où elles peuvent exploiter la répétitivité du matériau pour réduire la complexité du problème [24–27].

2.1.3 Maillage direct

La technique de maillage direct propose la définition complète de la structure dans un seul fichier contenant les éléments représentant les différentes phases présente avec une distinction précise des interfaces. C'est une solution très répandue qui a été employée avec succès avec des modèle de VER d'inclusions [28], de tissus [29,30] et de tresses [31,32]. Cependant, la conformité du maillage à l'interface entre la matrice et les inclusions est difficile à respecter de manière automatique lorsque la microstructure est très complexe. Avec les différents langages des programmes d'éléments finis disponibles cela peut engendrer un coût de calculs important.

2.1.4 Eléments imbriqués

La technique d'éléments imbriqués permet le maillage séparé des renforts et de la matrice au prix d'un modèle plus lourd du fait de la superposition d'éléments. L'hypothèse d'une interface parfaite permet d'appliquer les techniques d'homogénéisation en champ complet. Les éléments imbriqués permettent de modéliser la microstructure à partir de simulation numérique d'une structure [31,32] ou d'un scanner de l'échantillon réel [35,36]. Cependant, à chaque point d'intégration des éléments imbriqués, le matériau des éléments hôtes n'est pas remplacé. Il est nécessaire de calculer le tenseur de rigidité compensé pour ces derniers, en soustrayant le tenseur

de rigidité de l'hôte à celui de l'élément incorporé comme réalisé par Tabatabaei et Lomov [37].

La contrainte sur les degrés de libertés ne concerne que ceux en translation excluant l'application de cette méthode pour l'homogénéisation de propriétés thermiques, électriques, etc. Elle ne permet pas non plus l'analyse direct de rupture aux interfaces à cause de la non-conformité des maillages et donc d'un décalage entre la frontière de l'élément imbriqué et le maillage des éléments hôtes. Cette technique répond finalement aux exigences de la finesse de la microstructure des renforts tressés en évitant la génération d'éléments dégénérés.

2.2 Conditions limites

L'application appropriée des conditions limites du domaine d'étude est un enjeu important lorsque la discrétisation à l'échelle microscopique est nécessaire afin de traduire fidèlement les fluctuations macroscopiques considérées. L'efficacité en termes de précision et de coût de calcul, de l'implémentation des techniques d'homogénéisation repose sur la pertinence des hypothèses formulées pour la constitution du VER.

2.2.1 Définition

La plupart des méthodes développées dans le cadre du problème d'homogénéisation en champ complet nécessitent à l'origine un VER périodique pour l'application de conditions aux frontières périodiques. Ceci permet une convergence rapide des résultats vers les propriétés effectives avec l'augmentation de la longueur caractéristique $\mathcal{L}_{VER}$ [38]. Cela se traduit non seulement par la satisfaction d'une périodicité du maillage mais aussi des propriétés physiques des éléments sur la frontière du VER. Il existe ainsi trois conditions aux frontières qui satisfont le critère établi par Hill [39]. La première (équation 2.2) impose une Déformation Uniforme (DU) et linéaire sur la frontière $\delta\mathcal{V}$ d'un VER de volume $\mathcal{V}$ (équation 2.3). La seconde (équation 2.4) impose une Traction Uniforme (TU) sur la frontière $\delta\mathcal{V}$. La dernière (équation 2.4) impose une périodicité du champ de déplacement et une périodicité inverse des contraintes de traction sur la frontière décomposée en deux ensembles opposés $\delta\mathcal{V}^+$ et $\delta\mathcal{V}^-$ tels que $\delta\mathcal{V} = \delta\mathcal{V}^+ \cup \delta\mathcal{V}^-$. Une paire de vecteurs normaux $n^+ = -n^-$ dirigés vers l'extérieur sont associés à chaque couple de point $x^+ \in \delta\mathcal{V}^+$, $x^- \in \delta\mathcal{V}^-$. Dans le cas de déformations finies on a les relations suivantes :

$$\vec{u} = \bar{\epsilon}x \quad 2.2$$

$$t = \bar{\sigma} \cdot n \quad 2.3$$

$$u^+ = u^- \quad et \quad t^+ = -t^- \quad 2.4$$

Avec $\vec{u}$ désignant le champ de déplacement, ϵ le gradient de déformation, σ la contrainte au point x et t la contrainte en traction à la frontière. L'opérateur $\bar{\cdot}$ correspond à l'intégrale volumique d'une variable sur le domaine du VER tel que $\bar{\cdot} = \int_V \cdot dV$.

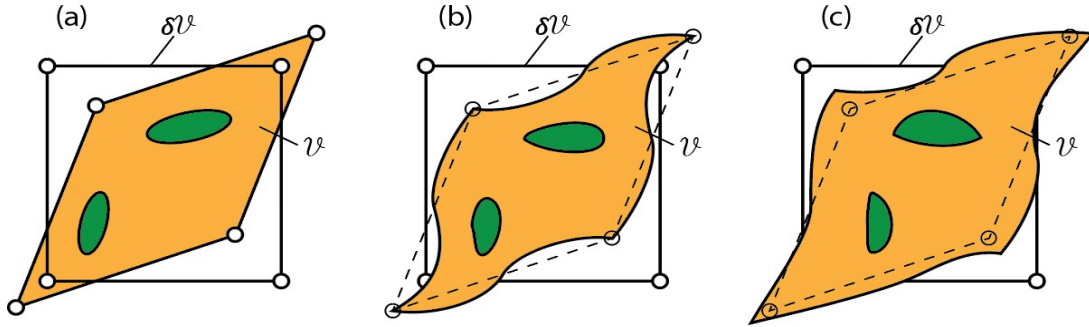


Figure 2-3 : Illustration du champ de contrainte dans un VER soumis à des conditions aux frontières (a) de déformation uniforme, (b) périodique, (c) de traction uniforme

Les conditions aux frontières doivent être appliquées dans le repère associé à la géométrie de la structure considérée. Bien que majoritairement appliquées sur des VER de formes rectangulaires en 2D ou de pavé droit en 3D, il est également possible de traiter d'autres formes présentant une périodicité dans un repère quelconque donné [40,41].

2.2.2 Implémentation des conditions limites

L'application des conditions limites passe généralement par la formulation de contraintes appliquées sur le VER. Cela peut prendre différentes formes, dépendant de la technique d'homogénéisation utilisée, qui peut être purement numérique ou basée sur l'analyse par éléments finis. La plus simple, associée aux conditions de Dirichlet [42,43], passe par une imposition stricte de la valeur d'une variable donnée (comme le déplacement) sur la frontière du domaine δV . La définition stricte des dérivées d'une variable sur cette même frontière, est appelée conditions de Neumann [44,45]. Ces deux conditions sont généralement appliquées grâce à la formulation de multiplicateurs de Lagrange. Elles ne requièrent pas de périodicité et peuvent être associées pour mener à l'application de condition dites généralisées [46].

L'utilisation des techniques reposant sur la formulation de transformées de Fourier [47] ou de la théorie des ondes de Bloch [48] proposent une formulation implicite des conditions de périodicité. Par ailleurs la superposition de conditions de symétrie permet de réduire le domaine

d'étude et donc le coût de calcul en préservant la validité des propriétés de périodicité.

Les conditions de TU et de DU définissent les bornes des propriétés effectives lors de l'homogénéisation et présentent un taux de convergence plus lent que les conditions périodiques lors de l'homogénéisation [38]. L'étude des microstructures non-périodiques présente une complexité supplémentaire dans l'application des conditions aux frontières adaptées. Une étude propose une méthode d'interpolation radiale par point de manière à associer un nœud du maillage d'une face à un groupement de nœuds proches de la projection de celui-ci sur la face opposée [49]. Bien que cela permet de répondre à la problématique posée par un maillage non-périodique, cette méthode n'étudie pas le cas d'une structure non-périodique. Une méthode reposant sur la création d'une enveloppe autour du VER, permet de contourner les contraintes décrites pour l'application de conditions périodique sur une microstructure non-périodique. Par un processus itératif, les propriétés homogénéisées du VER enveloppé sont assignées à l'enveloppe avant de procéder à une nouvelle étape d'homogénéisation. Ceci est répété jusqu'à observer la convergence du tenseur de rigidité calculé et utilisé pour mettre à jour le matériau défini sur l'enveloppe. Harper [50] a utilisé cette méthode pour la détermination des propriétés élastiques d'un composite constitué de fibres courtes placées aléatoirement. Ye Z [38] a utilisé une approche similaire pour le calcul des termes de la diagonale du tenseur de rigidité d'un modèle de mousse poreuse de carbure de silicium d'une densité effective de 18%. Plus de détails sur cette méthode seront fournies plus tard dans ce mémoire.

2.3 Homogénéisation

Les techniques d'homogénéisation, en champ moyen ou en champ complet, permettent une transmission efficace et précise des informations observées à l'échelle microscopique vers l'étude de la structure macroscopique considérée. Ceci s'applique à un très large champ de données bien au-delà des propriétés élastiques classiquement étudiées comme les propriétés acoustiques [51], thermiques [52], perméabilité [53], etc.

2.3.1 Homogénéisation en champ moyen

L'homogénéisation par champ moyen propose une première approximation dans la détermination des propriétés effectives. Elle vise ainsi à modéliser l'hétérogénéité du matériau en utilisant des relations mathématiques fondamentales et des hypothèses quant à la géométrie de la

microstructure notamment, sur un volume donné. La technique de Voigt [54], suppose que le matériau composite est isotrope et que les phases constitutives sont réparties de manière homogène. Cette méthode considère que les contraintes sont uniformes dans tout le matériau et que les déformations sont proportionnelles aux contraintes. La technique de Voigt permet de calculer les propriétés effectives en prenant simplement une moyenne pondérée des propriétés des phases constitutives en fonction de leur Fraction Volumique (FV). La méthode de Reuss [55] suppose que les déformations sont uniformes dans tout le matériau et que les contraintes sont proportionnelles aux déformations. La technique de Reuss permet de calculer le tenseur de rigidité effectif en prenant une moyenne pondérée des inverses des propriétés des phases constitutives en fonction de leur FV. En pratique, il a été démontré par Hills [56] que les méthodes de Voigt et Reuss définissent les bornes du tenseur de rigidité effectif pour le cas d'agrégats cristallins. Il convient de noter que ces techniques sont des approximations simplifiées et ne prennent pas en compte l'effet des interactions entre les phases constitutives ou les éventuelles contraintes résiduelles. Des approches plus avancées, telles que la méthode de Mori-Tanaka introduit cette notion dans le calcul des bornes des propriétés effectives. Celles-ci sont ainsi réduites par rapport à celles proposées par Voigt et Reuss. L'application de cette méthode pour un matériau composite à deux phases décrite par Hashin et Shtrikman [57] permet la détermination analytique des modules macroscopiques de compressibilité K et de cisaillement μ de composites renforcés, composés de phases élastiques linéaires. Par la suite, d'autres études ont porté leur intérêt sur les matériaux composites non linéaires. Ces composites, caractérisés par l'inclusion d'au moins une phase non linéaire, ont fait l'objet de nombreuses recherches. Par exemple, Ponte Castaneda et Willis [58] ont exploré le comportement mécanique des composites visqueux non linéaires, tandis que Suquet [59] a dérivé une série de relations analytiques pour les composites parfaitement plastiques. En outre, le comportement global des composites élastoplastiques a été examiné par Teply et Dvorak [5].

Un grand nombre d'ouvrages présentent ainsi un examen complet des approches analytiques formulées pour estimer les propriétés homogénéisées des matériaux composites hétérogènes (voir [60–62]). Elles posent les bases de l'approche multi-échelle permettant la formulation de méthodes plus avancées. Malgré l'utilisation répandue de ces méthodologies analytiques, elles sont insuffisantes lorsqu'elles sont appliquées à des microstructures complexes.

2.3.2 Homogénéisation en champ complet

L'homogénéisation par champ complet repose sur une définition précise de la géométrie et des propriétés de la microstructure. Cela peut se traduire par une microstructure fortement hétérogène avec une distribution spatiale aléatoire de phases constitutives anisotropes. Celle-ci permet aussi l'étude de cas présentant des non-linéarités géométriques et matérielles prononcées, afin de prédire des propriétés effectives précises.

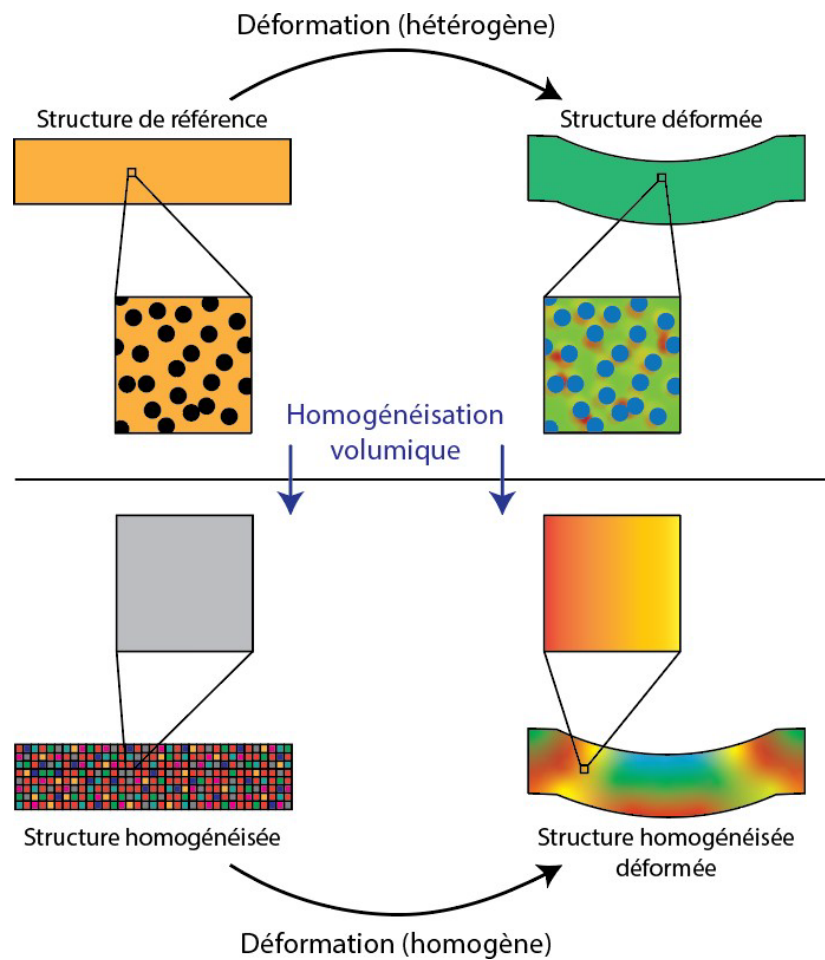


Figure 2-4 : Illustration du processus d'homogénéisation volumique pour la simulation d'une structure présentant une hétérogénéité de sa micro-structure soumise à une déformation. Les couleurs sur la gauche correspondent aux phases tandis qu'elles correspondent au tenseur défini arbitrairement local de contrainte sur la droite

Cette technique a suscité beaucoup d'intérêt ces dernières années en raison de sa capacité à prédire numériquement les propriétés effectives des matériaux composites et à surmonter les limites inhérentes des méthodes analytiques et de l'homogénéisation par champ moyen. La puissance de calcul croissante disponible permet d'envisager le calcul sur des VER toujours plus détaillés. La mise en œuvre numérique de celles-ci permet de ainsi de caractériser le comportement macroscopique dans une analyse multi-échelles pour l'homogénéisation par champ complet. Les équations relatives aux différentes techniques présentées ne seront pas détaillées ici et le lecteur est invité à se rapporter aux références fournies pour de plus amples informations à ce sujet.

La Figure 2-4 illustre le procédé d'homogénéisation à deux échelles d'une structure de référence soumise à un chargement. La simulation du modèle complet de la structure de référence requiert généralement un coût de calculs très important. Celle-ci est donc décomposé à une échelle inférieure pour procéder à l'homogénéisation locales des propriétés élastiques. Par l'attribution des propriétés calculées au zones respective de la structure homogénéisée, on peut ensuite procéder au cas de chargement identique à celui réalisée sur la structure réelle.

2.3.3 Méthode par transformée de Fourier

Moulinec et Suquet [63] ont introduit une technique basée sur l'équation de Lippmann-Schwinger [47] pour traiter les problèmes mécaniques sur des volumes élémentaires hétérogènes exposés à des conditions limites périodiques. Cette technique s'avère nettement plus efficace que les algorithmes généraux d'éléments finis lorsqu'elle est appliquée dans la même situation. De plus, son utilisation permet d'éviter l'étape précédente de maillage, qui peut parfois être délicate et dont les effets sur la simulation peuvent être significatifs (forte sensibilité au maillage, problèmes de convergence avec des éléments déformés, etc.) En effet, les techniques par transformée de Fourier utilisent une représentation géométrique à l'aide de voxels. Il est cependant difficile d'employer ces méthodes dans le cadre de l'analyse de structure à fort gradient de propriété notamment en présence de phase infiniment rigides ou de vide.

2.3.4 Méthode de perturbation

La technique de perturbation permet de réduire le calcul du module tangent macroscopique à plusieurs calculs de contrainte macroscopique [23, 34]. Pour obtenir l'approximation de la $i^{\text{ème}}$ colonne du module tangent macroscopique, une petite perturbation du $i^{\text{ème}}$ composant du gradient

de déformation macroscopique est nécessaire (pour la déformation finie 3D, où i varie entre 1 et 9). La $i^{\text{ème}}$ colonne du module tangent macroscopique est égale à la contrainte macroscopique du VER perturbé par la quantité de perturbation correspondante au gradient de déformation macroscopique appliqué. Cette méthode, largement adoptée pour évaluer numériquement le module tangent pour plusieurs modèles phénoménologiques [35], a été couplée avec le schéma d'homogénéisation périodique dans certaines recherches [23, 34]. Cette technique a le mérite d'être conceptuellement facile à comprendre, mais elle peut nécessiter un coût de calcul important. En effet la simulation par éléments finis doit être effectuée au moins six fois en considérant une symétrie du module tangent.

2.3.5 Autres méthodes en champ complet

La technique de condensation permet d'obtenir le module tangent macroscopique par une procédure de condensation de la matrice de rigidité globale. Cette méthode a d'abord été introduite pour une formulation en petites déformations [17], puis étendue au cadre des déformations finies [64]. La technique de fluctuation propose une décomposition du gradient de déformation de chaque nœud en deux parties : une partie homogène associée au chargement macroscopique et une partie non homogène résultant de la contribution de la fluctuation périodique. Les procédures numériques de cette méthode à déformation finie ont été présentées dans [65]. Les méthodes de condensation et de fluctuation ne permettent pas le calcul direct du tenseur de rigidité, recherché pour définir les propriétés effectives de la microstructure étudiée. Leur implémentation avec l'analyse par éléments finis est donc plus difficile à réaliser.

2.4 Conclusion et problématique

Les renforts tressés pultrudés présentent une microstructure qui ne respecte pas les conditions de périodicité dont dépend l'efficacité des méthodes d'homogénéisation en champ complet. L'emploi de la méthode des éléments imbriqués permet une modélisation précise de la microstructure pour la constitution d'un VER en évitant la création de maillage non conforme aux interfaces. Les conditions aux limites périodiques se sont avérées efficaces pour les microstructures périodiques, de telle manière que les résultats convergent rapidement lorsque le domaine du VER est augmenté. Une manière possible pour contourner le problème posé par la non-périodicité de la microstructure et du maillage est appelée Enrichissement d'Enveloppe (EE). Un matériau fictif est créé autour du VER d'origine pour créer un maillage supportant les conditions périodiques.

Cependant il n'existe pas actuellement, à la connaissance de l'auteur, de validation rigoureuse de cette méthode et d'une analyse approfondie des paramètres de l'enveloppe mentionnée. L'association de cette approche avec la technique des éléments imbriqués, pour la détermination des propriétés effectives globales d'une structure de renforts composites tressés et pultrudés n'est également pas investigué à ce jour.

Ce mémoire vise à fournir une analyse détaillée de la stratégie EE pour valider son utilisation dans le cadre de l'homogénéisation par perturbation de renfort tressés pultrudés avec l'emploi d'éléments imbriqués dans un VER enveloppé. Dans le chapitre 3, un article soumis, réalise une étude détaillée de l'épaisseur, de la densité du maillage et des propriétés initiales de l'enveloppe. Plus spécifiquement, le taux de convergence des termes du tenseur de rigidité sont analysés pour un cas périodique d'un arrangement hexagonal de fibres imbriquées dans une matrice polymérique. Ce cas d'étude permet de s'assurer de la propriété de convergence de la méthode Le tenseur de rigidité est également comparé à des méthodes en champ moyen issues de la littérature. Cela permet de répondre aux trois premiers objectifs que sont la création d'un VER enveloppé, l'implémentation d'une méthode d'homogénéisation ainsi que sa validation dans le cadre d'analyse par éléments finis pour un milieu non périodique. Enfin, dans le chapitre 4, une mise en pratique de la méthode développée est effectuée à l'aide d'une simulation numérique afin de répondre au dernier objectif. Le positionnement de fibres tressées à l'issue de la simulation d'un procédé de pultrusion est utilisé pour réaliser une homogénéisation à deux échelles d'un tube creux en composite. Celui-ci est composé d'une matrice thermoplastique et de renforts en fibres de verre continues assemblées selon une tresse triaxiale. Le modèle macroscopique est subdivisé en sections régulières dont les propriétés sont obtenues avec la méthode d'EE.

CHAPITRE 3 ARTICLE 1: ENVELOPE ENRICHMENT METHOD FOR HOMOGENEIZATION OF NON-PERIODIC STRUCTURES

Auteurs : F. Vazeille, L. Laberge Lebel

Revue : Composites Structures, soumis le 19 Mai 2023

3.1 Abstract

The homogenization of composite materials is critical for accurately predicting their mechanical performance, particularly when complex reinforcement arrangements are involved. Microstructural characteristics exert a substantial influence on the composite's properties during practical applications. A widely adopted approach for analyzing composites is the numerical simulation of a Representative Volume Element (RVE). Although this method is well-established for periodic RVEs, it encounters difficulties when applied to non-periodic meshes, which complicates the imposition of classical boundary conditions on nodes exhibiting varying properties. To address this challenge, we propose a novel methodology that involves modeling an envelope surrounding the RVE, to which periodic boundary conditions are applied. By defining the envelope as a homogeneous material, stress transmission to the RVE is facilitated. The stiffness tensor of the envelope is updated iteratively through a homogenization process, ultimately converging to the effective properties of the RVE. The method is validated on a non-periodic arrangement of spherical inclusions embedded within a matrix. Convergence is observed in the different cases studied within ten iterations and the results are found within the Voigt and Reuss bound.

3.2 Introduction

As composite materials continue to evolve and improve[66,67], there is a growing need for robust methods to predict their effective macroscopic properties. These properties depend on the constituent materials and their geometrical arrangement. Moreover, small variations of the geometrical arrangement of the composite's reinforcement can have significant impacts on the effective properties. Homogenization is needed to characterize the macroscopic behavior of heterogeneous material by identifying and testing a statistically representative micromechanical sample. The inherently multi-scale problem posed by composite structure leads to the distinction of three scales.

The micro-scale usually refers to the individual fiber placement, the mesoscale to the yarn and the macro-scale to the entire part. Different types of multi-scale homogenization frameworks exist and are employed for various applications with mean-field and full-field being the most common. Mean-field homogenization aims at modeling the heterogeneity of the material using fundamental mathematical relations and geometric assumptions [39,68–70]. Full-field homogenization on the other hand relies on a precise definition of the microstructure geometry and properties. The averaging of the properties of the constituent materials is done over a Representative Volume Element (RVE). The RVE must contain enough information to describe the macroscopic structure [71]. The implementation of full-field homogenization with the Finite Element (FE) analysis technique allows the characterization of macroscopic behavior in a multi-scale analysis. This technique has gained significant attention in recent years due to its ability to numerically predict the effective properties of composite materials and overcome the inherent limits found with analytical methods and mean-field homogenization.

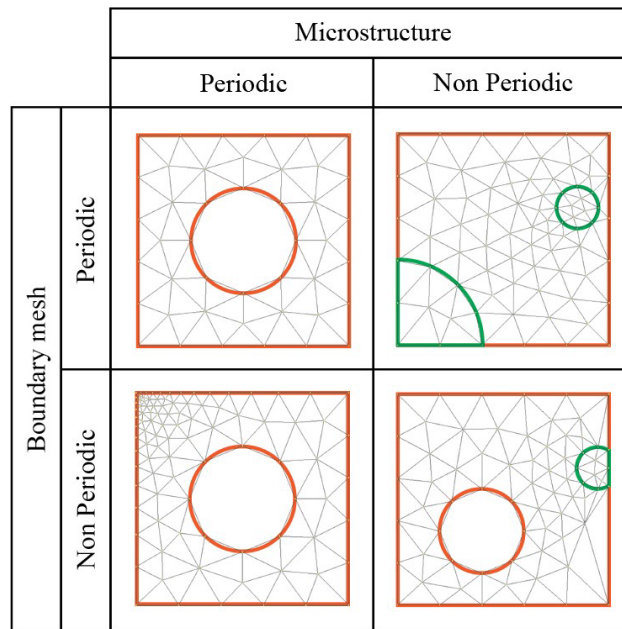


Figure 3-1: Four 2D rectangular RVE with different periodicity conditions of their mesh or microstructure at their boundaries

A growing number of mathematical approaches have been developed to propose a theoretical framework in light of the RVE constitutive modeling. Asymptotic Homogenization (AH) and Fast Fourier Transform (FFT) [47,72–74] are among the most common approaches

employed. For AH, periodicity of both structure and meshes can be required, which limits the application of such methods on highly randomized micro-structures. Concerning FFT, the presence of voids or infinitely rigid constituents, leading to the high contrast between phases, can be problematic in the convergence towards the homogenized properties [75].

The validation of such methods is confronted with the capability of testing real samples while obtaining a true description of them [76–78]. The proper implementation of the aforementioned methods is therefore dependent on the enforcement of boundary conditions. As the meshing process is a non-trivial task, and its effectiveness is closely tied to the employed modeling technique, four work-case scenarios can be differentiated such as illustrated in Figure 3-1. The microstructure and the mesh can both present a non-periodicity. If the mesh only is not periodic, the problem can be treated thanks to the radial point interpolation method with good results [49]. Considering stochastic random structures like inclusions, one can arrange the periodic modeling of the inclusions into the RVE [28,79] and the meshing at the boundary too. Another way to circumvent the non-periodicity of the inclusion's meshing is to employ the embedding technique. This method has been successfully employed while imposing boundary conditions [80] and for homogenization [81]. The separate modeling of the embedded and master parts can be done without the need for mesh conformity at the interfaces between parts. However, the non-periodicity of element properties, particularly when embedded close to the boundary may still generate discrepancies in the displacement and stress field on opposite faces of the RVE.

Numerous studies [43–45,82] have tried different strategies to enforce weaker boundary conditions such as Kinematic Uniform Boundary Conditions (KUBC) and Stress Uniform Boundary Conditions (SUBC). They can be applied to non-periodic structures but show a slower rate of convergence depending on the size of the RVE [83] and ultimately give an upper and lower bound, respectively, of the effective properties [84,85]. The combination of both KUBC and SUBC on arbitrary materials, referred to as generalized conditions, can be associated with Lagrange multipliers to enforce the average values of the macroscopic quantities [46]. The enforcement of weak micro-periodicity of the displacement fluctuation field and the macro-scale stress as a novel variational formulation of the RVE problem was also investigated [86]. The interpolation method originally proposed by [87] and later refined by [88] allows the creation of periodic constraints. This strategy is based on substituting DOFs by the coefficients of shape functions, from Lagrangian

and cubic spline interpolation describing the boundary deformation. However, selecting the right polynomial order is not trivial especially when the RVE size is increased.

PBCs have been proven efficient, for periodic microstructure with results converging rapidly when the RVE domain is increased. As of today, there appears to be no unique solution [89], and each method delivers a result helping to reduce the spectrum of the effective properties originally defined by the KUBC and SUBC solutions in the FE framework. The lack of open-source solutions to conduct FE analysis on non-periodic structures has led the way to creating alternatives for imposing classic PBCs.

A strategy to circumvent the non-periodicity of both structure and mesh consists in creating a dummy material around the original RVE. The envelope creates a support domain suitable for the application of PBCs. Through an iterative process, the homogenized properties of the enveloped RVE are assigned to the envelope until convergence of its properties is observed. One study successfully employed this technique on random discontinuous carbon fiber composites [50]. A similar approach was used to calculate the diagonal terms of the stiffness tensor of a porous silicon carbide (SiC) foam model with an effective density of 18% [38]. However, to the author's knowledge, there is currently no rigorous validation of this method and no in-depth analysis of the parameters of the envelope mentioned. This paper aims to give a detailed analysis of the EE strategy to validate its use. A study of the envelope thickness, mesh density and initial material properties is provided on a periodic configuration. Then the method is applied to random biphasic microstructures with embedded elements to validate this new method on a non-periodic model.

3.3 Periodic homogenization problem

Both the modeling and homogenization process must be considered as a multi-scale problem as the microscopic deformation and stress are linked to their macroscopic counterpart. Hence, the micro-scale and macro-scale are mutually dependant and only those two will be differentiated in this study. For a periodic material, the RVE can be reduced to contain enough information to describe the whole model thanks to translation and/or symmetry. The primary objective of this methodology is to facilitate the computational analysis of any micro-structural model in an efficient and straightforward manner. Input models may be generated through numerical simulations or by digitizing real-world samples. However, the periodicity of meshes produced via these techniques

is not inherently guaranteed. To address this issue, the Enveloped RVE is introduced as a means of mitigating the challenge posed by non-periodic meshes in complex materials. Consequently, an RVE with embedded reinforcement is encapsulated within an envelope to ensure the periodicity of the mesh on the outside boundary. Considering a perfect interface at the boundary of the embedded elements, a full-field homogenization, known as the perturbation technique, is employed to compute the effective properties of the microstructure.

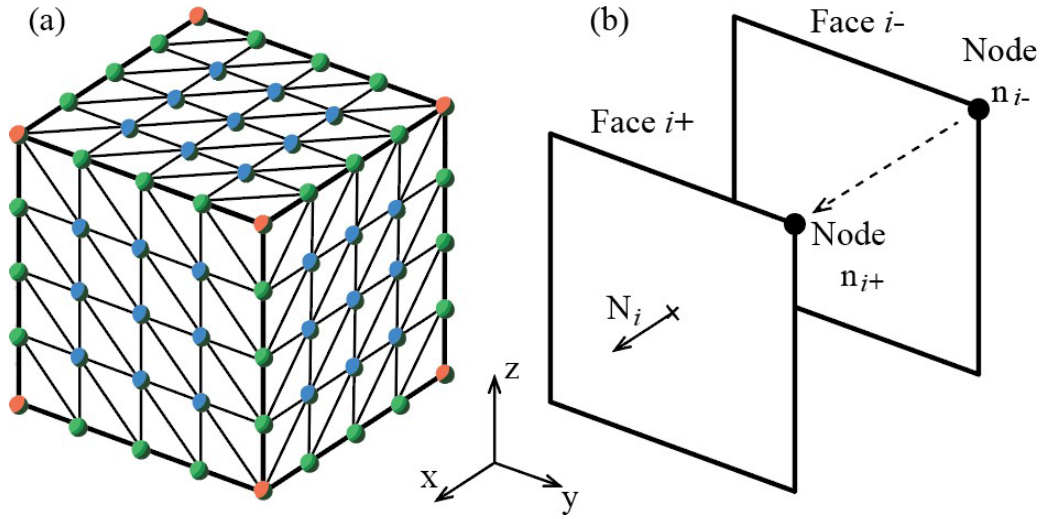


Figure 3-2 : Illustration of (a) Support domain with periodic mesh on the boundary. (b) Node projection on parallel faces

3.3.1 Support domain creation

In this paper, rectangular cuboids as the one illustrated in Figure 3-2, act as the support domain for the PBC constraints (i.e., RVE when periodic or the envelope in the present work). Considering face $i+$ the nodes n_{i+} belonging to it are translated to the opposite face along the global coordinate axes onto face $i-$. When this is done without considering the local properties of the node's element it can result in inconsistent resulting simulations. Each face is associated with an outward unit normal vector N_i . The regular meshing of the outside boundary facilitates the application of appropriate PBC. Nodes positioned at the vertices are projected onto three additional locations, nodes positioned on the edges are mapped onto two distinct edges, and nodes situated

on the face are projected onto the corresponding opposing face. This task can be done easily with meshing software by constraining the node locations on opposite faces. Because the size of the RVE is linked to the convergence rate of the effective properties determined by the homogenization process, a compromise between the cost of computation and model precision is desired. However, when addressing non-periodic structures, this task becomes more challenging. When the RVE is not dictated by inherent structural symmetry, the selection of RVE size for non-periodic structures is at the discretion of the user, which could lead to additional complexities and uncertainties in the modeling process.

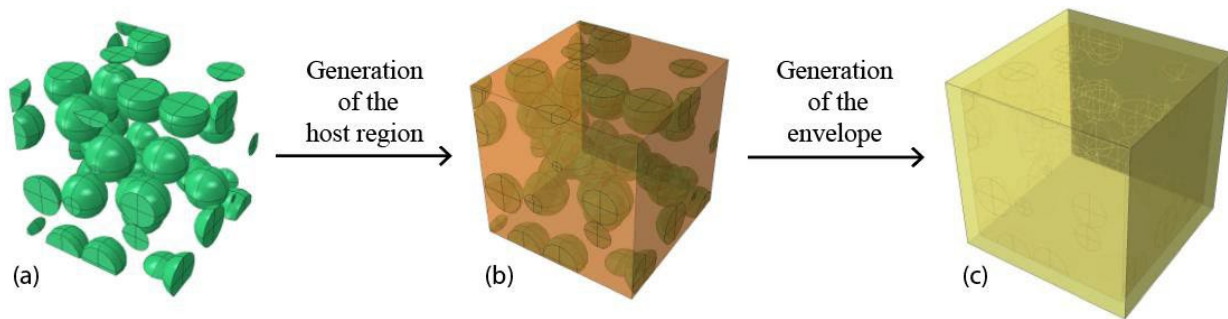


Figure 3-3 : Illustration of (a) Input model of the inclusions. (b) Creation of the RVE. (c) Creation of the envelope volume around the RVE

Figure 3-3 shows the process to generate an enveloped RVE. The host region is modeled to encapsulate the input model. An envelope, tied to the host region, is modeled around it with a given thickness. Support domains, modeled as three-dimensional cuboids, share similar characteristics such as parallel edges to the global coordinate axes, and faces are parallel on opposite sides. The meshing of the elements belonging to the support domain must be done in such a way that the periodicity of the discretization is imposed on the boundary.

3.3.2 Full-field homogenization

Complex structures, such as composite materials, require a homogenization procedure. In the following section, only linear problems will be considered, which is true for RVE simulation within the elastic domain of its components. The strategy employed consists of formulating the localization problems associated with PBCs by introducing additional reference points supporting

the components of the macroscopic deformations. The specific boundary conditions are imposed via linear relations between the degrees of freedom of the contour nodes and these additional DOFs.

For any given problem, the equilibrium state is expressed as:

$$\text{div}_{\mathcal{R}_0}(\dot{\mathbf{p}}) + \dot{\mathbf{b}}_0 = 0 \quad 3.1$$

where $\dot{\mathbf{p}}$ is the rate of the first Piola-Kirchhoff stress and $\dot{\mathbf{b}}_0$ is the body force rate per unit volume for a given reference configuration $\mathcal{R}_0$.

Given the presence of heterogeneities in a finitely deformable heterogeneous macro-structure $\mathcal{M}$ the solution of the Boundary Value Problem (BVP) is highly oscillatory. Solving such problems appears very challenging in its original form detailed in [90] and requires replacing $\mathcal{M}$ with a corresponding homogeneous replica $\mathcal{M}^*$. When dealing with RVEs, the work criterion originally expressed by [39] leads to the definition of the macroscopic volume average of the deformation gradient F and the 1st Piola-Kirchhoff stress tensor P . In the absence of body forces, they are expressed as the volume average over the corresponding fields of their microscopic counterpart over the total volume V_0 of the RVE:

$$F = \langle f \rangle = \frac{1}{|V_0|} * \int_{V_0} f \, dV \quad 3.2$$

$$P = \langle p \rangle = \frac{1}{|V_0|} * \int_{V_0} p \, dV \quad 3.3$$

For better clarity, the macroscopic (resp. microscopic) quantities are expressed with UPPERCASE (resp. lowercase) letter and symbols.

The work criterion is satisfied when boundary conditions are applied such as:

- Linear deformation: $x = \mathcal{F}X$ where $\mathcal{F} = \mathbf{F}$ and denotes the controlled deformation.
- Uniform traction: $\mathbf{p} = \mathcal{P}N$
- Periodic condition: $x - x_0 = \mathcal{F}(X - X_0)$

where x and X denote the position vectors for the current and reference macroscopic configurations. The application of linear deformation or uniform traction is possible for non-periodic structures and allows the determination of the upper and lower bounds of the effective properties.

To do so in the FEM framework, reference points are used to support the displacement representing the Cartesian components of the macroscopic displacement gradient U such that on the microscopic scale:

$$u_j^{n_i^+} - u_j^{n_i^-} \lambda_j \nabla U_{ji} \quad i, j \in \{1, 2, 3\} \quad 3.4$$

with λ_j the dimensions of the cuboid.

Those conditions are introduced onto three reference points supporting the macroscopic displacement gradient. This is done by imposing a displacement on those reference points $R_{p \in \{1, 2, 3\}}$ which gives:

$$v_p = \nabla U_{jp} \quad 3.5$$

The anti-symmetry of the boundary tractions is automatically satisfied such that the nodal forces on oppositely located nodes (6) are of equal magnitude and opposite sign when these homogeneous constraints are enforced through Lagrange multipliers, which correspond, aside from sign to the nodal forces of the boundary nodes. The weak form of the boundary value problem on the equivalent homogeneous microstructure $\mathcal{M}^*$ can be expressed in the form:

$$\int_{V_0} \mathbf{P} \cdot \delta \mathbf{F} dV = \sum_{k,p=1}^3 R_p \delta v_k \quad 3.6$$

which leads to the conclusion that the reaction forces R_j measured on the reference points correspond to the macroscopic Piola-Kirchhoff stresses over the volume V_0 .

Because the F and P are linked to the macroscopic tangent modulus $\mathbf{C}_{ijkl}$ through the relation:

$$\Delta \mathbf{P} = \mathbf{C}_{ijkl} : \Delta \mathbf{F} \quad 3.7$$

where Δ is a very small deformation of the deformation gradient. Here lies the perturbation technique where the determination of each column of $\mathbf{C}_{ijkl}$ is computed through monotonic loading cases in the FEM framework.

3.4 Implementation workflow

Figure 3-4 illustrate the EE method with detailed steps. The implementation of these steps with FE analysis is detailed in the following section. This procedure is done in accordance with the background of periodic homogenization detailed previously.

3.4.1 Model creation

All the meshing work is done with the Python solver from GMSH [91], an open-source three-dimensional finite element grid generator. The actual method developed can deal with any existing microstructure mesh file in the input format used by Abaqus. The node location of the microstructure is extracted to build the RVE suited to the mesh of the reinforcement.

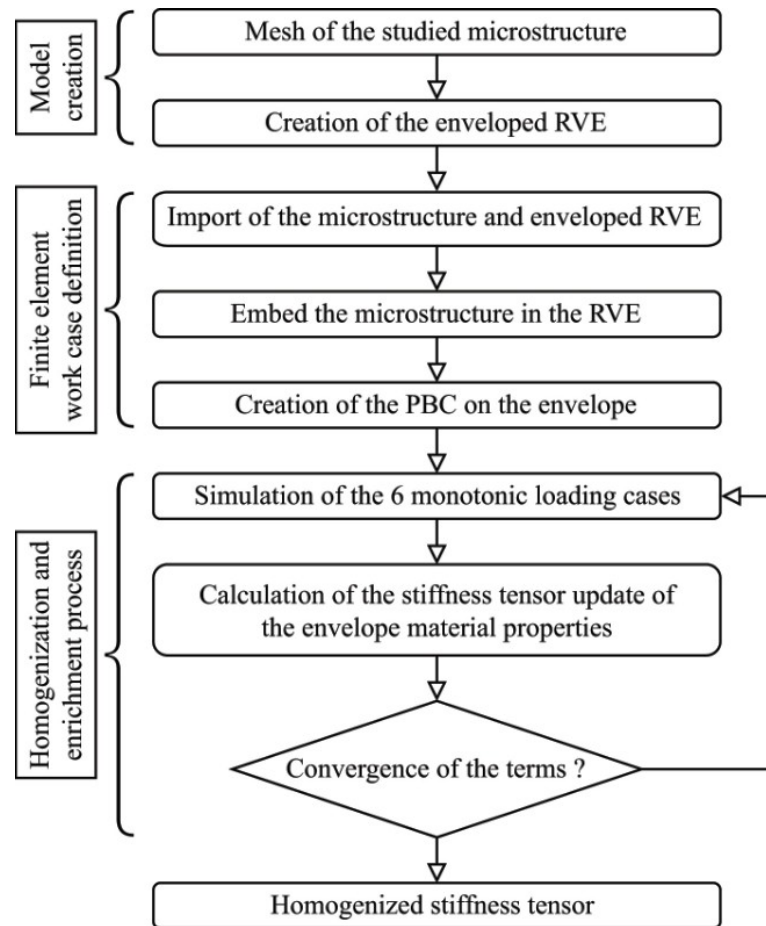


Figure 3-4 : Description of the procedure for the EE method

Then an envelope is generated with a given thickness and mesh density. The periodicity of the mesh is imposed on the outside boundary of the envelope with an affine transformation matrix.

This, coupled with a transfinite constraint to explicitly specify the location of the nodes on each edge ensures the presence of a pair of nodes facing each other on every parallel face of the envelope.

This method allows the continuity of the mesh between the RVE and the envelope in such a way that each node on the contact surfaces is shared between both entities. The change of mesh density is therefore not problematic as there is no discontinuity generated, while still maintaining the necessary periodic constraints.

3.4.2 Finite Element work case definition

The Abaqus/CAE framework is used to complete the homogenization steps. Both RVE and envelope are imported as a model with node sets of each face predefined. The scripts from Homtools [92] make it possible to automatically identify these node pairs on opposite faces but doing it beforehand reduces the computation time. After that, the mesh of the studied material is imported as a single part. This and the following steps are done with a Python script, adapted to the Abaqus environment, which is able to automate the whole process for a given repository architecture. The definition of the materials and the local orientations are done to assign the correct properties to each constituent.

The meshed file of the reinforcement model is embedded into the enveloped RVE with its own material properties. However, at any shared location of the integration point, the host elements material is not replaced by the one defined for the embedded elements. Thus, it is needed to calculate the compensated stiffness tensor for the latter, by subtracting the host stiffness tensor from the embedded one as described in [37]. Those properties are then applied to the embedded elements, strictly contained inside the RVE.

3.4.3 Homogenization and enrichment process

To conduct the homogenization, the Homtools plugin implemented in the Abaqus/CAE framework is employed. As described previously, the full-field approach with PBC constraints provided by Homtools is used. The original source code is modified to be integrated into the actual workflow for a streamlined process. Thanks to Homtools, equation 3.4 is applied by creating a set of Multi-Point Constraints (MPC) in Abaqus linking each node pair (n_i^-, n_i^+) . The controlled deformation is imposed by associating those pairs of nodes to three reference points. Boundary conditions are used to impose a mean strain on those points which are transmitted to the node pairs.

The nodal forces associated with the DOFs supporting the components of the mean strains are equal to the components of the mean stress in the total volume.

For each step of the enrichment process, six monotonic loading cases are computed into different jobs. This step can be done in parallel for more efficiency. At the end of each step, the reaction forces are evaluated on three reference points created and the stiffness tensor $\mathbf{C}_{ijkl}$ is calculated. Assuming the material is following an anisotropic behavior, the equation 3.7, using the Voigt notation can be reduced to:

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta P_1 \\ \Delta P_2 \\ \Delta P_3 \\ \Delta P_4 \\ \Delta P_5 \\ \Delta P_6 \end{bmatrix} \quad 3.8$$

which describes the calculation of the first column. The other columns can be calculated in an analogous way.

In the next step, the anisotropic envelope material is updated with the newly obtained values. This process is repeated until a convergence of the material properties is observed.

3.5 Validation

The rate of convergence, and thus the computational efficiency of the method, might be affected by different parameters. The influence of three variables, envelope thickness, Mesh density and initial material properties of the envelope are evaluated on the convergence rate of the homogenized properties. Hence, a hexagonally packed composite with unidirectional fibers is considered, similar to another study [93]. The periodic microstructure, illustrated in Figure 3-5 is a cuboid with a side length $a = 1$. The fiber radius r_f is chosen to meet a Volume Fraction (VF) of 60%. Section examines the influence of envelope thickness. Section 3.5.2 takes a look at the mesh density of the envelope. For both analyses, the initial properties assigned to the envelope are different from the ones determined in the experimental testing from [92]. This is done to verify the influence of initial properties on the convergence rate of the homogenized properties. The result of this verification is detailed in section 3.5.3.

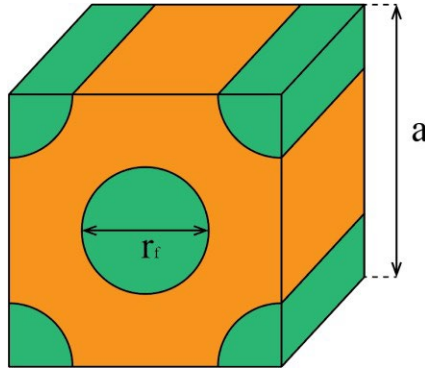


Figure 3-5 : Perfect hexagonal unit cell

3.5.1 Envelope thickness

The evaluation of the impact of the envelope thickness is done in this section. The mesh density is set to 0.1 accordingly to a convergence study not detailed in this paper, on the same periodic model without an envelope. The mesh density of the envelope is therefore matching the one found to give satisfying results on the periodic RVE. The convergence rate can be observed in Figure 3-6 for four different models, generated with an augmenting envelope thickness. The envelope is initially assigned with the same properties as the matrix, assumed isotropic. Only C_{11} is shown as all the terms demonstrate the same convergence behavior.

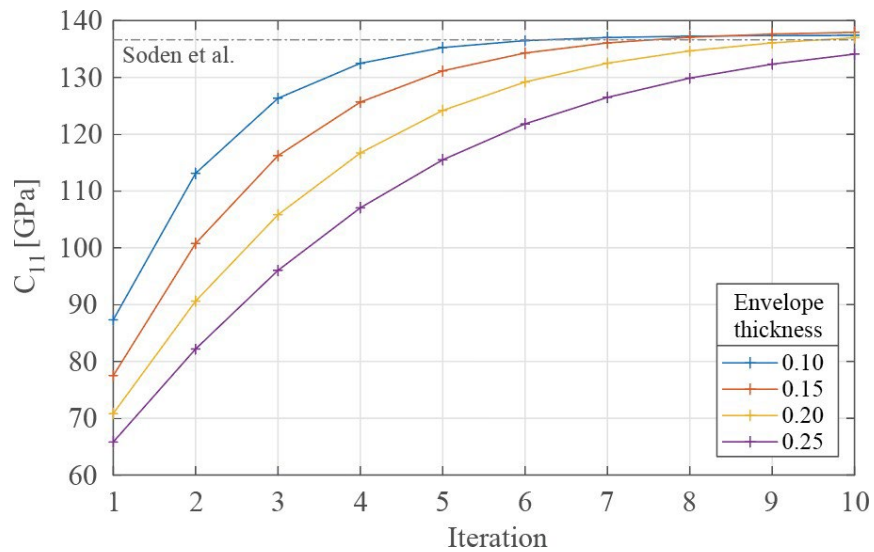


Figure 3-6 : Convergence of C_{11} for 10 iterations with the EE method with envelope thickness of 0.1, 0.15, 0.20, 0.25

The graph shows a negative influence of the envelope thickness on the convergence rate toward the converged value. Hence, the bigger the envelope, the greater the number of iterations needed. This result was anticipated as the averaging process takes into account the whole model. If the envelope is bigger then the contribution of the stresses from the RVE and the embedded model is lesser because the results are volume dependent.

3.5.2 Mesh density

This section takes a look at the convergence rate of the homogenized properties depending on the mesh density of the envelope. Different models have been generated with varying mesh densities in the envelope. This parameter is modified by adjusting the transfinite parameter which imposes a given number of equally spaced nodes on the outside edges. This is enough to impose periodic meshing on outside faces when dealing with rectangular cuboids. At the same time, the mesh density is modified, ensuring the generation of a homogeneous mesh. The thickness of the envelope is set to 0.1 according to the result from the previous section where the envelope thickness is examined. It should be noted that for a given model, a denser mesh will inevitably lead to an increase in computational cost. The parameters were chosen to prevent the creation of degenerated elements. These are typically observed when the aspect ratio of the elements in the mesh is compromised, with an excessively fine mesh or an envelope thickness being too small or too large.

Figure 3-7 illustrates the convergence of the stiffness tensor diagonal terms. Two terms C_{22} and C_{55} are exempt from the results because of the inherited symmetries of the microstructure resulting in the following equalities $C_{22} = C_{33}$ and $C_{55} = C_{66}$. The results show more discrepancy compared to the envelope thickness study. A finer mesh does not provide better results. A great consistency of convergence is still observed for C_{11} and C_{33} . However, for C_{44} and C_{66} , irregularities are observed. The settings applied with 14 nodes on the edges seem to be the more appropriate in this work case.

Further study should examine the interaction between envelope thickness and mesh density with different microstructures. The efficiency of the EE method depends on its ability to capture the fine-scale heterogeneities of the material, especially at the interface between the RVE and the envelope where heterogeneities are to be found. Therefore, understanding the interaction

between envelope thickness and mesh density on a given microstructure could help to optimize the EE method and increase its validated range of applicability.

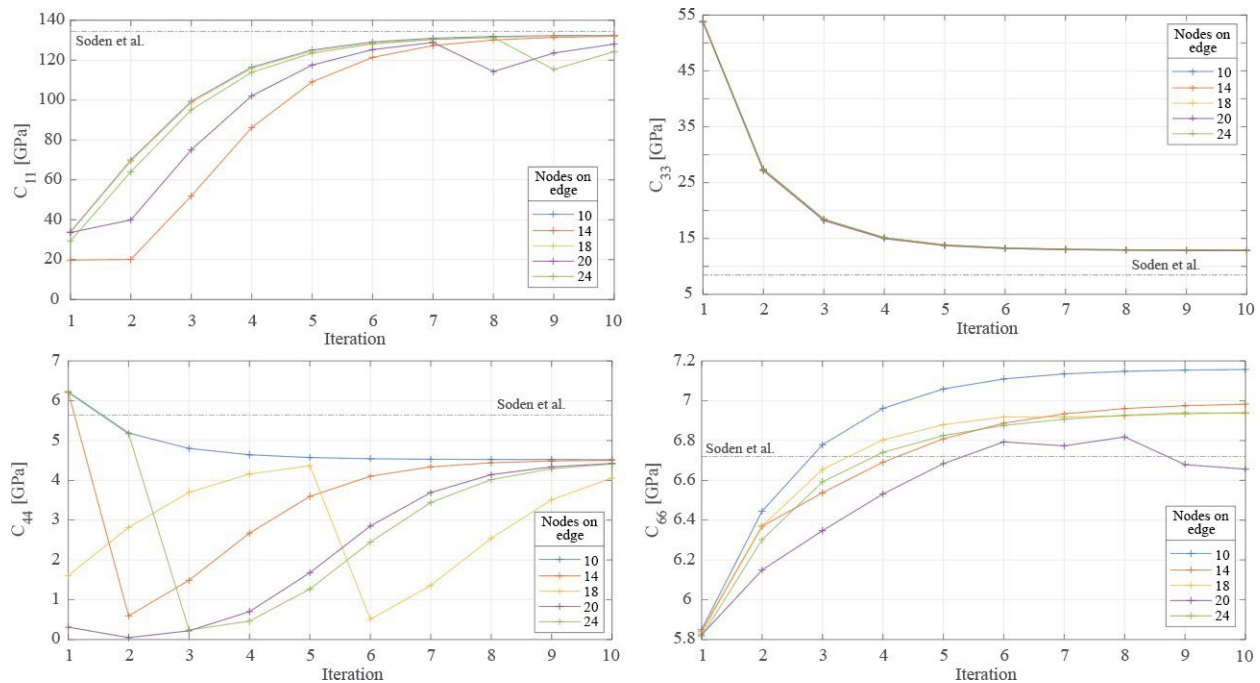


Figure 3-7 : Convergence of C_{ii} with $i=\{1,3,4,6\}$ for 10 iterations with the EE method with an envelope thickness of 0.1, 0.15, 0.20 and 0.25

3.5.3 Initial envelope properties

During the study of envelope thickness in section 3.5.1, the initial envelope properties matched the one of the matrix. This doesn't seem problematic, and terms of the stiffness tensor were increasing with each iteration. This is because the embedded fibers were more rigid than the matrix. One conclusion that can be drawn out from this first observation is that a greater difference between the envelope properties and the one of the homogeneous RVE will inevitably lead to more iteration before the convergence is observed. This is because of the intrinsic property of this method which has no prior knowledge of the given microstructure.

In section 3.5.2, the initial material property assigned to the envelope is the one determined in the thickness evaluation with a different orientation. Axis 1 and 3 are shifted in this configuration. This was done in order to know if the introduction of anisotropic properties in the envelope can influence the convergence of the homogenized stiffness tensor. From the associated results, it

seems that the introduction of anisotropic properties into the envelope is not detrimental to the convergence of the homogenized properties. This is reassuring and indicates that the EE method is not susceptible to instability in this particular work case when a single term of the stiffness tensor is diverging.

3.6 Application to non-periodic material

3.6.1 Spherical inclusions modeling

The spherical inclusions models have been generated with Mote3D [94], a toolbox creating randomly positioned spherical particles. Those inclusions are within a periodical cubical computational domain. This is done through an iterative process that inherently limits the total VF obtainable compared to other methods such as the molecular dynamics approach. The particle radius is set as a constant and equal to $r = 10 \mu m$. No interpenetration is permitted between each particle. The RVE width is $W_P = 50 \mu m$. The number of inclusions is modified to adjust the VF parameter in the range [8%;35%]. To evaluate the developed method on non-periodic medium, the cubical domain is cropped such as illustrated in Figure 3-8 to a smaller width $W_{np} = 38 \mu m < W_P - r/2$ such that the periodicity constraint is annihilated.

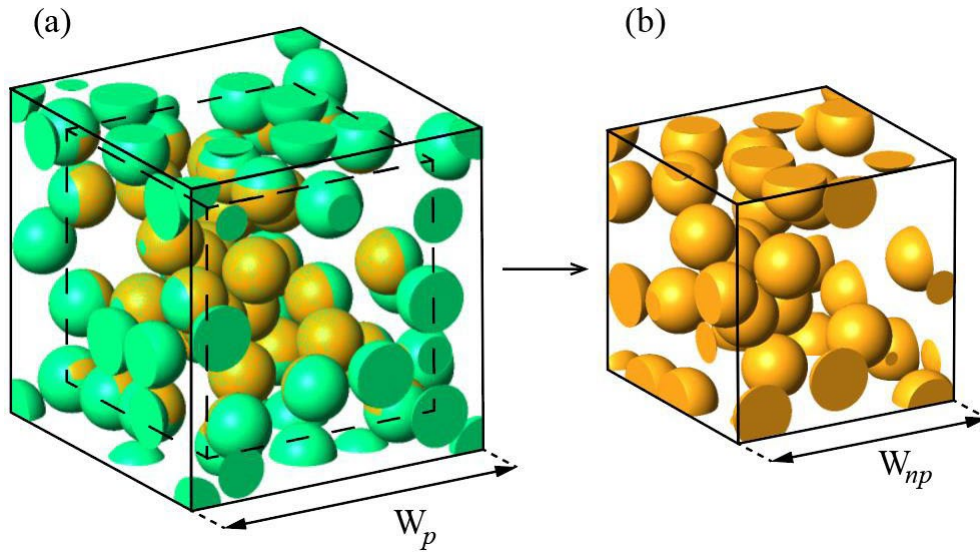


Figure 3-8 : Illustration of 3D models of (a) periodic RVE and (b) cropped non-periodic RVE of randomly generated spheres

The effective properties of the periodic models are computed directly with the Homtools plugin whereas the EE method is used for the non-periodic counterpart. To present a coherent comparison between each periodic and non-periodic microstructure, a VF of at least 18% is chosen. This is done to ensure the absence of particle clustering in the RVE that would result in a non-isotropic behavior. Furthermore, a lower VF results in a model which is not representative of the macroscopic material especially once cropped.

3.6.2 Results and discussion

Figure 3-9 shows the evolution of three terms of the homogenized stiffness tensor depending on the VF for the different models available. Assuming the isotropic behavior of the studied composite, an emphasis was done on C_{11} , C_{12} , C_{44} terms. In the present study, the simulation of the most detailed model contained 330704 C3D4 elements for the inclusion mesh and 38888 C3D10 elements for the enveloped RVE. It took approximately four hours and seven iterations to reach a 10^{-5} mean relative difference between each term of the stiffness tensor between two iterations. The setup used an Intel(R) Core(TM) i7-8700K CPU at 3.70GHz and 24,0Go of RAM. No particular paralleling or GPU acceleration strategy was used to run the simulations.

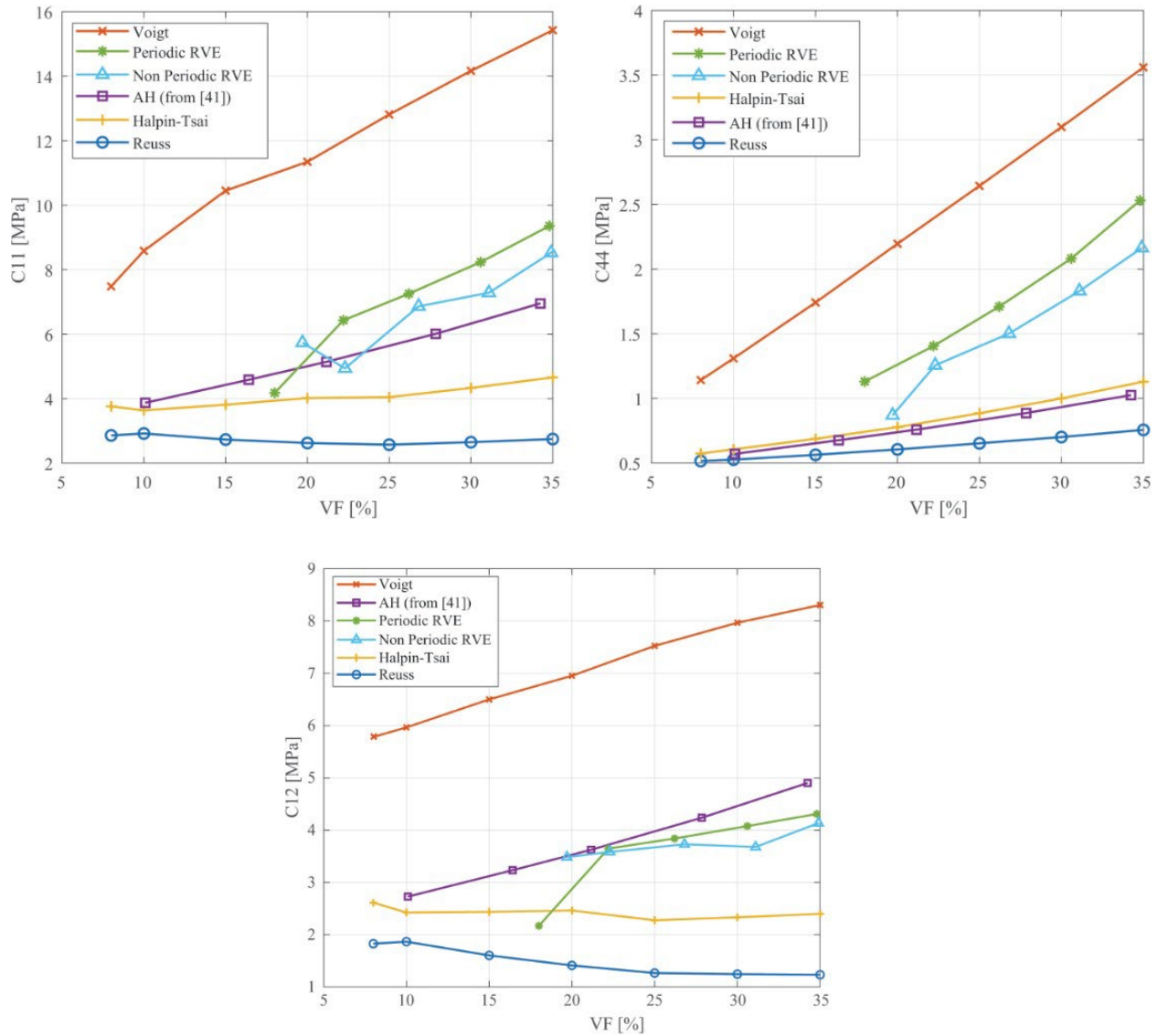


Figure 3-9 : Values of C_{11} , C_{44} and C_{12} according to the volume fraction predicted by different models

The results are compared to another study [95] dealing with the composite material of Ultra-High Molecular Weight Polyethylene (UHMWPE) spherical molecules. Those reinforcements, with a similar radius, are embedded in a $40\mu m \times 40\mu m \times 40\mu m$ Polypropylene (PP) matrix. The meshing method in [94] is different as the spheres are directly modeled with the RVE, creating a conformal mesh. Results for the Voigt, Reuss and Halpin-Tsai analytical models along with the results from asymptotic homogenization of [95] are represented. The results from the EE method

fit properly inside the lower and upper limits defined by the Reuss and Voigt model respectively. The EE results nicely follow the ones obtained from the classic periodic homogenization. For a VF between 25% and 35%, the coefficients from the EE method are systematically lower than the one of the periodic model.

3.7 Conclusion

In this investigation, we assessed the efficacy of the EE method in its application to non-periodic microstructures. A comprehensive analysis of the envelope parameters was performed, focusing specifically on the influence of envelope thickness, mesh density and initial properties on the convergence rate. It was observed that an increase in thickness results in a larger number of iterations required for the stiffness tensor's terms to converge. Concerning the mesh density of the envelope, the findings did not reveal a discernible trend. A finer mesh does not guarantee a faster convergence rate, and it is worth noting that a coarse exterior mesh combined with excessive thickness may produce degenerate elements. Although a thorough examination of this particular case is beyond the purview of this study, future research should consider the examination of such cases along with the impact of the interaction between envelope thickness and mesh density on a range of microstructures. While the initial material definition was not found to significantly impact the convergence properties of the EE method, it did extend the duration of convergence when deviating substantially from the anticipated outcome.

The EE method was subsequently applied to a non-periodic microstructure comprising embedded spherical inclusions. The results demonstrated the convergence of the stiffness tensor, with outcomes aligning with the expected values as compared to other analytical and numerical models. To further establish the versatility of the EE method, additional investigations will be conducted on anisotropic structures such as braided composites made by braid-trusion. During pultrusion, the braids are subjected to local deformations that effectively remove the periodicity of the microstructure. The EE method will be used to determine local properties at several locations to determine the total structure property range.

3.8 Acknowledgements

This work was supported by The Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada [NSERC, RDCPJ 543847-19]; PRIMA Quebec [R18-13-003]; FilSpec Inc; Pultrusion Techniques; and Bauer Hockey ltd.

3.9 Data Availability

The raw/processed data required to reproduce these findings is available at the address:
<https://data.mendeley.com/datasets/8ftshvhht6/1>

CHAPITRE 4 APPLICATION DE LA METHODE POUR UN CAS DE TRESSE TRIAXIALE

L'objectif de cette partie est de décrire la méthode développée pour la création du maillage de la microstructure et des VER enveloppés associés sur un cas de renfort tressé. Le tressage-pultrusion est un procédé spécifique de fabrication de composites, combinant les techniques de tressage et de pultrusion. Au cours du processus de pultrusion, les tresses sont soumises à des déformations locales qui éliminent toute périodicité du milieu à cause des différentes forces de friction et de la fusion des fils de polymères [9]. Ceci mène à des approximations plus ou moins importantes quant à la microstructure considérée dans l'emploi des méthodes classiques d'homogénéisation.

Les techniques de simulations numériques permettent ainsi d'introduire les différents effets menant à la modification de la trajectoire des fibres. Le travail effectué sur des tresses biaxiales pultrudées selon un tube rectangulaire aux coins arrondis par Mohammad Ghaedsharaf [9] a été porté sur le cas de tresses triaxiales non publié à ce jour. La modification de l'architecture de la tresse initialement paramétré rend la microstructure non-périodique. La méthode d'enrichissement d'enveloppe est utilisée pour déterminer les propriétés locales à plusieurs endroits afin de caractériser l'ensemble des propriétés de la structure. On cherche de cette façon, à obtenir une définition plus précise des propriétés élastiques effectives par une approche multi-échelle. Il convient de différencier plusieurs termes comme fibre, brin et fil. Une fibre est un élément individuel, de l'ordre du micron. Un brin est constitué d'un regroupement de fibres voisines permettant d'alléger les simulations numériques. Le concept de brin est donc une analogie qui permet de faire le lien entre la fibre et le fil pouvant être constitué de milliers de fibres uniques.

La Figure 4-1 illustre le résultat du positionnement des brins à l'issue du procédé de pultrusion simulé par éléments finis dans les travaux de Mohammad Ghaedsharaf. La configuration du modèle est réalisée de façon à obtenir une section dont la frontière extérieure est un rectangle aux coins arrondis d'une longueur effective de 450mm. On observe des brins axiaux de chaque côté qui ne sont pas considérés par la suite car non représentatifs de la structure utile. La présence de fibres axiales présente un aspect pratique lors de l'étape de fabrication par pultrusion en permettant une meilleure traction des renforts. Le reste du tube est parcouru de fibres tressées dans des sens opposés et selon un angle initial $\theta = \pm 30^\circ$ par rapport à la direction d'extrusion du tube également. Celles-ci sont visibles sur la vue agrandit du profil du tube.

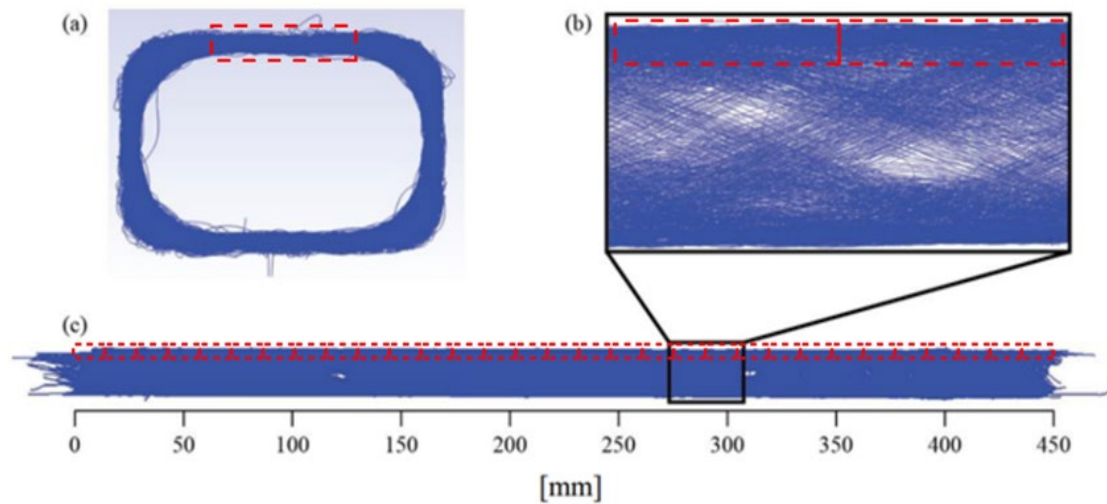


Figure 4-1 : Illustration de la modélisation des fibres extraites à partir d'éléments 1D selon (a) une section du tube et (b) un grossissement de l'arrangement des fibres du tube complet (c) avec l'emplacement des 31 VER en rouge

La position des points supports de chaque brin, modélisé à l'aide d'élément *truss*, est ainsi extraite de la simulation. Le fichier dont on dispose contient un ensemble de 120 coordonnées des points supports associées à chacun des brins. Chaque ligne du fichier définit ainsi le nom du brin, le numéro du point support ainsi que la position initiale et finale de celui-ci. Il existe ainsi 360 brins axiaux, 360 brins tressés dans le sens horaire et 360 dans le sens antihoraire. Le regroupement des fibres entre elles en brins, est effectué de telle manière que la Fraction Volumique (FV) soit conservée. Ceci est fait en considérant une conservation de la section d'un fil d'une surface de 1.31 mm^2 . Chaque fil comportant 60 brins, ceci nous donne un rayon de brin $r_b = 0.083 \text{ mm}$.

4.1 Modélisation par éléments finis

Le travail présenté dans cette partie concerne la modélisation des brins extrait du fichier disponible ainsi que du VER enveloppé en vue de réaliser l'homogénéisation à double échelle.

4.1.1 Définition de la microstructure

La caractérisation des propriétés de la structure peut s'effectuer à partir de différentes extractions localisées de la microstructure. La Figure 4-2 illustre les trois cas distingués ici qui peuvent se traduire par la création du domaine d'étude sur:

- Une section complète.
- Un parallélépipède situé sur le côté de longueur L .
- Un parallélépipède sur le côté de dimension l .

Un premier programme python a été développé afin d'afficher la structure. L'interface graphique, développée grâce au logiciel GMSH, permet ainsi de visualiser le squelette de la structure ainsi que la géométrie du VER choisi par l'utilisateur. L'expansion du domaine est contrôlable dans les trois directions de l'espace. Le fichier de chaque maillage des brins est ainsi exporté par itération tout le long du tube, avec un rayon de fibre adéquate.

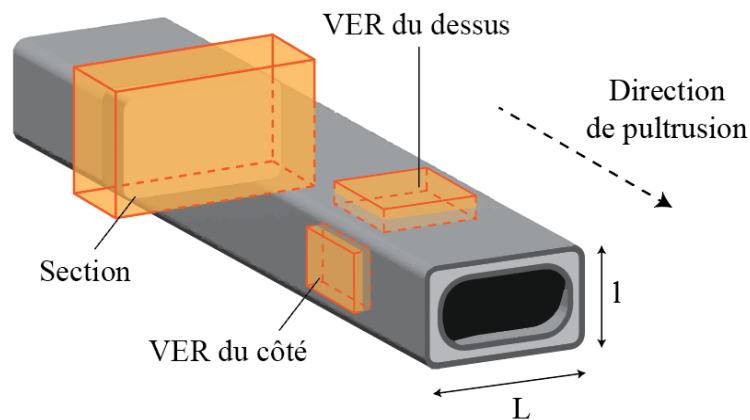


Figure 4-2 : Illustration des trois différents VER possibles sur la structure d'un tube creux rectangulaire

Pour chaque VER, le fichier d'origine est réduit de manière à ne conserver que les fibres ayant au moins deux points de support dans le domaine considéré. La trajectoire de la droite support pour la création de la fibre solide est effectuée à l'aide d'une spline sur laquelle un cercle est extrudée. Une représentation du modèle des fibres pour deux fractions volumique différentes est visible sur la Figure 4-3. Le VER, non représenté sur la figure, recouvre normalement l'ensemble des fibres en minimisant les dimensions selon les directions principales de l'espace.

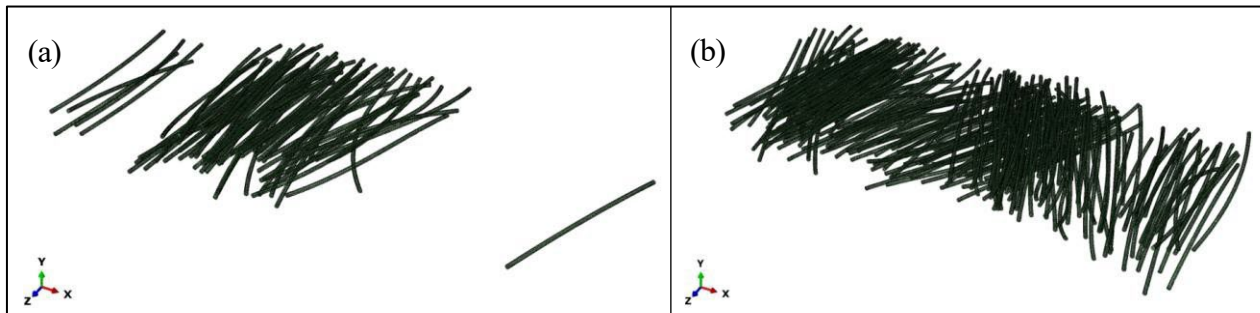


Figure 4-3 : Image des fibres modélisées et maillées avec une FV de (a) 1.6% et (b) 5.2% dans un domaine de même dimension non représenté sur l'image

4.1.2 Création du VER enveloppé

Un autre programme python, toujours développé avec GMSH vient lire les fichiers créés précédemment pour en déterminer les dimensions exactes afin de créer un VER enveloppé. L'épaisseur, la densité du maillage sont également ajustables par l'utilisateur. Le programme exporte donc le modèle du maillage du VER enveloppé ainsi qu'un fichier texte contenant les dimensions de celui-ci. Les groupes contenant les nœuds de chaque face extérieure sont également créés, tout cela dans le but d'accélérer ce processus normalement effectué par Abaqus. Dans le cas présent, une épaisseur de 0,2 mm est définie pour l'enveloppe ce qui correspond au dixième de la plus petite dimension du VER. Une densité de maillage de 0,1 et également appliquée avec 14 nœuds sur les arêtes de l'enveloppe.

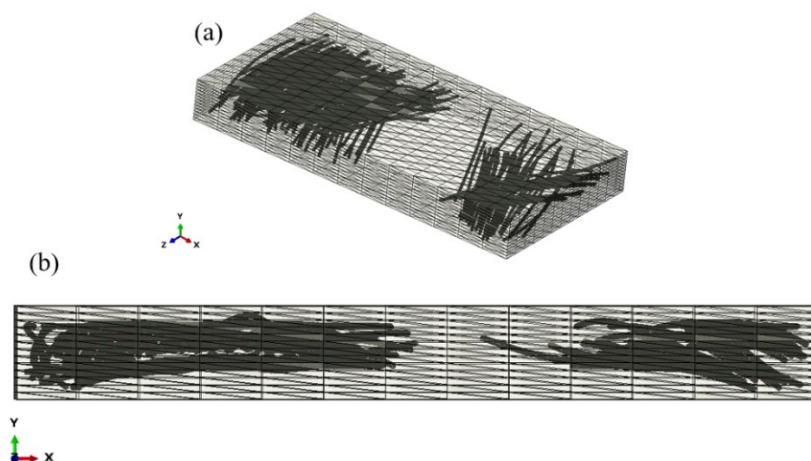


Figure 4-4 : Illustration d'un VER enveloppé contenant des fibres imbriquées en noir selon une vue (a) en perspective et (b) frontale

4.1.3 Procédé d'homogénéisation

Le procédé d'homogénéisation peut ensuite être effectué à l'aide d'un dernier programme python lancé depuis Abaqus. L'importation des modèles, la définition des matériaux et l'imbrication des fibres sont d'abord effectués. On considère ici des fibres de verre qui présentent un module de Young $E_{gf} = 75 \text{ GPa}$ et un coefficient de Poisson $\nu_{gf} = 0,25$. La matrice est définie à partir des propriétés du Polypropylène ($E_{PP} = 1,35 \text{ GPa}$, $\nu_{PP} = 0,43$).

La création des contraintes multi-points entre les nœuds sur les faces opposées du VER enveloppé est réalisée automatiquement grâce au plug-in en accès libre Homtools [92] dont le code source est intégré directement au programme. Chacune des paires de nœuds contraintes est associée à trois points de référence sur lesquels sont imposées les déformations macroscopiques. Six cas de chargement unitaires sont réalisés pour calculer chaque colonne du tenseur de rigidité.

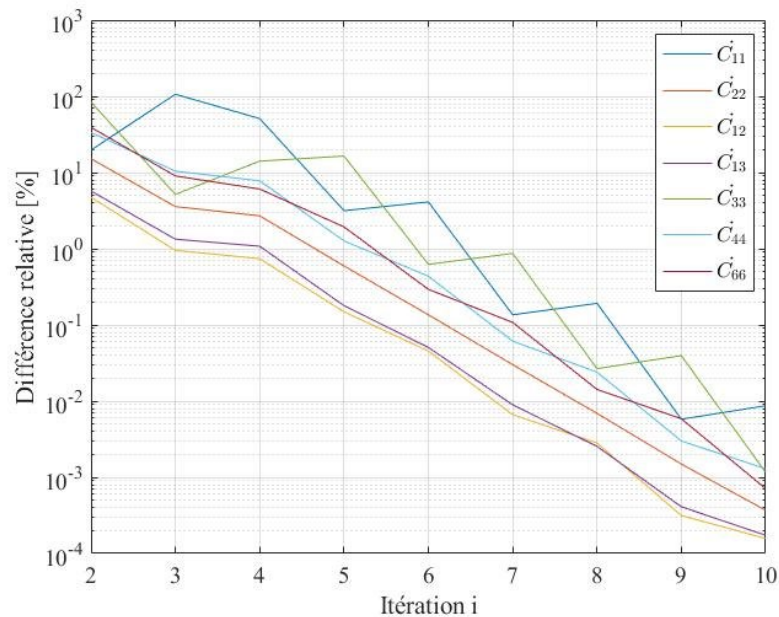


Figure 4-5 : Évolution de la différence relative des termes $\dot{C}_{ij}$ du tenseur entre l'itération $i - 1$ et i

Cette étape est répétée jusqu'à obtenir la convergence des termes du tenseur qui est illustrée sur la Figure 4-5. Cela peut se faire en appliquant une condition sur le degré de convergence recherché sur les termes du tenseur ou sur un nombre d'itération suffisant pour obtenir systématiquement la convergence par expérience. On choisit donc d'effectuer 10 itérations pour chaque VER de façon à

avoir non seulement la convergence systématique des termes et d'observer la stabilité de la méthode.

4.2 Résultats

Les Figures 4-6, 4-7 et 4-8 présentent une partie des termes du tenseur de rigidité pour chacun des VER modélisés le long de la structure étudiée. Les autres termes ne sont pas détaillés ici du fait de leur faible ordre de grandeur ($10^{-4} GPa$). Une convergence des termes du tenseur de rigidité, avec une différence relative entre deux itérations inférieures à 10^{-5} , est obtenue systématiquement en moins de 10 itérations. Les graphiques montrent une diminution des propriétés autour de 350 cm. La FV à cet endroit est de 1,6% ce qui est très faible et bien inférieur à la moyenne de 4,6% pour l'ensemble des VER considérés.

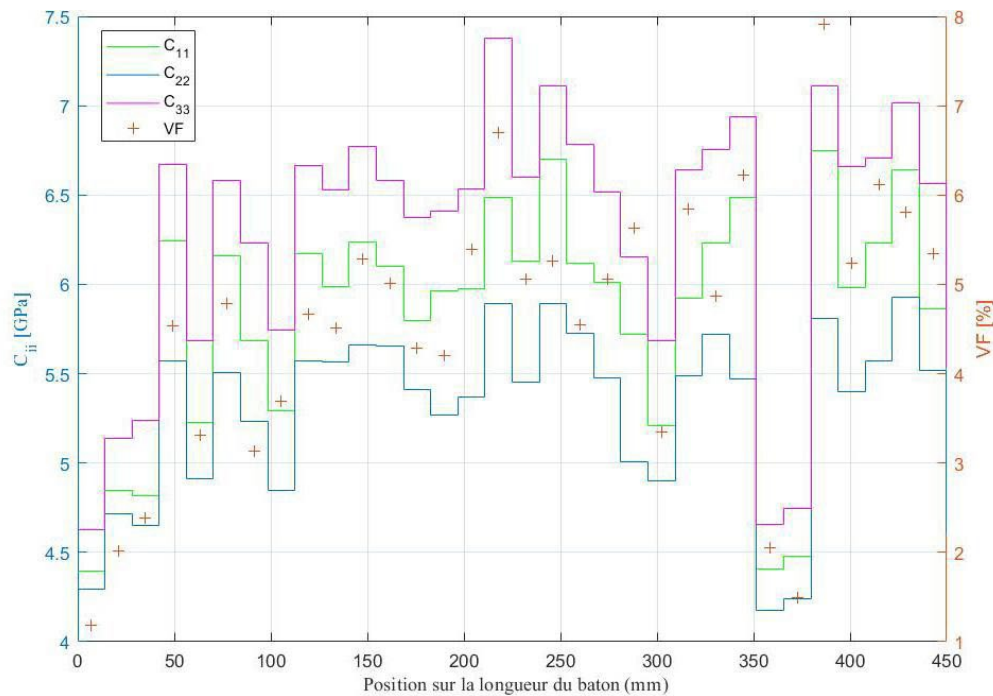


Figure 4-6 : Évolution des termes C_{11} , C_{22} et C_{33} du tenseur de rigidité le long de la structure

Les différentes variations observées semblent être étroitement liées à la FV des VER dont les propriétés élastiques ont été déterminées à partir de la méthode présentée. L'orientation des fibre a aussi un effet potentiel sur les résultats mais ceci n'a pas été étudié plus en profondeur. Les valeurs très faibles de fractions volumiques peuvent s'expliquer par la modélisation qui

souffre de quelques imprécisions. Concernant les brins, seuls les points dont les coordonnées sont présentes dans le VER, illustrés en rouge sur la Figure 4-1 sont utilisés pour la modélisation de la fibre. Il existe donc un écart entre la majorité des fibres un VER avec les frontières de celui-ci. Une interpolation de la trajectoire sous forme de spline intégrant les points voisins situés à l'extérieur du VER permettrait la modélisation jusqu'aux frontières du VER. Pour ce qui est de la modélisation du VER, le domaine choisi ne prend pas en compte la forme du mandrin, rajoutant une quantité de matrice supplémentaire. Aucune comparaison des résultats obtenus n'a pu être faite avec des essais expérimentaux faute de temps et de ressources.

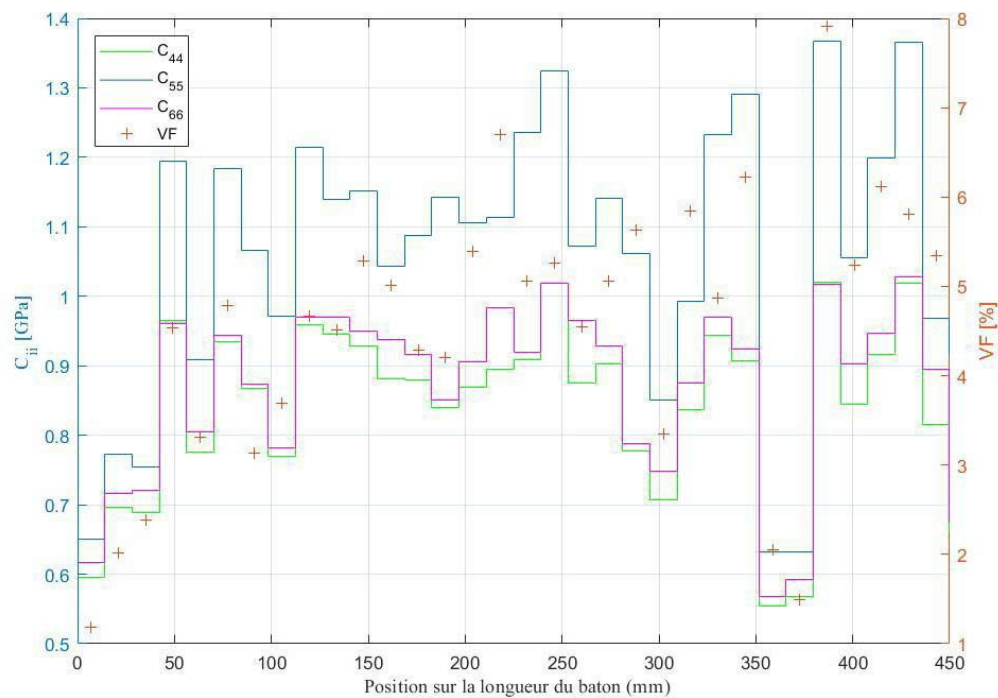


Figure 4-7 : Évolution des termes C_{44} , C_{55} et C_{66} du tenseur de rigidité le long de la structure

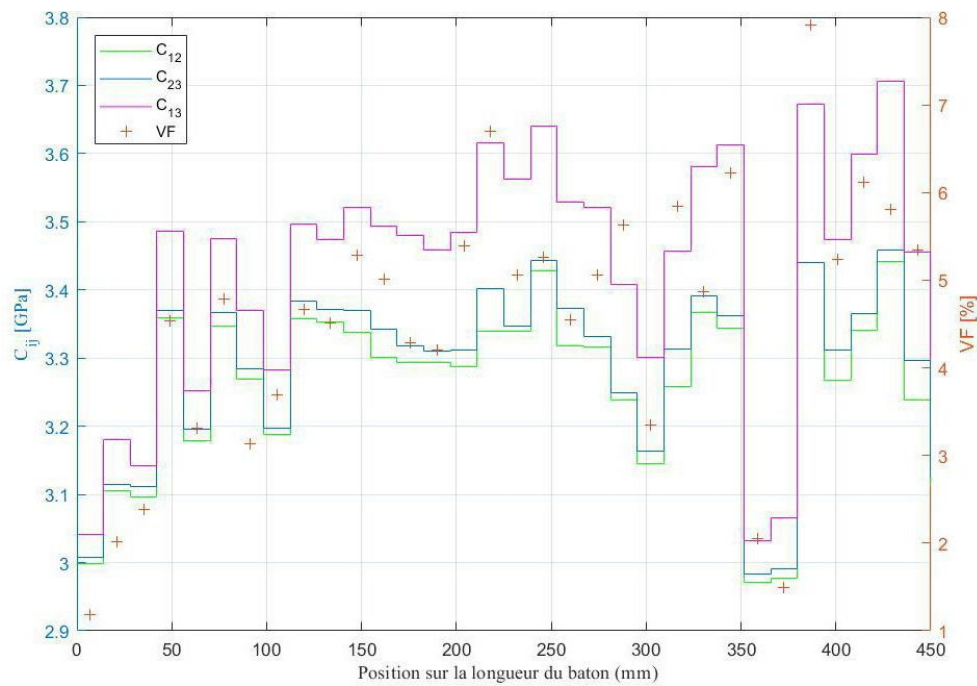


Figure 4-8 : Évolution des termes C_{12} , C_{23} et C_{13} du tenseur de rigidité le long de la structure

4.3 Conclusion

Cette partie a présenté la mise en œuvre de la méthode d'enrichissement d'enveloppe pour l'application sur le cas d'un tube tressé et pultrudé. Cette étude avait pour but de poser un cadre reproductible pour l'étude de structures composites apériodiques grâce à une homogénéisation double échelle. L'introduction d'une enveloppe entourant le VER contenant les fibres imbriquées permet la convergence des propriétés élastiques calculées d'une structure tressée à renforts fibreux. Les résultats observés montrent une forte corrélation entre la fraction volumique de fibres et les valeurs des termes du tenseur de rigidité. La méthode présentée, bien que démontrant quelques limites corrigibles, s'avère adaptée à l'homogénéisation d'un renfort tressé pultrudé dont l'arrangement microscopique est issu d'une simulation détaillée. Aucune comparaison avec des méthodes analytique ou des résultats expérimentaux n'a pu être effectuée.

CHAPITRE 6 CONCLUSION

L'automatisation du processus de fabrication des composites à renforts fibreux comme le tressage dans la création de tubes creux répond à des enjeux de . Néanmoins, il faut reconnaître que la détermination des propriétés mécaniques s'avère de plus en plus complexe à mesure que la structure s'étoffe pour se conformer aux exigences spécifiques. L'homogénéisation, associée à l'analyse par éléments finis, permet de prédire efficacement les propriétés d'une structure à l'aide d'une décomposition à double échelle de celle-ci. L'étude d'une microstructure se heurte cependant à la satisfaction d'une condition de périodicité pour l'application des méthodes classiques d'homogénéisation ce qui pousse au développement de techniques adaptées à ce type de configuration. L'objectif initial de ce mémoire était de proposer une méthode permettant de déterminer les propriétés globales d'un tube réalisé par pultrusion d'un tressage de renforts fibreux qui démontre une forte hétérogénéité locale et un positionnement apériodique des fibres à l'issue du procédé de fabrication. Cela a mené au développement, à la validation puis à l'application d'une méthode d'Enrichissement d'Enveloppe.

La première partie de ce mémoire a fait l'objet d'une soumission d'un article dans la revue Composite Structures. L'article, retranscrit ici a examiné l'influence des paramètres de l'enveloppe dans le but de proposer une méthode encadrée. L'épaisseur et la densité du maillage de l'enveloppe ont été étudiées en fonction de la convergence des termes du tenseur de rigidité. L'influence des valeurs initiales du matériau de l'enveloppe y sont également évaluée. Il s'attarde ensuite sur l'application de la méthode à un cas simple et bien documenté. Un matériau composite composé d'inclusions sphériques est analysé à l'aide de la méthode proposée, avec l'objectif de déterminer ses propriétés élastiques en le considérant comme isotrope. La matrice du tenseur de rigidité est ainsi calculée pour le cas des inclusions sphériques avec différentes fractions volumiques. Les résultats sont ensuite comparés à ceux obtenus à partir d'un modèle périodique et à ceux d'une étude similaire, permettant ainsi d'évaluer l'efficacité de la méthode.

Le second volet du mémoire a abordé l'application de la méthode à un modèle numérique de renforts tressés triaxial. La position des fibres a été extraite de la simulation d'un procédé de pultrusion. Le modèle est décomposé en volumes élémentaires représentatifs pour permettre l'homogénéisation des propriétés locales avec la méthode proposée.

La principale contribution de ce mémoire est l'étude la méthode proposée sur différentes microstructures. Cela permet non seulement de vérifier la polyvalence de la méthode et de proposer une démarche claire pour l'emploi de celle-ci. Les résultats démontrent qu'il est possible d'obtenir la convergence des termes du tenseur de rigidité pour les cas étudiés. De plus les résultats obtenus sont cohérents avec les modèles empiriques lorsque ceux-ci sont disponibles. La cohérence entre les fibres et la matrice n'a pas été étudiée du fait de l'emploi de la technique d'éléments imbriqués. Ce travail ouvre la voie à de futures recherches qui peuvent porter sur :

- **L'étude de l'interaction entre les paramètres de l'enveloppe :** Une étude croisée entre l'épaisseur de l'enveloppe et la densité du maillage de celle-ci pourrait mettre en lumière des cas spécifiques résultant de l'interaction de ces paramètres. La détermination des conditions menant à la présence d'éléments dégénérés n'a pas été effectué dans cette étude. Cela permettrait de proposer une démarche plus encadrée et d'adapter ces paramètres de manière sélective dans chaque direction de l'espace.
- **L'application de la méthode sur des cas de renforts non-isotropes :** Les travaux ont porté sur l'étude de renforts tressés en fibres de verre supposées isotropes. L'emploi répandu des fibres de carbones orthotropes, devrait mener à l'obtention de résultats dépendants de l'orientation des fibres dans le VER en plus de leur fraction volumique.
- **La validation à l'aide de tests mécaniques :** La validation expérimentale des résultats obtenus sur le tube tressé pultrudé passe par la caractérisation d'un échantillon réel. L'application des propriétés locales homogénéisées sur un modèle numérique macroscopique soumis à un test en flexion est une bonne manière de comparer les valeurs obtenues expérimentalement sur une configuration similaire.

RÉFÉRENCES

- [1] Bader MG. Selection of composite materials and manufacturing routes for cost-effective performance. *Compos Part Appl Sci Manuf* 2002;33:913–34. [https://doi.org/10.1016/S1359-835X\(02\)00044-1](https://doi.org/10.1016/S1359-835X(02)00044-1).
- [2] Barile M, Lecce L, Iannone M, Pappadà S, Roberti P. Thermoplastic Composites for Aerospace Applications. In: Pantelakis S, Tserpes K, editors. *Revolutionizing Aircr. Mater. Process.*, Cham: Springer International Publishing; 2020, p. 87–114. https://doi.org/10.1007/978-3-030-35346-9_4.
- [3] Nunes JP, Silva JF, Velosa JC, Bernardo CA, Marques AT. New thermoplastic matrix composites for demanding applications. *Plast Rubber Compos* 2009;38:167–72. <https://doi.org/10.1179/174328909X387946>.
- [4] Björnsson A, Jonsson M, Johansen K. Automated material handling in composite manufacturing using pick-and-place systems – a review. *Robot Comput-Integr Manuf* 2018;51:222–9. <https://doi.org/10.1016/j.rcim.2017.12.003>.
- [5] Lindbäck J, Björnsson A, Johansen K. New Automated Composite Manufacturing Process: : Is it possible to find a cost effective manufacturing method with the use of robotic equipment?, 2012.
- [6] Frketic J, Dickens T, Ramakrishnan S. Automated manufacturing and processing of fiber-reinforced polymer (FRP) composites: An additive review of contemporary and modern techniques for advanced materials manufacturing. *Addit Manuf* 2017;14:69–86. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2017.01.003>.
- [7] Volk M, Yuksel O, Baran I, Hattel JH, Spangenberg J, Sandberg M. Cost-efficient, automated, and sustainable composite profile manufacture: A review of the state of the art, innovations, and future of pultrusion technologies. *Compos Part B Eng* 2022;246:110135. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2022.110135>.
- [8] Crane RM, Camponeschi ET. Experimental and analytical characterization of multidimensionally braided graphite/epoxy composites. *Exp Mech* 1986;26:259–66. <https://doi.org/10.1007/BF02320051>.
- [9] Ghaedsharaf M, Brunel J-E, Lebel L. Multiscale numerical simulation of the forming process of biaxial braids during thermoplastic braid-trusion: Predicting 3D and internal geometry and fiber orientation distribution. *Compos Part Appl Sci Manuf* 2021;150:106637. <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2021.106637>.
- [10] Sundararaghavan V, Zabarar N. Classification and reconstruction of three-dimensional microstructures using support vector machines. *Comput Mater Sci* 2005;32:223–39. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2004.07.004>.
- [11] Chen W, Iyer A, Bostanabad R. Data Centric Design: A New Approach to Design of Microstructural Material Systems. *Engineering* 2022;10:89–98. <https://doi.org/10.1016/j.eng.2021.05.022>.
- [12] Povirk GL. Incorporation of microstructural information into models of two-phase materials. *Acta Metall Mater* 1995;43:3199–206. [https://doi.org/10.1016/0956-7151\(94\)00487-3](https://doi.org/10.1016/0956-7151(94)00487-3).
- [13] Rintoul MD, Torquato S. Reconstruction of the Structure of Dispersions. *J Colloid Interface Sci* 1997;186:467–76. <https://doi.org/10.1006/jcis.1996.4675>.
- [14] Xiao N, Zhou X-P. The novel continuous reconstruction approach for reconstructing anisotropic porous rocks. *Comput Geotech* 2023;153:105101. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2022.105101>.
- [15] Kwon B, Choi W, Ju H, Kweon J-H, Nam Y-W. Effects of consolidation processing parameters on the surface morphology and void content of braided thermoplastic composite tubes. *Funct Compos Struct* 2021;3:035004. <https://doi.org/10.1088/2631-6331/ac199f>.
- [16] Geers MGD, Kouznetsova VG, Brekelmans WAM. Multi-scale computational homogenization: Trends and challenges. *J Comput Appl Math* 2010;234:2175–82. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2009.08.077>.
- [17] Miehe C. Strain-driven homogenization of inelastic microstructures and composites based on an incremental variational formulation. *Int J Numer Methods Eng* 2002;55:1285–322. <https://doi.org/10.1002/nme.515>.
- [18] Li Y, Yan S, Yan Y, Zhang W. Modelling of the compressive behavior of 3D braided tubular composites by a novel unit cell. *Compos Struct* 2022;287:115303. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2022.115303>.
- [19] Bargmann S, Klusemann B, Markmann J, Schnabel JE, Schneider K, Soyarslan C, et al. Generation of 3D representative volume elements for heterogeneous materials: A review. *Prog Mater Sci* 2018;96:322–84. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2018.02.003>.

- [20] Kabel M, Merkert D, Schneider M. Use of composite voxels in FFT-based homogenization. *Comput Methods Appl Mech Eng* 2015;294:168–88. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2015.06.003>.
- [21] Brisard S, Dormieux L. FFT-based methods for the mechanics of composites: A general variational framework. *Comput Mater Sci* 2010;49:663–71. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2010.06.009>.
- [22] Kim HJ, Swan CC. Voxel-based meshing and unit-cell analysis of textile composites. *Int J Numer Methods Eng* 2003;56:977–1006. <https://doi.org/10.1002/nme.594>.
- [23] Dunant CF, Bary B, Giorla AB, Péniguel C, Sanahuja J, Toulemonde C, et al. A critical comparison of several numerical methods for computing effective properties of highly heterogeneous materials. *Adv Eng Softw* 2013;58:1–12. <https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2012.12.002>.
- [24] Zézé DS, Potier-Ferry M, Damil N. A boundary meshless method with shape functions computed from the PDE. *Eng Anal Bound Elem* 2010;34:747–54. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2010.03.008>.
- [25] Rodrigues DES, Belinha J, Pires FMA, Dinis LMJS, Jorge RMN. Material homogenization technique for composites: A meshless formulation. *Sci Technol Mater* 2018;30:50–9. <https://doi.org/10.1016/j.stmat.2018.01.001>.
- [26] Rastkar S, Zahedi M, Korolev I, Agarwal A. A meshfree approach for homogenization of mechanical properties of heterogeneous materials. *Eng Anal Bound Elem* 2017;75:79–88. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2016.12.004>.
- [27] Bastidas M, Bringedal C, Pop IS, Radu FA. Numerical homogenization of non-linear parabolic problems on adaptive meshes. *J Comput Phys* 2021;425:109903. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109903>.
- [28] Sohn D. Periodic mesh generation and homogenization of inclusion-reinforced composites using an element-carving technique with local mesh refinement. *Compos Struct* 2018;185:65–80. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2017.10.088>.
- [29] Bedogni E, Ivanov D, Lomov S, Pirondi A, Vettori M, Verpoest I. Creating finite element model of 3D woven fabrics and composites: Semi-automated solution of interpenetration problem, 2012.
- [30] Wintiba B, Sonon B, Ehab Moustafa Kamel K, Massart TJ. An automated procedure for the generation and conformal discretization of 3D woven composites RVEs. *Compos Struct* 2017;180:955–71. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2017.08.010>.
- [31] Zhang C, Curiel-Sosa JL, Bui TQ. Comparison of periodic mesh and free mesh on the mechanical properties prediction of 3D braided composites. *Compos Struct* 2017;159:667–76. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2016.10.012>.
- [32] Xiwu X. On the microstructure model of four-step 3D rectangular braided composites, 2006.
- [33] Burgarella B, Assi P, Lebel L. Multi-scale finite elements analysis of braids and bundles of filaments using embedded elements. *Finite Elem Anal Des* 2021;197:103631. <https://doi.org/10.1016/j.finel.2021.103631>.
- [34] Ngô B-ND, Stukowski A, Mameka N, Markmann J, Albe K, Weissmüller J. Anomalous compliance and early yielding of nanoporous gold. *Acta Mater* 2015;93:144–55. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.04.021>.
- [35] Griffiths E, Bargmann S, Reddy BD. Elastic behaviour at the nanoscale of innovative composites of nanoporous gold and polymer. *Extreme Mech Lett* 2017;17. <https://doi.org/10.1016/j.eml.2017.09.006>.
- [36] Luo Q, Liu D, Qiao P, Zhou Z, Zhao Y, Sun L. Micro-CT-based micromechanics and numerical homogenization for effective elastic property of ultra-high performance concrete. *Int J Damage Mech* 2020;29:45–66. <https://doi.org/10.1177/1056789519848475>.
- [37] Tabatabaei SA, Lomov SV. Eliminating the volume redundancy of embedded elements and yarn interpenetrations in meso-finite element modelling of textile composites. *Comput Struct* 2015;152:142–54. <https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2015.02.014>.
- [38] Ye Z, Yu W. Maximize Unit Cell Choices for Variational Asymptotic Homogenization. 2012. <https://doi.org/10.2514/6.2012-2002>.
- [39] Hill R. Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles. *J Mech Phys Solids* 1963;11:357–72. [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(63\)90036-X](https://doi.org/10.1016/0022-5096(63)90036-X).
- [40] Storm J, Götze T, Hickmann R, Cherif C, Wießner S, Kaliske M. Homogenisation by cylindrical RVEs with twisted-periodic boundary conditions for hybrid-yarn reinforced elastomers. *Int J Solids Struct* 2018;139–140:283–301. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2018.02.006>.

- [41] Zhang G, Feng N, Khandelwal K. A computational framework for homogenization and multiscale stability analyses of nonlinear periodic materials. *Int J Numer Methods Eng* 2021;122:6527–75. <https://doi.org/10.1002/nme.6802>.
- [42] Moës N, Béchet E, Tourbier M. Imposing Dirichlet boundary conditions in the extended finite element method. *Int J Numer Methods Eng* 2006;67:1641–69. <https://doi.org/10.1002/nme.1675>.
- [43] Embar A, Dolbow J, Harari I. Imposing Dirichlet boundary conditions with Nitsche’s method and spline-based finite elements. *Int J Numer Methods Eng* 2010;83:877–98. <https://doi.org/10.1002/nme.2863>.
- [44] Sadeghirad A, Mohammadi S. Equilibrium on line method (ELM) for imposition of Neumann boundary conditions in the finite point method (FPM). *Int J Numer Methods Eng* 2007;69:60–86. <https://doi.org/10.1002/nme.1755>.
- [45] Gajendran H, Hall RB, Masud A. Edge stabilization and consistent tying of constituents at Neumann boundaries in multi-constituent mixture models. *Int J Numer Methods Eng* 2017;110:1142–72. <https://doi.org/10.1002/nme.5446>.
- [46] Wojciechowski M. On generalized boundary conditions for mesoscopic volumes in computational homogenization. *Compos Struct* 2022;294:115718. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2022.115718>.
- [47] Moulinec H, Suquet P. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Comput Methods Appl Mech Eng* 1998;157:69–94. [https://doi.org/10.1016/S0045-7825\(97\)00218-1](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(97)00218-1).
- [48] Geymonat G, Müller S, Triantafyllidis N. Homogenization of nonlinearly elastic materials, microscopic bifurcation and macroscopic loss of rank-one convexity. *Arch Ration Mech Anal* 1993;122:231–90. <https://doi.org/10.1007/BF00380256>.
- [49] Wang R, Zhang L, Hu D, Liu C, Shen X, Cho C, et al. A novel approach to impose periodic boundary condition on braided composite RVE model based on RPIM. *Compos Struct* 2017;163:77–88. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2016.12.032>.
- [50] Harper LT, Qian C, Turner TA, Li S, Warrior NA. Representative volume elements for discontinuous carbon fibre composites – Part 1: Boundary conditions. *Compos Sci Technol* 2012;72:225–34. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2011.11.006>.
- [51] Yang Y, Mace BR, Kingan MJ. A wave and finite element based homogenised model for predicting sound transmission through honeycomb panels. *J Sound Vib* 2019;463:114963. <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2019.114963>.
- [52] Laschet G. Homogenization of the thermal properties of transpiration cooled multi-layer plates. *Comput Methods Appl Mech Eng* 2002;191:4535–54. [https://doi.org/10.1016/S0045-7825\(02\)00319-5](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(02)00319-5).
- [53] Sanchez-Palencia E, editor. Fluid flow in porous media. *Non-Homog. Media Vib. Theory*, Berlin, Heidelberg: Springer; 1980, p. 129–57. https://doi.org/10.1007/3-540-10000-8_7.
- [54] Voigt W. Ueber die Beziehung zwischen den beiden Elasticitätsconstanten isotroper Körper. *Ann Phys* 1889;274:573–87. <https://doi.org/10.1002/andp.18892741206>.
- [55] Reuss A. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. *ZAMM - J Appl Math Mech Z Für Angew Math Mech* 1929;9:49–58. <https://doi.org/10.1002/zamm.19290090104>.
- [56] Hill R. The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate. *Proc Phys Soc Sect A* 1952;65:349. <https://doi.org/10.1088/0370-1298/65/5/307>.
- [57] Hashin Z, Shtrikman S. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *J Mech Phys Solids* 1963;11:127–40. [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(63\)90060-7](https://doi.org/10.1016/0022-5096(63)90060-7).
- [58] Castañeda PP, Willis JR. The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media. *J Mech Phys Solids* 1995;43:1919–51. [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(95\)00058-Q](https://doi.org/10.1016/0022-5096(95)00058-Q).
- [59] Suquet P. Elements of homogenization for inelastic solid mechanics 1985.
- [60] Willis JR. Variational and Related Methods for the Overall Properties of Composites. In: Yih C-S, editor. *Adv. Appl. Mech.*, vol. 21, Elsevier; 1981, p. 1–78. [https://doi.org/10.1016/S0065-2156\(08\)70330-2](https://doi.org/10.1016/S0065-2156(08)70330-2).
- [61] Ghossein E, Lévesque M. A comprehensive validation of analytical homogenization models: The case of ellipsoidal particles reinforced composites. *Mech Mater* 2014;75:135–50. <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2014.03.014>.

- [62]Mercier S, Molinari A, Berbenni S, Berveiller M. Comparison of different homogenization approaches for elastic–viscoplastic materials. *Model Simul Mater Sci Eng* 2012;20:024004. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/20/2/024004>.
- [63]Moulinec H, Suquet P. A FFT-Based Numerical Method for Computing the Mechanical Properties of Composites from Images of their Microstructures. In: Pyrz R, editor. *IUTAM Symp. Microstruct.-Prop. Interact. Compos. Mater.*, Dordrecht: Springer Netherlands; 1995, p. 235–46. https://doi.org/10.1007/978-94-011-0059-5_20.
- [64]Miehe C. Computational micro-to-macro transitions for discretized micro-structures of heterogeneous materials at finite strains based on the minimization of averaged incremental energy. *Comput Methods Appl Mech Eng* 2003;192:559–91. [https://doi.org/10.1016/S0045-7825\(02\)00564-9](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(02)00564-9).
- [65]Miehe C, Schotte J, Lambrecht M. Homogenization of inelastic solid materials at finite strains based on incremental minimization principles. Application to the texture analysis of polycrystals. *J Mech Phys Solids* 2002;50:2123–67. [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(02\)00016-9](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(02)00016-9).
- [66]Rajak DK, Pagar DD, Kumar R, Pruncu CI. Recent progress of reinforcement materials: a comprehensive overview of composite materials. *J Mater Res Technol* 2019;8:6354–74. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2019.09.068>.
- [67]van de Werken N, Tekinalp H, Khanbolouki P, Ozcan S, Williams A, Tehrani M. Additively manufactured carbon fiber-reinforced composites: State of the art and perspective. *Addit Manuf* 2020;31:100962. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2019.100962>.
- [68]Mori T, Tanaka K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metall* 1973;21:571–4. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(73\)90064-3](https://doi.org/10.1016/0001-6160(73)90064-3).
- [69]Benveniste Y. A new approach to the application of Mori-Tanaka’s theory in composite materials. *Mech Mater* 1987;6:147–57. [https://doi.org/10.1016/0167-6636\(87\)90005-6](https://doi.org/10.1016/0167-6636(87)90005-6).
- [70]Affdl JCH, Kardos JL. The Halpin-Tsai equations: A review. *Polym Eng Sci* 1976;16:344–52. <https://doi.org/10.1002/pen.760160512>.
- [71]Kanit T, Forest S, Galliet I, Mounoury V, Jeulin D. Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach. *Int J Solids Struct* 2003;40:3647–79. [https://doi.org/10.1016/S0020-7683\(03\)00143-4](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(03)00143-4).
- [72]Yu W, Tang T. Variational asymptotic method for unit cell homogenization of periodically heterogeneous materials. *Int J Solids Struct* 2007;44:3738–55. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2006.10.020>.
- [73]Gélébart L, Derouillat J, Chen Y, Chateau C, Bornert M, King A, et al. *Simulations FFT massivement parallèles en mécanique des matériaux hétérogènes*, 2017.
- [74]Michel JC, Moulinec H, Suquet P. A computational scheme for linear and non-linear composites with arbitrary phase contrast. *Int J Numer Methods Eng* 2001;52:139–60. <https://doi.org/10.1002/nme.275>.
- [75]Michel JC, Moulinec H, Suquet P. Effective properties of composite materials with periodic microstructure: a computational approach. *Comput Methods Appl Mech Eng* 1999;172:109–43. [https://doi.org/10.1016/S0045-7825\(98\)00227-8](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(98)00227-8).
- [76]Jöchen K, Böhlke T, Fritzen F. Influence of the Crystallographic and the Morphological Texture on the Elastic Properties of Fcc Crystal Aggregates. *Solid State Phenom* 2010;160:83–6. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.160.83>.
- [77]Madi K, Forest S, Boussuge M, Gailliègue S, Lataste E, Buffière J-Y, et al. Finite element simulations of the deformation of fused-cast refractories based on X-ray computed tomography. *Comput Mater Sci* 2007;39:224–9. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2006.01.033>.
- [78]Fritzen F. *Microstructural Modeling and Computational Homogenization of the Physically Linear and Nonlinear Constitutive Behavior of Micro-Heterogeneous Materials*, 2012.
- [79]Ghossein E. Numerical validation of analytical homogenization models for the case of randomly distributed and oriented ellipsoidal fibers reinforced composites. n.d.:207.
- [80]Davari M, Rossi R, Dadvand P. Three embedded techniques for finite element heat flow problem with embedded discontinuities. *Comput Mech* 2017;59. <https://doi.org/10.1007/s00466-017-1382-7>.
- [81]Liu H, Zeng D, Li Y, Jiang L. Development of RVE-embedded solid elements model for predicting effective elastic constants of discontinuous fiber reinforced composites. *Mech Mater* 2016;93:109–23. <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2015.10.011>.

- [82] Baiges J, Codina R, Henke F, Shahmiri S, Wall WA. A symmetric method for weakly imposing Dirichlet boundary conditions in embedded finite element meshes. *Int J Numer Methods Eng* 2012;90:636–58. <https://doi.org/10.1002/nme.3339>.
- [83] Walters DJ, Luscher DJ, Yeager JD. Considering computational speed vs. accuracy: Choosing appropriate mesoscale RVE boundary conditions. *Comput Methods Appl Mech Eng* 2021;374:113572. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113572>.
- [84] Legrain G, Chevreuil M, Takano N. Prediction of apparent properties with uncertain material parameters using high-order fictitious domain methods and PGD model reduction. *Int J Numer Methods Eng* 2017;109:345–67. <https://doi.org/10.1002/nme.5289>.
- [85] Al Kassem G, Weichert D. Micromechanical material models for polymer composites through advanced numerical simulation techniques: Micromechanical material models for polymer composites through advanced numerical simulation techniques. *PAMM* 2009;9:413–4. <https://doi.org/10.1002/pamm.200910180>.
- [86] Larsson F, Runesson K, Saroukhani S, Vafadari R. Computational homogenization based on a weak format of micro-periodicity for RVE-problems. *Comput Methods Appl Mech Eng* 2011;200:11–26. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.06.023>.
- [87] Tyrus JM, Gosz M, DeSantiago E. A local finite element implementation for imposing periodic boundary conditions on composite micromechanical models. *Int J Solids Struct* 2007;44:2972–89. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2006.08.040>.
- [88] Nguyen V-D, Béchet E, Geuzaine C, Noels L. Imposing periodic boundary condition on arbitrary meshes by polynomial interpolation. *Comput Mater Sci* 2012;55:390–406. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.10.017>.
- [89] Henyš P, Čapek L, Březina J. Comparison of current methods for implementing periodic boundary conditions in multi-scale homogenisation. *Eur J Mech - ASolids* 2019;78:103825. <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2019.103825>.
- [90] Temizer İ, Wriggers P. On the computation of the macroscopic tangent for multiscale volumetric homogenization problems. *Comput Methods Appl Mech Eng* 2008;198:495–510. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2008.08.018>.
- [91] Geuzaine C, Remacle J-F. Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *Int J Numer Methods Eng* 2009;79:1309–31. <https://doi.org/10.1002/nme.2579>.
- [92] Lejeunes S, Bourgeois S. Une Toolbox Abaqus pour le calcul de propriétés effectives de milieux hétérogènes. 2011.
- [93] de Macedo RQ, Ferreira RTL, Donadon MV, Guedes JM. Elastic properties of unidirectional fiber-reinforced composites using asymptotic homogenization techniques. *J Braz Soc Mech Sci Eng* 2018;40:255. <https://doi.org/10.1007/s40430-018-1174-9>.
- [94] Mote3D. Mote3D/Mote3D toolbox 2023.
- [95] Yun J-H, Jeon Y-J, Kang M-S. Analysis of Elastic Properties of Polypropylene Composite Materials with Ultra-High Molecular Weight Polyethylene Spherical Reinforcement. *Materials* 2022;15:5602. <https://doi.org/10.3390/ma15165602>.