

# **Modèle multi-échelle de composites *Fuzzy Fiber* viscoplastiques enrobés de nanotubes de carbone (CNT) avec interface endommagée**

## ***Multiscale model of viscoplastic CNT-coated Fuzzy Fiber composites with damage interface***

**Ibtissam Hanoun<sup>1</sup>, George Chatzigeorgiou<sup>1</sup> et Fodil Meraghni<sup>1</sup>**

1 : Arts et Métiers Institute of Technology, CNRS, LEM3-UMR 7239

4 rue Augustin Fresnel, Metz, 57070, France

e-mail : ibtissam.hanoun@ensam.eu, georges.chatzigeorgiou@ensam.eu et fodil.meraghni@ensam.eu

### **Résumé**

La demande croissante de composites multifonctionnels avancés dans les secteurs de l'aérospatiale et de l'automobile a stimulé l'intérêt pour les matériaux capables de résister à des conditions thermo-électro-mécaniques complexes. Parmi ces matériaux, les composites *Fuzzy Fiber*, formés par greffage de nanotubes de carbone (CNTs) sur les renforts en fibres, offrent une meilleure adhérence interfaciale, une résilience mécanique accrue et des propriétés multifonctionnelles, comme la conductivité électrique et la piézoélectricité. Ces attributs les rendent idéaux pour les composants aérospatiaux légers et résistants à la chaleur. Cette étude porte sur la modélisation du comportement viscoplastique et des mécanismes d'endommagement des composites *Fuzzy Fiber* sous charge cyclique. Une homogénéisation hiérarchique par transition d'échelles est proposée pour étudier les interactions entre l'interphase renforcée par des CNTs, la couche d'enrobage et la matrice. Un modèle de fibre équivalent est développé, remplaçant les inhomogénéités par une seule fibre qui capture la réponse inélastique du composite. En utilisant l'assemblage de cylindres composites (CCA), l'analyse du champ de transformation (TFA) et l'homogénéisation périodique, l'étude améliore l'efficacité du calcul tout en préservant le transfert de charge clé et les interactions interfaciales. Le modèle de fibre équivalente prédit efficacement le comportement mécanique macroscopique, permettant des études paramétriques et leur impact sur le comportement contrainte-déformation du composite.

### **Abstract**

The growing demand for advanced multifunctional composites in the aerospace and automotive sectors has fueled interest in materials capable of withstanding complex thermo-electro-mechanical conditions. Among these materials, *Fuzzy Fiber* composites, formed by grafting carbon nanotubes (CNTs) onto fiber reinforcements, offer enhanced interfacial adhesion, increased mechanical resilience, and multifunctional properties such as electrical conductivity and piezoelectricity. These attributes make them ideal for lightweight, heat-resistant aerospace components and structural health monitoring systems. This study focuses on modeling the viscoplastic behavior and damage mechanisms of *Fuzzy Fiber* composites under cyclic loading. A scale transition hierarchical homogenization approach is adopted to analyze the interactions between the CNT-reinforced interphase, the coating layer, and the matrix. An equivalent fiber model is developed, replacing inhomogeneities with a single fiber that captures the composite's inelastic response. Using the Composite Cylinder Assembly (CCA), Transformation Field Analysis (TFA), and periodic homogenization, the study improves computational efficiency while preserving key load transfer mechanisms and interfacial interactions. The equivalent fiber model effectively predicts the macroscopic mechanical behavior, enabling parametric studies and assessing their impact on the composite's stress-strain response.

**Mots Clés :** Composites *Fuzzy Fiber*, Nanotubes de carbone, Viscoplasticité, Mécanismes d'endommagement interfacial

**Keywords :** *Fuzzy Fiber* composites, Carbon nanotubes, Viscoplasticity, Interfacial damage mechanisms

## **1. Introduction**

Les nanotubes de carbone (CNTs), découverts par Iijima en 1991 [1], suscitent un intérêt croissant en raison de leurs propriétés mécaniques et thermiques exceptionnelles [2, 3, 4]. Leur structure tubulaire, issue du repliement de feuillets de graphène, leur confère une résistance élevée, une excellente

conductivité électrique et une faible densité [5, 6]. Ces caractéristiques les rendent particulièrement adaptés aux composites structuraux et aux dispositifs électroniques [7].

Une approche émergente dans les composites consiste à greffer des CNTs sur des fibres via dépôt chimique en phase vapeur pour créer des « Fuzzy Fibers » [8]. Cette technique améliore l'adhésion interfaciale et la rigidité des composites haute performance. Les études théoriques ont exploré les effets des CNTs ondulés sur leurs propriétés mécaniques [9], notamment à travers des modèles analytiques et numériques en élasticité [10, 2], élasto-plasticité [11, 12] et thermo-élasticité [13].

Les composites Fuzzy Fiber sont modélisés sur trois échelles : microscopique (CNTs dans la matrice), mésoscopique (fibre enrobée) et macroscopique (structure globale) [11]. Différentes approches de modélisation existent, dont Mori-Tanaka pour estimer l'évolution des endommagements [14], l'assemblage de cylindres composites (CCA) pour simplifier la microstructure [15] et l'homogénéisation périodique pour analyser la distribution des contraintes [16].

Les avancées récentes en simulation, notamment par éléments finis [17], volumes finis et transformée de Fourier rapide (FFT), permettent une modélisation précise des composites. Cependant, la réponse élasto-visco-plastique des interphases CNTs reste peu étudiée. Ce travail propose un cadre de modélisation multi-échelle intégrant l'évolution des endommagements interfaciaux via une combinaison des modèles CCA et TFA [11].

## 2. Les composites Fuzzy Fiber

Les composites Fuzzy Fibers étudiées sont constituées de fibres revêtues d'une interphase nanocomposite (NCP) renforcée par des nanotubes de carbone (CNTs), elles-mêmes entourées d'un revêtement polymère et immergées dans une matrice polymère viscoplastique (Fig. 1). Cette architecture hiérarchique unique permet d'améliorer l'adhésion interfaciale et les performances mécaniques du composite. La structure multi-échelle de ces composites repose sur l'interaction entre quatre phases distinctes :

- (i) : la fibre, qui constitue l'élément porteur principal du composite se comporte de manière purement élastique ;
- (ii) : l'interphase nanocomposite (NCP), formée par l'enrobage de la fibre principale avec une matrice renforcée par des CNTs, dont la réponse mécanique est obtenue par des techniques d'homogénéisation ;
- (iii) : le coating, situé à l'interface entre l'interphase nanocomposite et la matrice, où des mécanismes d'endommagement locaux sont modélisés via une croissance progressive des microvides ;
- (iv) : la matrice polymère, caractérisée par un comportement viscoplastique isotrope. Le modèle elasto-viscoplastique adopté est celui de Lemaitre and Chaboche., 2002 [18] (Eq. 1).

$$\sigma_p(p) = [Y + Q_1 p + Q_2(1 - e^{-bp})] + K_a \dot{p}^{\frac{1}{n_a}}. \quad (\text{Eq. 1})$$

L'intégration de ces phases dans une approche de modélisation hiérarchique permet de capturer les effets couplés de la rigidité des CNTs, de la résistance de l'interface et des mécanismes d'endommagement. Dans ce cadre, l'introduction d'une fibre équivalente simplifie le problème en remplaçant la fibre principale, l'interphase nanocomposite et le coating par un seul élément dont le comportement mécanique global reproduit fidèlement l'interaction complexe des différentes phases. Cette approche permet d'obtenir une description précise de la réponse mécanique du matériau tout en réduisant le coût computationnel des simulations numériques.

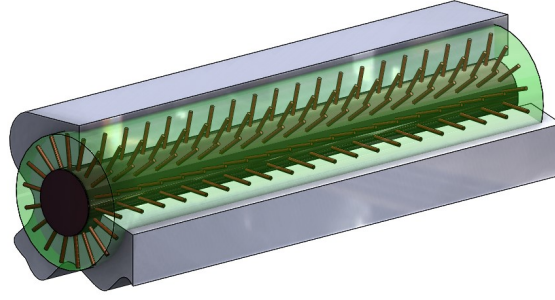


Fig. 1. – Représentation schématique des composites Fuzzy Fiber avec des CNTs greffés radialement sur les fibres.

## 2.1. Le modèle de la fibre équivalente

Le système complexe d'inhomogénéités, constitué de la fibre, de l'interphase nanocomposite (NCP) et du coating, est remplacé par une seule inhomogénéité équivalente, appelée fibre équivalente (Fig. 2). Cette substitution est étudiée grâce à l'approche combinée CCA et TFA. Les résultats numériques démontrent que l'approche de la fibre équivalente offre une bonne précision.

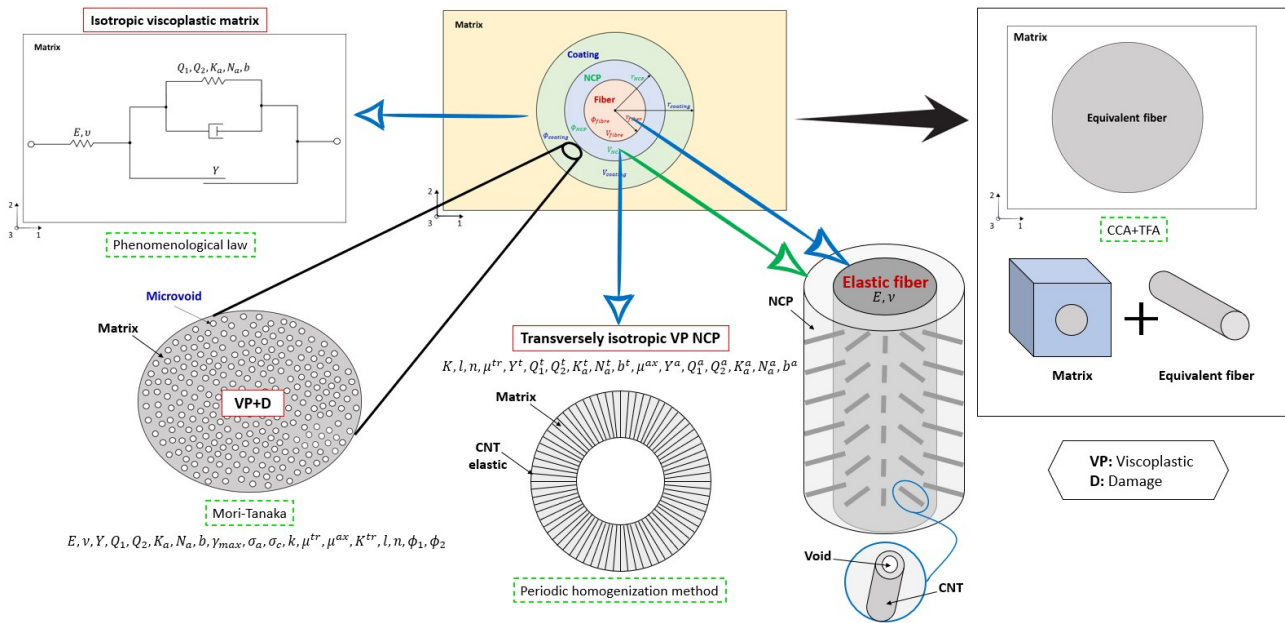


Fig. 2. – Représentation schématique du processus de substitution utilisé pour simplifier l'analyse du système composite. La fibre, l'interphase nanocomposite (NCP) et le coating sont remplacés par une inhomogénéité équivalente, appelée fibre équivalente.

Le concept de création de la fibre équivalente repose sur les équations Eq. 2 et Eq. 3, qui expriment la déformation moyenne  $\epsilon_i$  et la contrainte moyenne  $\sigma_i$  dans chaque phase  $i$  :

$$\epsilon_i = \mathbf{T}_i : \epsilon_0 + \mathbf{T}_{h,i}^p : \sigma_h^p + \sum_{j=1}^N \mathbf{T}_{j,i}^p : \sigma_j^p, \quad i = h, 1, 2, \dots, N. \quad (\text{Eq. 2})$$

$$\sigma_i = \mathbf{H}_i : \epsilon_0 + \mathbf{H}_{h,i}^p : \sigma_h^p + \sum_{j=1}^N \mathbf{H}_{j,i}^p : \sigma_j^p, \quad i = h, 1, 2, \dots, N. \quad (\text{Eq. 3})$$

Où  $\epsilon_0$  désigne la déformation moyenne dans la matrice,  $\mathbf{T}$  et  $\mathbf{H}$  sont les tenseurs de concentration dilués pour la déformation et la contrainte, respectivement, tandis que  $\mathbf{T}^P$  et  $\mathbf{H}^P$  sont les tenseurs inélastiques pour la déformation et la contrainte, respectivement. Les développements mathématiques ayant permis la formulation des ces deux tenseurs sont détaillés dans [12].

## 2.2. Etude paramétrique

Étant donné la précision de l'approche de la fibre équivalente, les analyses paramétriques exploiteront ce modèle pour étudier l'influence de certains paramètres, notamment la fraction volumique de la matrice  $c_m$ , sur la fibre équivalente et les propriétés globales du composite. En s'appuyant sur les propriétés matérielles identifiées, il a été conclu que le modèle subit une déformation non linéaire pour différentes valeurs de  $c_m$ , afin d'évaluer son impact sur la répartition des propriétés sous charge.

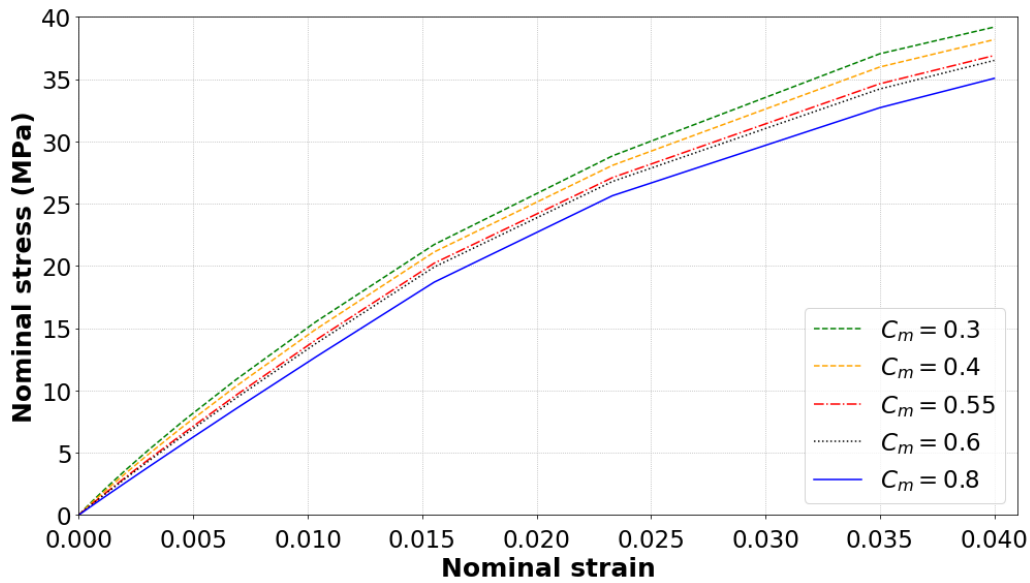


FIG. 3. – Courbes contrainte-déformation nominales, en cisaillement 1-2, obtenue pour le modèle de fibre équivalente pour différentes valeurs de  $c_m$ . Les courbes correspondent aux valeurs de  $c_m$  suivantes :  $c_m = 0.3$ ,  $c_m = 0.4$ ,  $c_m = 0.55$ ,  $c_m = 0.6$ , et  $c_m = 0.8$ . Toutes les simulations sont réalisées à un taux de déformation de  $10^{-5} \text{ s}^{-1}$ .

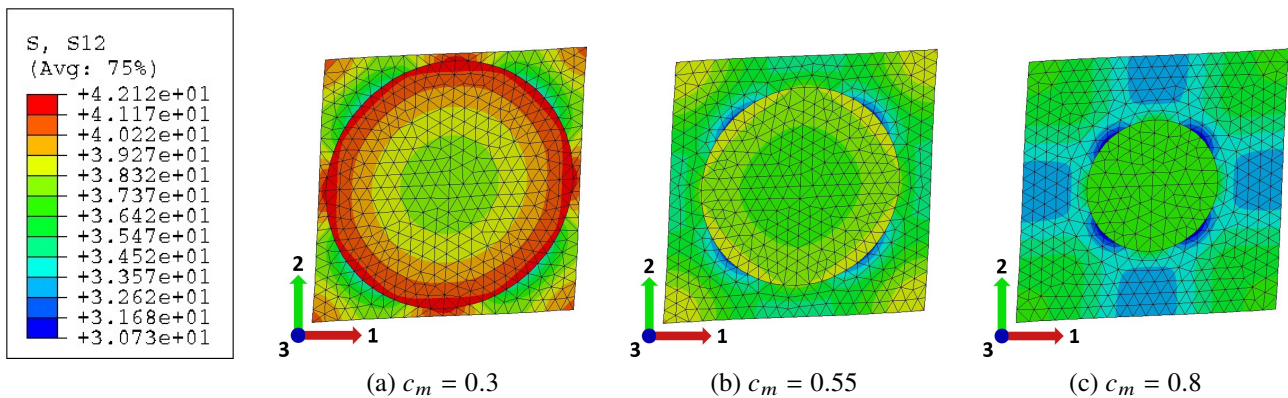


FIG. 4. – Distribution de la contrainte de cisaillement sur le modèle de fibre équivalente pour différents valeurs de la fraction volumique de la matrice  $c_m$ , illustrant l'évolution de la contrainte de cisaillement pour (a)  $c_m = 0.3$ , (b)  $c_m = 0.55$  et (c)  $c_m = 0.8$ . Toutes les simulations sont effectuées à un taux de déformation de  $10^{-5} \text{ s}^{-1}$ .

La réponse contrainte-déformation du modèle de fibre équivalente varie avec  $c_m$ . Une diminution de  $c_m$  entraîne une augmentation de la contrainte nominale, traduisant une rigidité accrue du composite, due à la moindre proportion de matrice, généralement moins performante mécaniquement que la fibre.

### 3. Conclusion

Cette étude a abouti à un cadre micromécanique innovant pour la modélisation et l'optimisation des composites Fuzzy Fiber, intégrant une matrice viscoplastique isotrope et un mécanisme d'endommagement par microvides dans la couche d'enrobage. Un apport majeur réside dans le développement d'un modèle de fibre équivalente, simplifiant la structure multiphasique du composite et facilitant les analyses paramétriques. Les résultats confirment une forte corrélation entre la fibre équivalente et le composite complet, avec de légères divergences en régime non linéaire, attribuables aux choix de maillage et aux approximations du modèle.

Cette approche ouvre ainsi la voie à l'intégration d'algorithmes de machine learning, permettant de développer un outil de modélisation basé sur les données [19], capable d'apporter en temps réel des corrections prédictives pour optimiser les performances des composites Fuzzy Fiber.

### Remerciements

Les auteurs remercient chaleureusement le centre HPC Cassiopée des Arts et Métiers pour la mise à disposition de ses ressources qui leur a permis de mener à bien leurs recherches présentées dans ce document.

### Références

- [1] S. Iijima « Helical microtubules of graphitic carbon », *Nature* Vol. 354, pp. 56–58, 1991.
- [2] G. Chatzigeorgiou, G. D. Seidel, D. C. Lagoudas « Effective mechanical properties of “fuzzy fiber” composites », *Composites Part B : Engineering* Vol. 43 n° 6, pp. 2577–2593, 2012, ISSN 1359-8368, homogenization and Micromechanics of Smart and Multifunctional Materials.
- [3] S. Kundalwal, M. Ray « Effective properties of a novel composite reinforced with short carbon fibers and radially aligned carbon nanotubes », *Mechanics of Materials* Vol. 53, pp. 47–60, 2012, ISSN 0167-6636.
- [4] J. Hone, M. Whitney, A. Zettl « Thermal conductivity of single-walled carbon nanotubes », *Synthetic Metals* Vol. 103 n° 1, pp. 2498–2499, 1999, ISSN 0379-6779, international Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.
- [5] H. Qian, E. S. Greenhalgh, M. S. P. Shaffer, A. Bismarck « Carbon nanotube-based hierarchical composites : a review », *J. Mater. Chem.* Vol. 20, pp. 4751–4762, 2010.
- [6] Q. Song, K.-z. Li, H.-l. Li, H.-j. Li, C. Ren « Grafting straight carbon nanotubes radially onto carbon fibers and their effect on the mechanical properties of carbon/carbon composites », *Carbon* Vol. 50, pp. 3949–3952, 2012.
- [7] J. Sebastian, N. Schehl, M. Bouchard, M. Boehle, L. Li, A. Lagounov, K. Lafdi « Health monitoring of structural composites with embedded carbon nanotube coated glass fiber sensors », *Carbon* Vol. 66, pp. 191–200, 2014, ISSN 0008-6223.
- [8] D. B. Anthony, H. Qian, A. J. Clancy, E. S. Greenhalgh, A. Bismarck, M. S. P. Shaffer « Applying a potential difference to minimise damage to carbon fibres during carbon nanotube grafting by chemical vapour deposition », *Nanotechnology* Vol. 28 n° 30, pp. 305602, 2017.
- [9] Y. Rao, J. Ban, S. Yao, K. Wang, N. Wei, Y. Lu, S. Ahzi « A hierarchical prediction scheme for effective properties of fuzzy fiber reinforced composites with two-scale interphases : Based on three-phase bridging model », *Mechanics of Materials* Vol. 152, pp. 103653, 2021, ISSN 0167-6636.
- [10] G. Chatzigeorgiou, Y. Efendiev, D. C. Lagoudas « Homogenization of aligned “fuzzy fiber” composites », *International Journal of Solids and Structures* Vol. 48 n° 19, pp. 2668–2680, 2011, ISSN 0020-7683.
- [11] G. Chatzigeorgiou, F. Meraghni, N. Charalambakis, A. Benaarbia « Multiscale modeling accounting for inelastic mechanisms of fuzzy fiber composites with straight or wavy carbon nanotubes », *International Journal of Solids and Structures* Vol. 202, pp. 39–57, 2020, ISSN 0020-7683.
- [12] Q. Chen, G. Chatzigeorgiou, F. Meraghni « Hybrid hierarchical homogenization theory for unidirectional CNTs-coated fuzzy fiber composites undergoing inelastic deformations », *Composites Science and Technology* Vol. 215, pp. 109012, 2021, ISSN 0266-3538.
- [13] S. Kundalwal, M. Ray « Effect of carbon nanotube waviness on the effective thermoelastic properties of a novel continuous fuzzy fiber reinforced composite », *Composites Part B : Engineering* Vol. 57, pp. 199–209, 2014, ISSN 1359-8368.

- [14] M. Barral, G. Chatzigeorgiou, F. Meraghni, R. Léon « Homogenization using modified Mori-Tanaka and TFA framework for elastoplastic-viscoelastic-viscoplastic composites : Theory and numerical validation », *International Journal of Plasticity* Vol. 127, pp. 102632, 2020, ISSN 0749-6419.
- [15] Z. Hashin, B. W. Rosen « The Elastic Moduli of Fiber-Reinforced Materials », *Journal of Applied Mechanics* Vol. 31 n° 2, pp. 223–232, 1964, ISSN 0021-8936.
- [16] G. Seidel, G. Chatzigeorgiou, X. Ren, D. Lagoudas, Multiscale Modeling of Multifunctional Fuzzy Fibers Based on Multi-Walled Carbon Nanotubes, vol. 188, ISBN 978-3-319-01200-1, , pp. 135–176, 2014.
- [17] R. Malekimoghadam, U. Icardi « Prediction of mechanical properties of carbon nanotube–carbon fiber reinforced hybrid composites using multi-scale finite element modelling », *Composites Part B : Engineering* Vol. 177, pp. 107405, 2019, ISSN 1359-8368.
- [18] J. Lemaitre, J. L. Chaboche, *Mechanics of solid materials*, Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [19] M. El Fallaki Idrissi, F. Praud, F. Meraghni, F. Chinesta, G. Chatzigeorgiou « Multiscale Thermodynamics-Informed Neural Networks (MuTINN) towards fast and frugal inelastic computation of woven composite structures », *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* Vol. 186, pp. 105604, 2024, ISSN 0022-5096.