

Conception de Volumes Élémentaires Représentatifs Stochastiques (VERS) pour composites à fibres naturelles

D. Ngouloubi¹, P. Karamian-Surville¹, D. Choi¹

¹ Université de Caen Normandie, UNICAEN, CNRS, Laboratoire de Mathématiques Nicolas Oresme, Caen, France
(exauce-devine.ngouloubi@unicaen.fr, philippe.karamian@unicaen.fr, daniel.choi@unicaen.fr)

Résumé — La modélisation des composites renforcés par fibres naturelles exige la construction de Volumes Élémentaires Représentatifs (VER) capables de restituer des géométries fibreuses complexes, fortement courbées, tortueuses et à section polymorphe, tout en permettant de représenter des densités d'empilement élevées. Dans cette étude, nous proposons un cadre numérique original qui sort du cadres des approches géométriques rudimentaires, telles que les modèles sinusoïdaux, ainsi que les stratégies de placement traditionnellement contraignantes. Notre méthode combine un modèle de fibre tubulaire continue à section variable, intégrant une tortuosité de nature stochastique, à un algorithme de remplissage performant fondé sur la méthode RSA, permettant d'atteindre des fractions volumiques élevées tout en reproduisant fidèlement des distributions réalistes des fibres naturelles. Cette approche ouvre la voie au développement de jumeaux numériques robuste, fiable et précis pour la prédiction des propriétés effectives de ces composites.

Mots clés — RSA, VER, Fibres courbes, Composites naturels, Fraction volumique élevée.

1 Introduction

La modélisation numérique des matériaux composites renforcés par fibres repose sur la capacité à générer des microstructures représentatives réalistes, intégrant à la fois la géométrie des fibres et leur organisation spatiale. Historiquement, une simplification courante consiste à approximer les fibres par des cylindres droits et rigides, distribués dans le domaine par des algorithmes de type Random Sequential Adsorption (RSA) [1]. Cette stratégie, bien que séduisante par sa simplicité, souffre de deux limitations majeures : d'une part, l'approximation géométrique néglige les courbures réelles observées dans les fibres naturelles ou techniques ; d'autre part, dans un RSA 3D strict, la fraction volumique de blocage reste limitée à $\approx 38\%$ – 43% pour des particules quasi sphériques ou faiblement allongées ($1 \leq L/D \leq 3$) et chute en dessous de $\approx 10\%$, pour des fibres beaucoup plus élancées ($L/D \geq 10$), en raison du blocage induit par la nature séquentielle du placement [2, 3, 4].

Diverses extensions du RSA ont été proposées pour dépasser ce blocage. Pour des fibres modérément courbes, avec des rapports d'aspect $L/D \simeq 5$ à 15, Chen et al. [5] modifient le schéma séquentiel en ajoutant, après un échec de placement, une série de « small moves » : la fibre candidate subit plusieurs petites translations/rotations locales dans un voisinage limité avant d'être définitivement rejetée. Cette stratégie permet de porter la fraction volumique maximale à 20% – 25% pour $L/D \approx 5$ et d'environ 14% – 15% pour $L/D \approx 15$, soit une amélioration notable par rapport au RSA classique, mais encore loin des fractions volumique industrielles. Kumar et al. [6] séparent explicitement la génération de la trajectoire et la validation géométrique : les fibres ($L \approx 100$ pour un rayon $r = 2$, soit $L/D \approx 25$) sont d'abord générées comme trajectoires continues d'une sphère chargée se déplaçant dans un champ de répulsion créé par des ellipsoïdes auxiliaires, puis cette trajectoire est épaissie en chaîne de sphéro-cylindres et testée a posteriori pour exclure tout chevauchement. Avec ce schéma, ils réalisent des RVEs périodiques contenant des fibres longues, avec des fractions volumiques jusqu'à $V_f \approx 40\%$ – 46% selon l'orientation (alignée ou 3D aléatoire). Enfin, des cadres véritablement globaux formulent la génération de microstructure comme un problème d'optimisation multicorps : les algorithmes SAM de Schneider et Mehta [7] et leur extension fusionnée fSAM de Lauff et al. [8] cherchent directement, dans l'espace des positions et orientations de toutes les fibres, une configuration non chevauchante qui réalise simultanément la fraction volumique

cible ($V_f \gtrsim 30\%$ pour des fibres longues) et un tenseur d'orientation prescrit. Ces approches atteignent des fractions volumiques nettement plus élevées, 32% rapporté dans [8], mais au prix d'une optimisation numérique complexe en grande dimension, et d'un contrôle indirect (via pénalisation ou contraintes) de la courbure locale des fibres.

Dans ce travail, nous développons une méthode de génération de volumes élémentaires représentatifs (VER) pour matériaux fibrés, fondée sur une modélisation géométrique continue de fibres courbes, à tortuosité modérée à élevée et à aléa contrôlé. Chaque fibre est décrite par une trajectoire continue et différentiable, construite à partir d'un repère de Bishop, par opposition aux approches segmentaires ou polygonales classiques. Nous introduisons en outre une extension rétroactive du RSA, dans laquelle le rayon des fibres est ajusté dynamiquement au cours des tentatives de placement : ce mécanisme permet de franchir les seuils de blocage liés à la densification tout en conservant un cadre strictement séquentiel, offrant ainsi un compromis clair entre contrôle géométrique, réalisme statistique et densité d'empilement. La méthodologie, incluant la construction de la fibre unitaire et l'algorithme de placement, est présentée en Section 2 ; les propriétés géométriques et statistiques des VER générés sont analysées en Section 3 ; la Section 4 conclut et discute les perspectives de ce travail.

2 Méthodologie

2.1 Génération de fibres à géométrie complexe

2.1.1 Une tortuosité stochastique réaliste

Pour reproduire la morphologie irrégulière des fibres naturelles, nous décrivons leur centre de fibre par un processus stochastique sur la direction locale. Plutôt que d'imposer des lignes droites ou des courbes déterministes, chaque fibre est générée comme une ligne moyenne aléatoire dont la direction évolue progressivement le long de la fibre.

À l'abscisse discrète k , la direction \mathbf{d}_{k+1} est obtenue à partir de la direction précédente \mathbf{d}_k en lui ajoutant une perturbation aléatoire et, si nécessaire, un biais vers une direction moyenne :

$$\mathbf{d}_{k+1} = \frac{\mathbf{d}_k + \kappa_{k+1} + \beta \mathbf{u}}{\|\mathbf{d}_k + \kappa_{k+1} + \beta \mathbf{u}\|}, \quad (1)$$

où κ_{k+1} est un bruit gaussien de variance σ^2 contrôlant le niveau de courbure, et $\beta \mathbf{u}$ un terme optionnel d'orientation préférentielle. Ce schéma définit une chaîne de Markov directionnelle simple [9], dans laquelle chaque direction ne dépend que de la précédente.

Les points P_k de la trajectoire sont ensuite obtenus en intégrant ces directions sur un pas l_k de longueur tiré selon une loi normale. La courbe finale est définie comme la spline interpolante de Catmull–Rom passant par ces points [10], ce qui fournit une trajectoire continue et dérivable (C^1), sans ruptures angulaires. Cette construction permet de contrôler directement la tortuosité et le degré d'orientation tout en conservant une description géométrique lisse et physiquement réaliste des fibres.

2.1.2 Tube à section variable

La fibre est modélisée comme un tube construit autour d'une ligne moyenne C^1 , notée $\mathbf{r}(t)$, $t \in [0, L]$. On lui associe le repère de Bishop [11] $\{\mathbf{T}(t), \mathbf{v}_1(t), \mathbf{v}_2(t)\}$, où

$$\mathbf{T}(t) = \frac{\frac{d\mathbf{r}}{dt}}{\left\| \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right\|}$$

est la tangente unitaire, et $\mathbf{v}_1(t), \mathbf{v}_2(t)$ forment une base orthonormée du plan normal transportée sans torsion artificielle le long de la courbe.

La fibre est alors définie par [12, 13] :

$$\mathcal{S}(t, u) = \mathbf{r}(t) + r_1(t) \phi_1(\theta) \mathbf{v}_1(t) + r_2(t) \phi_2(\theta) \mathbf{v}_2(t), \quad (2)$$

où $\theta \in [0, 2\pi]$ paramétrise la section fermée, et $(\phi_1(\theta), \phi_2(\theta))$ décrit une forme de référence (circulaire, elliptique, polygonale ou lobée).

Les fonctions $r_1(t)$ et $r_2(t)$ contrôlent la taille de la section dans les directions normales. Elles peuvent être choisies constantes, sinusoïdales ou définies par des variables aléatoires le long de t . On obtient ainsi, au sein d'une même fibre, des variations déterministes ou stochastiques de diamètre et de section, tout en conservant une paramétrisation angulaire unique u et une surface continue. Cette flexibilité géométrique est essentielle pour reproduire les diamètres variables et les sections non circulaires observés dans les fibres de lin, de chanvre ou certaines fibres synthétiques profilées.

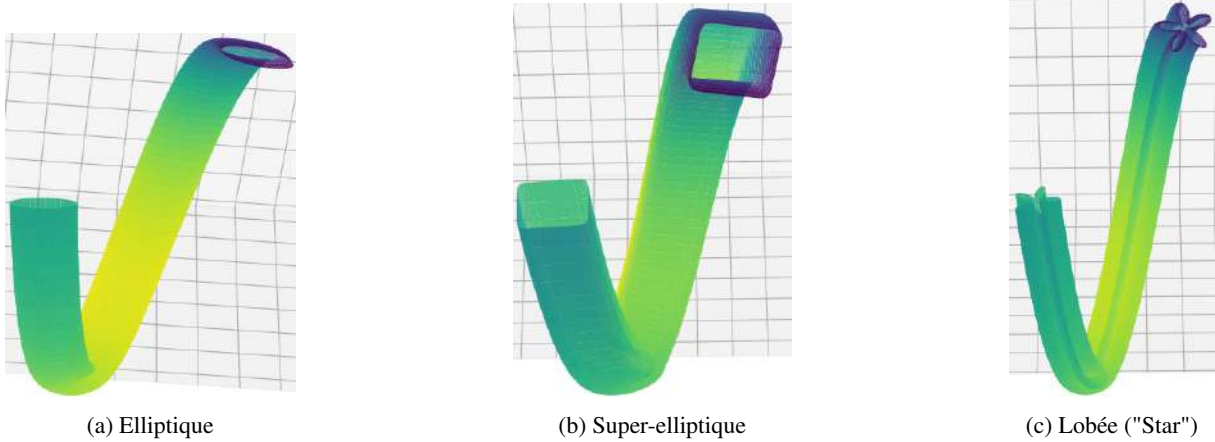


FIGURE 1 – Exemples de sections droites gérées par le modèle tubulaire.

2.2 Quantification de l'orientation pour les fibres courbes

Quantifier l'orientation d'une fibre présentant des courbures aléatoires en 3D est une problématique non triviale. Les approches classiques, qui associent un unique vecteur directeur à chaque fibre, généralement le vecteur reliant ses extrémités ("vecteur corde"), sont réductrices : elles confondent la forme intrinsèque (tortuosité) et l'orientation globale de la fibre.

Prenons l'exemple d'une fibre en forme de "U" : son vecteur corde est presque nul, ou pointe dans une direction sans rapport avec la courbure réelle. Une telle représentation conduit à sous-estimer son orientation effective et à fausser toute mesure d'anisotropie. Pour lever cette ambiguïté, il faut une méthode capable de distinguer la direction dominante d'élongation d'une fibre, indépendamment de sa forme locale.

Nous proposons une caractérisation basée sur l'**Analyse en Composantes Principales (ACP)** de la géométrie de chaque fibre, une approche conceptuellement similaire au calcul du tenseur de gyration en physique des polymères [14]. Pour chaque fibre k , décrite par un nuage de points \mathbf{r}_i , on calcule sa matrice de covariance géométrique :

$$C_k = \frac{1}{M_k} \sum_{i=1}^{M_k} (\mathbf{r}_i - \bar{\mathbf{r}}_k) \otimes (\mathbf{r}_i - \bar{\mathbf{r}}_k), \quad (3)$$

où $\bar{\mathbf{r}}_k$ est le centre du nuage de points de la fibre k . La décomposition en valeurs propres de C_k fournit une base orthonormée $(\mathbf{u}_k, \mathbf{v}_k, \mathbf{w}_k)$ qui possède une interprétation physique claire :

- L'axe principal \mathbf{u}_k décrit la direction d'élongation majeure de la fibre, une mesure robuste de son orientation globale, même pour des formes recourbées ou sinueuses ;
- Les deux autres axes caractérisent les directions principales de courbure et la normale au plan moyen de la fibre.

Afin de tenir compte de la contribution relative de chaque fibre, nous définissons un **tenseur d'orientation axial pondéré** :

$$A^{(axial)} = \frac{\sum_{k=1}^{N_{fibers}} \omega_k (\mathbf{u}_k \otimes \mathbf{u}_k)}{\sum_{k=1}^{N_{fibers}} \omega_k}, \quad (4)$$

où le poids $\omega_k = 1/\tau_k$ est inversement proportionnel à la **tortuosité** τ_k de la fibre. Ainsi, les fibres fortement courbées, dont la direction moyenne est mal définie, influencent moins l'anisotropie globale que les fibres quasi rectilignes.

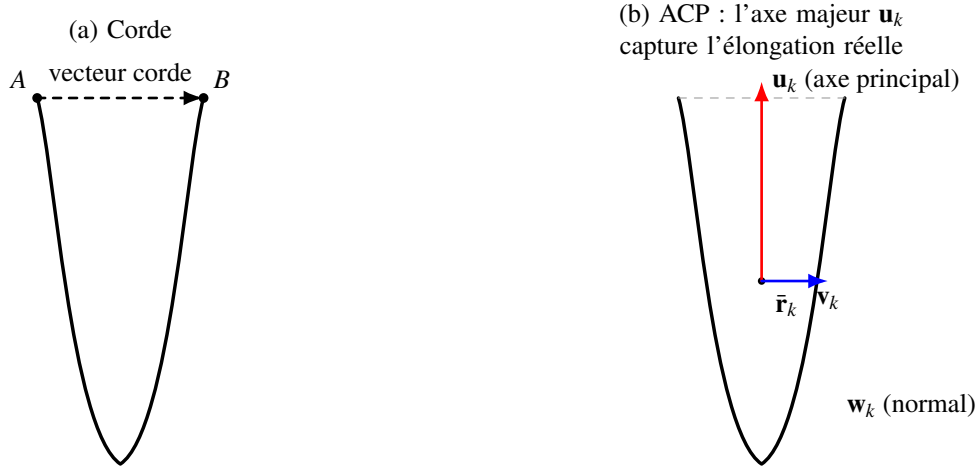


FIGURE 2 – Illustration de la supériorité de l'ACP sur le vecteur corde pour une fibre en "U" très fermé. (a) La corde devient orthogonale à la direction d'élongation de la fibre, perdant toute information directionnelle. (b) L'ACP identifie correctement l'axe majeur d'élongation (\mathbf{u}_k) et l'axe mineur de courbure (\mathbf{v}_k).

La plus grande valeur propre λ_{\max} de $A^{(axial)}$ permet ensuite de calculer le facteur scalaire :

$$f_a^{(axial)} = \frac{3}{2} \left(\lambda_{\max} - \frac{1}{3} \right), \quad (5)$$

avec $f_a = 0$ pour un état isotrope et $f_a = 1$ pour un alignement parfait [15]. Cette formulation pondérée fournit ainsi une mesure quantitative, cohérente et physiquement représentative de l'anisotropie dans des microstructures complexes.

2.3 Algorithme de placement RSA modifié pour des fraction volumiques élevées

L'algorithme RSA modifié permet de surmonter la limitation de saturation de RSA pour atteindre une V_f cible (supérieure à 30%) pour un nombre de fibre fixés. La Figure 3 présente le fonctionnement de l'algorithme RSA modifié.

Le processus itère jusqu'à ce que le nombre de fibres cibles (N_{fibers}) soit atteint. À chaque itération, une fibre candidate est générée et testée pour les collisions. Si aucune collision n'est détectée, la fibre est ajoutée au VER, et la boucle de rétroaction est activée :

- La fraction volumique actuelle $V_{f,courante}$ est comparée à une cible intermédiaire, $V_{f,desiree}$, proportionnelle au nombre de fibres déjà placées.
- Si $V_{f,courante}$ est trop élevée, indiquant un risque de blocage de placement prématuré, les rayons des sections de toutes les fibres déjà placées sont réduits uniformément (Heuristique de Mise à l'Échelle Globale des Rayons, ou GRSH). Cette étape cruciale crée de l'espace pour les insertions futures.
- Inversement, si le remplissage est trop lent, les rayon des sections pour les futures candidates sont augmentés.

Cette stratégie, qui s'appuie sur des fibres dont la longueur et le rayon ne sont pas fixes a priori, permet à l'algorithme d'explorer des configurations denses et stables inaccessibles aux méthodes usuelles. Une dilatation finale peut être mise en oeuvre à l'échelle globale pour atteindre la valeur cible V_f .

3 Résultats et Discussion

Afin d'évaluer la performance et la robustesse du l'algorithme proposé, une série d'expérimentations numériques a été réalisée pour analyser sa capacité à contrôler la géométrie des fibres et les caractéristiques de compactage dans des VER. Les études paramétriques ont porté sur l'influence des principaux paramètres de génération stochastique, le niveau de courbure (σ), le biais d'orientation (β) et la direction préférentielle (\mathbf{u}), l'efficacité de remplissage et le temps nécessaire pour concevoir les VER.

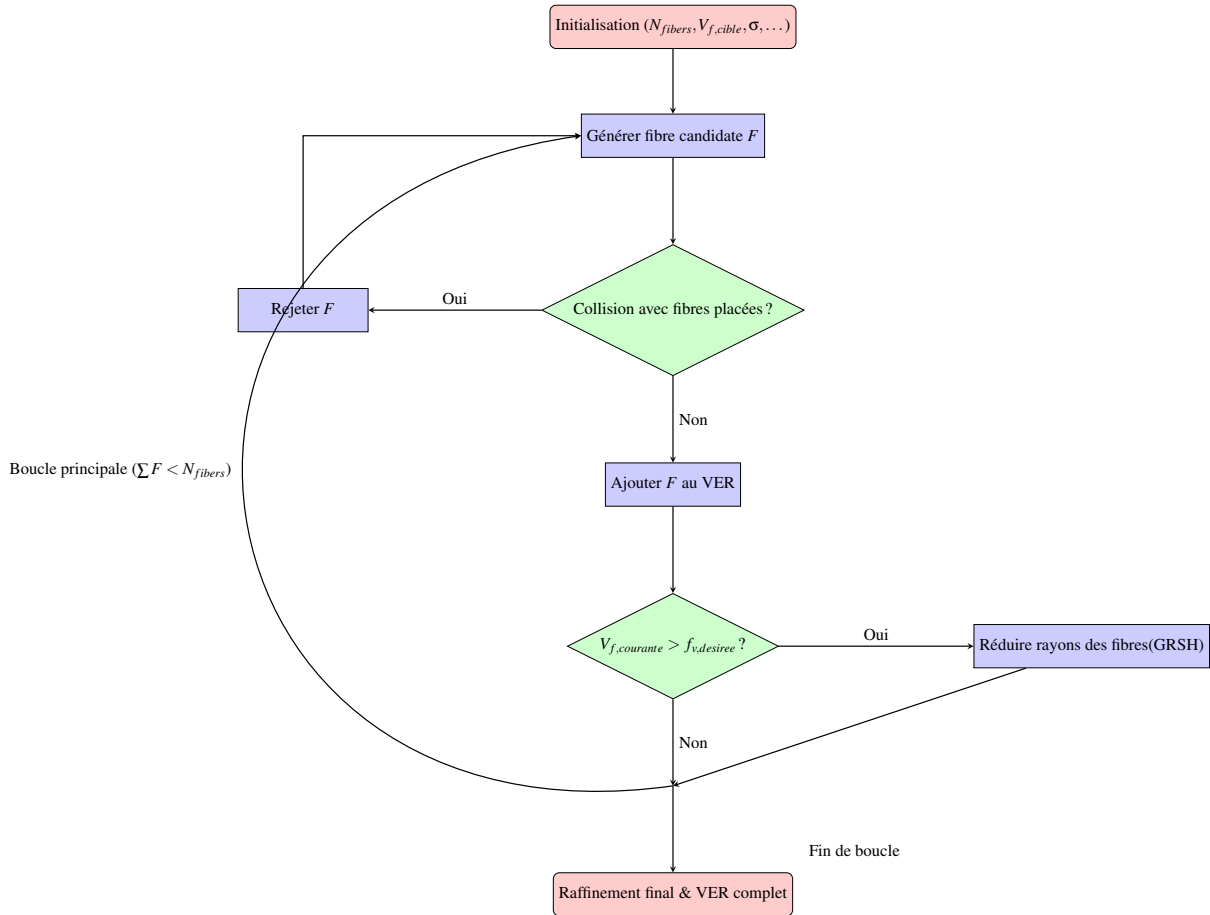


FIGURE 3 – Organigramme de l’algorithme RSA modifié. La boucle de rétroaction (décision sur f_v et GRSH) est le cœur du mécanisme permettant d’éviter le blocage.

Les simulations ont été implémentées en Python (version 3.11) et exécutées en mode séquentiel sur un processeur Intel® Core™ i5–1335U (13^e génération, 32 Go RAM), sans recours à la parallélisation. Sauf indication contraire, chaque calcul a été effectué dans un Volume Élémentaire Représentatif (VER) cubique unitaire ($L_x = L_y = L_z = 1$) avec des conditions aux limites périodiques appliquées dans les trois directions. Chaque VER contient $N_{fibers} = 100$ fibres pour une fraction volumique cible de $V_{target} = 50\%$, valeur volontairement élevée afin de tester la robustesse de l’algorithme dans un environnement fortement contraint.

La géométrie de chaque fibre est générée de manière aléatoire à partir de dix points de contrôle définissant sa ligne moyenne. Les longueurs de segments l_k considérées comme des variables aléatoires réelles indépendantes, identiquement distribuées de loi normale de moyenne $0,1L$ et d’écart-type $0,01L$, produisant des fibres à tortuosité contrôlée ($\sigma = 1,5$). Les sections sont elliptiques d’excentricité $e = 2$, tandis que les longueurs et rayons sont rétro-contrôlés sont ajustées dynamiquement par l’algorithme RSA modifié pour satisfaire la fraction volumique imposée. L’aspect-ratio (AR), le rapport de la longueur de la fibre sur son diamètre, suit un modèle aléatoire plutôt qu’une loi déterministe, reflétant plus fidèlement la variabilité géométrique observée dans les composites renforcés en fibres naturelles réalistes.

3.1 Contrôle de la microstructure

Les paramètres du modèle géométrique offrent un contrôle fin et prédictible de la microstructure générée. La Figure 5 illustre l’effet du paramètre de perturbation angulaire σ sur la forme des fibres : à mesure que σ augmente, les fibres deviennent plus sinueuses, traduisant une tortuosité moyenne croissante. De même, le paramètre de biais β pilote l’alignement global des fibres et influence directement l’état d’anisotropie du Volume Élémentaire Représentatif (VER).

Une analyse de variance à un facteur (ANOVA) est réalisée sur un ensemble de 100 réalisations

indépendantes et identiquement distribuées (*i.i.d.*) pour quantifier l'effet des paramètres σ et β .

Pour la tortuosité moyenne τ , nous appliquons une ANOVA unifactorielle avec pour facteur le niveau de bruit σ . L'hypothèse nulle $H_0^{(\sigma)}$ stipule que la moyenne $\langle \tau \rangle$ est identique pour tous les niveaux de σ , tandis que l'hypothèse alternative $H_1^{(\sigma)}$ postule qu'au moins une de ces moyennes diffère. Au seuil $\alpha = 0,05$, la p-valeur obtenue ($p_\sigma < 0,05$) conduit au rejet de $H_0^{(\sigma)}$ en faveur de $H_1^{(\sigma)}$, indiquant un effet significatif de σ sur la tortuosité des fibres.

De manière analogue, une seconde ANOVA unifactorielle est réalisée sur la composante axiale d'anisotropie $f_a^{(axial)}$, avec pour facteur le biais d'orientation β . L'hypothèse nulle $H_0^{(\beta)}$ impose une moyenne de $f_a^{(axial)}$ identique pour tous les niveaux de β , et l'hypothèse alternative $H_1^{(\beta)}$ affirme qu'au moins une moyenne diffère. Là encore, la p-valeur ($p_\beta < 0,05$) amène à rejeter $H_0^{(\beta)}$, confirmant statistiquement l'influence de β sur l'alignement global des fibres au sein du VER.

La Figure 4 résume ces résultats : la sous-figure 4a met en évidence la croissance de la tortuosité moyenne des fibres en fonctions du paramètres σ , tandis que la sous-figure 4b illustre une croissance monotone de $f_a^{(axial)}$ de 0 (état isotrope) à 1 (alignement quasi parfait) lorsque β varie dans l'intervalle $[0, 30]$. Ces observations confirment la capacité du modèle à reproduire et à contrôler de manière prédictive un large éventail d'états microstructuraux, allant des réseaux aléatoires aux assemblages fortement orientés.

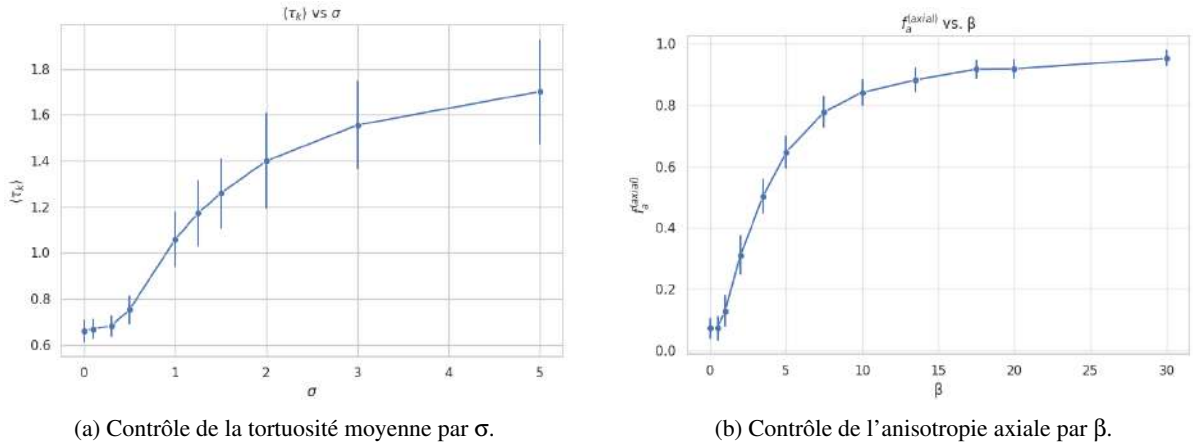


FIGURE 4 – Contrôle paramétrique de la tortuosité et de l'anisotropie.

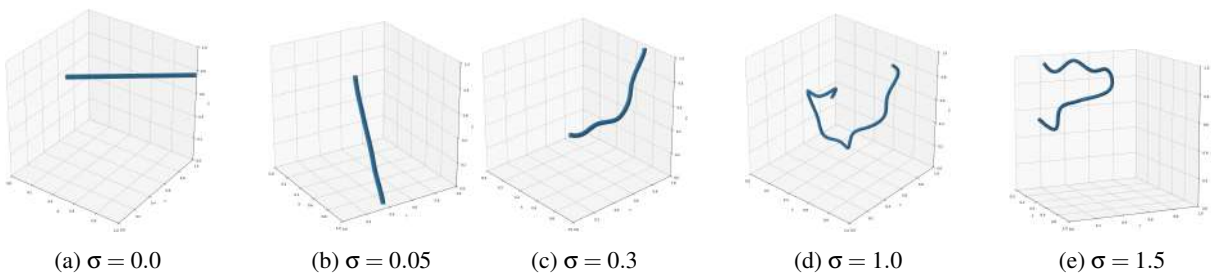


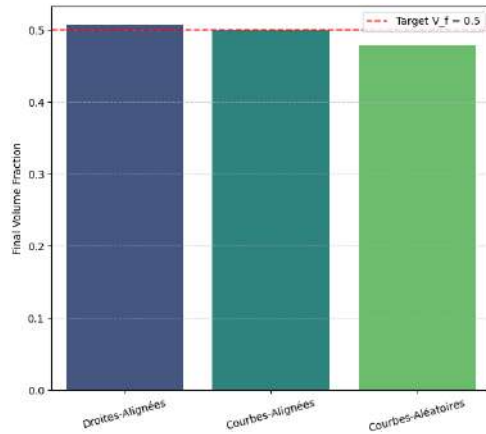
FIGURE 5 – Effect of σ on fiber bending

3.2 Atteinte de fractions volumiques élevées

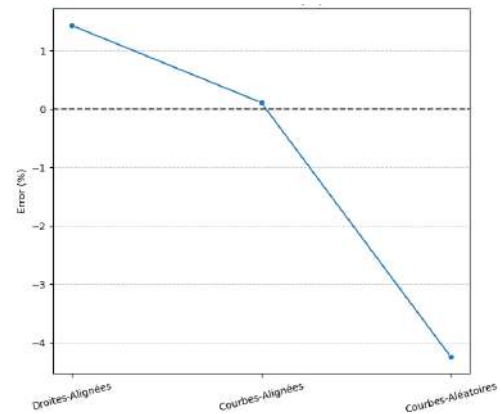
Le test le plus probant de notre approche est l'évaluation de l'algorithme RSA modifié pour des fractions volumiques élevées. Nous avons ciblé une fraction volumique de $V_f = 50\%$, une valeur inaccessible pour les méthodes RSA classiques, en utilisant différentes configurations de fibres (droites/ondulées, alignées/aléatoires) avec des longueurs et rayons non-fixes.

La Figure 6a montre la fraction volumique finale atteinte pour 3 configurations différentes. Dans tous les cas, l'algorithme converge vers la valeur cible avec une erreur relative (Figure 6b) qui varie dans l'intervalle de -4.5 à $+1.5\%$. Ce résultat démontre que le RSA modifié peut générer des VER denses

et physiquement réalistes et sans chevauchement de fibres pour des longueurs et diamètres quelconques pour les valeurs cibles souhaitées pour une V_f et nombre de fibres imposés.



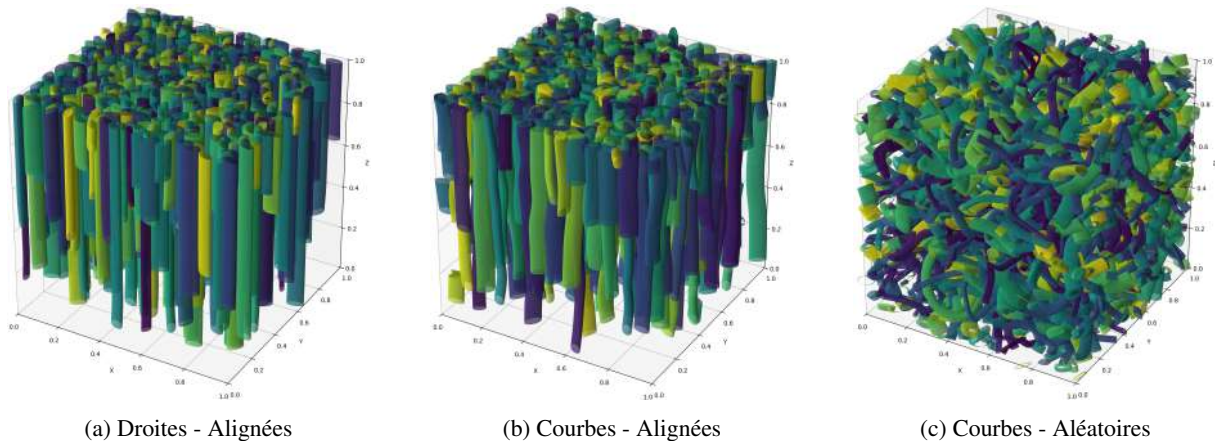
(a) Précision de la V_f atteinte pour $V_{f,cible} = 50\%$.



(b) Erreur relative (%) par rapport à la V_f cible.

FIGURE 6 – Validation de la performance de l’algorithme RSA modifié à fraction volumique élevée.

La Figure 7 illustre la polyvalence du cadre, capable de générer des microstructures variées.



(a) Droites - Alignées

(b) Courbes - Alignées

(c) Courbes - Aléatoires

FIGURE 7 – Exemples de VER contenant 500 fibres avec une V_f cible de 50%.

4 Conclusion

Nous avons proposé un algorithme de génération de VER destiné aux composites à fibres naturelles, qui pallie plusieurs défauts des approches actuelles et en contourne certaines limitations structurelles. En combinant un modèle de fibre à tortuosité stochastique et section variable avec une variante rétroactive de l’algorithme RSA, notre méthode permet :

- de générer des géométries de fibres courbes, lisses et à section non circulaire, plus proches des morphologies observées expérimentalement ;
- d’atteindre et de contrôler de façon robuste des fractions volumiques élevées (jusqu’à 50 %), y compris pour des populations de fibres hétérogènes.

Cet outil fournit ainsi une base cohérente pour la construction de VER réalistes de matériaux fibrés et ouvre la voie à des simulations micromécaniques et à la mise en place de jumeaux numériques de composites à architecture complexe.

Références

- [1] J. Feder, *Random sequential adsorption*, Journal of Theoretical Biology, 87(2), pp. 237–254, 1980.

- [2] G. Zhang and S. Torquato. *Precise algorithm to generate random sequential addition of hard hyperspheres at saturation*, Physical Review E, 88(5), 053312, 2013.
- [3] J. G. Parkhouse and A. Kelly. *The random packing of fibres in three dimensions*, Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical and Physical Sciences, 451, pp. 737–746, 1995.
- [4] P. Kubala, P. Batys, J. Barbasz, et al. *Random sequential adsorption : An efficient tool for investigating the deposition of macromolecules and colloidal particles*, Advances in Colloid and Interface Science, 306, 102692, 2022.
- [5] W. Chen, K. Fu and Y. Li. *A modified random sequential absorption algorithm for generating RVE of discontinuous curved fiber reinforced composites*, Acta Mechanica Sinica, 41, 2024, doi :10.1007/s10409-024-24434-x.
- [6] A. Kumar, T. Gupta, R. Verma, *Generation of periodic random fiber composites with tunable tortuosity and orientation using decoupled trajectory validation*, Composite Structures, 330, 118666, 2024.
- [7] R. Mehta, T. Schneider, P. Wriggers, *Stochastic adsorption and migration (SAM) : A hybrid algorithm for generating dense random packings of fiber networks*, Computational Mechanics, 70, pp. 1211–1230, 2022.
- [8] N. Lauff, A. Schubert, and P. Wriggers, *Generalized constrained optimization framework for generating realistic curved fiber networks*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 426, 117157, 2024.
- [9] Y. Caumel, *Probabilités et processus stochastiques*, Springer, 2011.
- [10] E. Catmull and R. Rom. *A class of local interpolating splines*, in R. E. Barnhill and R. F. Riesenfeld (eds.), *Computer Aided Geometric Design*, Academic Press, pp. 317–326, 1974.
- [11] R. L. Bishop. *There is more than one way to frame a curve*, The American Mathematical Monthly, 82(3), pp. 246-251, 1975.
- [12] A. Gray. *Tubes*, 2nd edition, vol. 221, Springer Basel AG, 2003.
- [13] A. Gray, E. Abbena and S. Salamon. *Modern Differential Geometry of Curves and Surfaces with Mathematica®*, 3rd edition, Chapman & Hall/CRC, 2006.
- [14] G. H. Fredrickson, *The theory of polymer dynamics*, Current Opinion in Solid State and Materials Science, 1(6), pp. 812-816, 1996.
- [15] S. G. Advani, C. L. Tucker III, *The Use of Tensors to Describe and Predict Fiber Orientation in Short Fiber Composites*, Journal of Rheology, 31(8), pp. 751-784, 1987.